

**UNIVERSIDAD NACIONAL DE CÓRDOBA**  
**Facultad de Ciencias Exactas Físicas y Naturales**

**Tesis Doctoral**



**Simulación numérica de procesos reactivos en mezclas de gases  
con múltiples componentes**

Autor: Luis F. Gutiérrez Marcantoni

Director: Prof. Dr. José P. Tamagno

Marzo de 2016



# Simulación numérica de procesos reactivos en mezclas de gases con múltiples componentes

por:  
Ing. Luis F. Gutiérrez Marcantoni

Prof. Dr. José P. Tamagno  
Director

## **COMISIÓN ASESORA**

Prof. Dr. José P. Tamagno  
FCEFyN-UNC

Prof. Dr. Sergio A. Elaskar  
FCEFyN-UNC

Prof. Dra. Andrea Costa  
FCEFyN-UNC

Esta Tesis fue enviada a la Facultad de Ciencias Exactas Físicas y Naturales de la Universidad Nacional de Córdoba para cumplimentar los requerimientos de obtención del grado académico de Doctor en Ciencias de la Ingeniería.

Córdoba, Argentina  
Marzo de 2016





ACTA DE EXAMENES

Libro: 00001

Acta: 03395

Hoja 01/01

LLAMADO: 1

23/03/2016

CATEDRA - MESA:

D1002 TESIS DOCTORADO EN CIENCIAS DE LA INGENIERIA

NUMERO	APELLIDO Y NOMBRE	DOCUMENTO	INGRESO	COND.	NOTA	FIRMA
18856725	GUTIERREZ MARCANTONI, LUIS FI	DNI: 18856725	2011	T	APROBADO	

ORENAS, Joaquin Anibal - LARRETEGUY, Axel - BRIZUELA, Eduardo - COSTA, Andrea - SCHULZ, Walkiria -

Observaciones:

JOAQUIN ORENAS

Córdoba, 23/03/2016

Certifico que la/s firma/s que ha/n sido puesta/s en la presente Acta pertenece/n a: \_\_\_\_\_

1      —      1      —      1  
 Inscriptos   Ausentes   Examinados   Reprobados   Aprobados



# Agradecimientos

En primer lugar quiero expresar mi más profundo agradecimiento a mi director el Dr. José Tagliamagna, ya que sus conocimientos, su orientación, su constante, determinante e interminable motivación han sido fundamentales para la exitosa conclusión de esta tesis.

Al Dr. Sergio Elaskar quien allá por 2011 me ofreció la posibilidad de incursionar en este apasionante mundo de la investigación. Además cuyos comentarios, recomendaciones, motivación y guía fueron de trascendental importancia durante el transcurso del desarrollo de esta tesis.

A mis compañeros becarios del departamento de aeronáutica de la facultad de ciencias exactas físicas y naturales de la UNC (Dr. Andrés Cimino, Dr. Luis Soria, Dr. Gustavo Krause y Dr. Juan Pablo Saldía) con quienes emprendimos esta empresa casi en forma simultánea. Cuyas recomendaciones e intercambio de información contribuyeron en gran medida a mejorar la calidad de lo aquí plasmado.

A los profesores del departamento de aeronáutica de la facultad de ciencias exactas físicas y naturales de la UNC (Ing. Eduardo Zapico, Ing. Jorge García, Dra. Andrea Costa, Dra. Walkiria Schultz, Ing. Eugenio Bonvin) por promover un ambiente idóneo dentro del departamento lo que hace amenas las actividades allí desarrolladas.

Al departamento de aeronáutica de la facultad de ciencias exactas de la UNC por poner a mi disposición un lugar físico, bibliografía y equipamiento computacional.

A los administradores del *cluster* Mendieta (Dr. Nicolás Wolovick, Lic. Carlos Bederián) por la asistencia proporcionada en cuanto a aspectos técnicos y de utilización del *cluster*.

Al Consejo Nacional de investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET) por el apoyo económico y de infraestructura proporcionados.



A la memoria de Genoveva Susana,  
Genoveva Vicenta y Silvia...

A mi padre Hector Mario...

A mis queridos primos Germán y Claudia...



# Resumen

Esta tesis presenta simulaciones numéricas de flujos de gases químicamente activos desarrolladas con técnicas implementadas en el entorno de trabajo ofrecido por el paquete de libre distribución openFoam™.

El Cap. 1 proporciona una introducción al contenido de la tesis, sus aspectos relevantes, objetivos a satisfacer y metodología empleada. En el Cap. 2 se ofrece una descripción de las técnicas numéricas utilizadas a lo largo de la tesis desde el contexto del entorno ofrecido por el *software* de trabajo openFoam™.

El Cap. 3 aborda el fenómeno de la combustión difusiva turbulenta, se promedian las ecuaciones de Navier-Stokes según Favre, se acopla un modelo de turbulencia de dos ecuaciones de la familia RANS al sistema de Navier-Stokes y la interacción química-turbulencia se modela mediante el concepto del reactor parcialmente mezclado. El acoplamiento presión/velocidad se trata aplicando el algoritmo PISO (*Pressure implicit with splitting of operators*), la cinética química se modela utilizando diferentes niveles de aproximación, desde una reacción global hasta 6 reacciones elementales. Se presentan y discuten resultados de validación del *benchmark* denominado llama D de *Sandia National Laboratories*.

El Cap. 4 presenta soluciones a diferentes problemas típicos de la aerodinámica supersónica empleando un método basado en presión (PISO) y diferentes técnicas pertenecientes a dos familias de métodos basados en densidad (*flux vector splitting* y *flux difference splitting*). Se analiza el desempeño de los esquemas de Kurganov et al. dentro del entorno de openFoam™ y se observa que respecto a los otros métodos disponibles los esquemas de Kurganov presentan interesantes características de rendimiento computacional manteniendo una buena precisión.

Habiendo analizado aspectos relevantes de las simulaciones de procesos químicos con bajas velocidades y estudiado diferentes técnicas aplicables a flujos supersónicos, en el Cap. 5 se exponen aspectos teóricos relevantes de las detonaciones en medios gaseosos, se desarrolla e implementa una extensión de los esquemas de Kurganov a flujos químicamente activos acoplando a las ecuaciones de Euler el sistema de ecuaciones de transporte de las especies químicas. Los efectos químicos involucrados en los términos fuentes de las ecuaciones de las especies y la energía se incorporan por medio de velocidades finitas de reacción (*finite rates*). Se utilizan diferentes modelos cinéticos para la combustión hidrógeno-oxígeno con nitrógeno y argón como diluentes. Se validan los modelos químicos contrastando con datos de referencia y se analizan diferentes criterios (5 %, 95 % y  $\max([\text{OH}])$ ) para estimar el tiempo de inducción ( $\tau_i$ ). Se selecciona el modelo cinético más apropiado en función de la calidad de los resultados y en busca de la optimización de costos computacionales. Se desarrollan simulaciones que involucran la propagación de detonaciones planas con lo cual se valida y verifica que el nuevo *solver* denominado rhoCentralRF predice datos confiables de los parámetros estáticos y dinámicos de las detonaciones. Finalmente se simulan configuraciones bidimensionales mostrando que rhoCentralRF captura de manera apropiada la estructura celular de las detonaciones.



# Abstract

This thesis presents numerical simulations of chemically active gas flows developed with techniques implemented in the framework offered by the free distributed package openFoam™.

Chapter 1 provides an introduction to the thesis contents, relevant aspects, objectives and methodology. On chapter 2 it is offered a description of the utilized numerical techniques from the context of the working environment of openFoam™.

Chapter 3 addresses the turbulent diffusive combustion problem. The Navier-Stokes equations are averaged according Favre, a RANS two equations turbulence model is coupled to close turbulent terms and chemical-turbulence interactions are modeled by the partially stirred reactor concept. The pressure-velocity coupling is solved by the pressure implicit with splitting of operators algorithm (PISO), chemical kinetics is modeled by utilizing different approximation levels, i.e, from one global reaction to 6 elementary reactions. Validation results are presented and discussed for the well known benchmark from Sandia National Laboratories called flame D.

Chapter 4 shows solutions to different typical supersonic aerodynamic problems by employing a pressure based technique (PISO) and different density based methods from two main families (flux vector splitting and flux difference splitting). It is analyzed the performance of the Kurganov schemes within the openFoam™ framework, and it is observed that in comparison to the other available methods Kurganov schemes has interesting computational efficiency and accuracy characteristics.

Having analyzed relevant aspects of the low speed combustion processes and studied different numerical techniques for supersonic flows, in chapter 5 are exposed different theoretical issues of detonation phenomena in gaseous media, it is developed and implemented an extension of Kurganov for chemically active flows by coupling to Euler equations the system of equations related with chemical species transport. Chemical effects involved in the sources terms of species and energy equations are defined in terms of finite rates. Different models are considered for combustion processes of mixtures of hydrogen/oxygen with nitrogen and argon dilution. Chemical kinetics models are validated by comparing with reference results and it is analyzed a criterion (5 %, 95 % and  $\max([\text{OH}])$ ) for induction time determination ( $\tau_i$ ). The proper chemical model is selected by attending to the quality of results and the objective of reduce computational costs. Numerical simulations of planar detonations are developed with the objective of validate and verify of the static and dynamic parameters of the detonations given by the new solver denominated rhoCentralRF. Finally two dimensional configurations are simulated showing that rhoCentralRF can capture the detonation cellular structure properly.



# Resumo

Esta tese apresenta simulações numéricas de fluxos de gases quimicamente ativos desenvolvido com técnicas implementadas no ambiente de trabalho oferecido para o pacote de distribuição gratuita openFoam<sup>TM</sup>.

O capítulo 1 provê uma introdução ao conteúdo da tese, seus aspectos gerais, objetivos para satisfazer e metodologia usada. Capítulo 2 oferece uma descrição das técnicas numéricas usado ao longo da tese do contexto do ambiente oferecido pelo *software* de trabalho openFoam<sup>TM</sup>.

Capítulo 3 aborda o problema da combustão difusão turbulenta, as equações de Navier-Stokes em média de acordo com Favre, um modelo de turbulência RANS é acoplado ao sistema de Navier-Stokes e interação química-turbulência é modelada através do conceito do reator parcialmente misturada (PaSR) (*partially stirred reactor*). Acoplamento Pressão - Velocidade é resolvido com ele algoritmo PISO (*pressure implicit with splitting of operators*), cinética química é modelado usando diferentes níveis de aproximação, a partir de uma reação de um passo a 6 reações elementares. Os resultados de *benchmark flame D* (*Sandia National Laboratories*) são apresentados e discutidos.

O Capítulo 4 apresenta várias soluções para problemas típicos da aerodinâmica supersônica através de um método baseado em pressão (PISO) e diferente técnicas que pertencem a duas famílias de métodos com base na densidade (*flux vector splitting* y *flux difference splitting*). O desempenho dos esquemas de Kurganov et al. dentro do ambiente de openFoam<sup>TM</sup> é analisado e mostra que, comparado com outros métodos disponíveis estes esquemas têm características interessantes de precisão e desempenho computacional.

Tendo analisado os aspectos relevantes dos processos de combustão de baixa velocidade e estudou diferentes técnicas numéricas para os fluxos supersônicos, no capítulo 5 são expostos diferentes questões teóricas dos fenômenos de detonação em meios gasosos, é desenvolvida e implementada uma extensão os esquemas e Kurganov para os fluxos quimicamente ativas por acoplamento a equações de Euler do sistema de equações relacionadas com o transporte de espécies químicas. Efeitos químicos envolvidos nas termos fontes de equações de espécies e energia são definidas em termos de taxas finitas. Diferentes modelos são considerados para os processos de combustão de misturas de hidrogênio/oxigênio com diluição é nitrogênio e argon. Modelos de cinética química são validadas através da comparação com resultados de referência e é analisado um critério (5 %, 95 % y  $\max([OH])$ ) para a determinação do tempo de indução ( $\tau_i$ ). O modelo químico apropriado é selecionado por atender à qualidade dos resultados eo objectivo de reduzir os custos computacionais. Simulações numéricas de detonações planos são desenvolvidos com o objetivo de validar e verificar os parâmetros estáticos e dinâmicos das detonações dadas pelo novo solver denominada rhoCentralRF. Finalmente configurações bidimensionais são simulado mostrando que rhoCentralRF pode capturar a estrutura celular detonação corretamente.



# Contenido

<b>Agradecimientos</b>	<b>I</b>
<b>Resumen</b>	<b>V</b>
<b>Abstract</b>	<b>VII</b>
<b>Resumo</b>	<b>IX</b>
<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
1.1. Introducción . . . . .	1
1.2. Justificación . . . . .	6
1.3. Objetivos . . . . .	7
1.3.1. Objetivo general . . . . .	7
1.3.2. Objetivos específicos . . . . .	7
1.4. Metodología . . . . .	7
<b>Referencias capítulo 1</b>	<b>10</b>
<b>2. Descripción general de las técnicas numéricas</b>	<b>11</b>
Nomenclatura . . . . .	11
2.1. Introducción . . . . .	13
2.2. Discretización geométrica . . . . .	14
2.2.1. Descripción del esquema de mallado . . . . .	15
2.2.2. Especificación de la malla y condiciones que debe satisfacer . . . . .	16

2.3.	Propiedades de los esquemas numéricos . . . . .	18
2.4.	Discretización de las ecuaciones (método de los volúmenes finitos) . . . . .	20
2.4.1.	Aproximación de las integrales de volumen . . . . .	22
2.4.2.	Aproximación de las integrales de de superficie . . . . .	23
2.4.3.	Términos convectivos . . . . .	24
2.4.4.	Esquemas de interpolación (Reconstrucción) . . . . .	24
2.4.5.	Términos difusivos . . . . .	32
2.4.6.	Términos fuentes . . . . .	34
2.4.7.	Reconstrucción de los gradientes. . . . .	35
2.4.8.	Esquemas de integración temporal . . . . .	39
2.5.	Métodos de solución aplicables de los sistemas de ecuaciones provenientes de la discretización . . . . .	41
2.6.	Ecuaciones diferenciales ordinarias rígidas ( <i>stiff ODES</i> ) . . . . .	43
2.6.1.	Sistemas rígidos en el modelado de las reacciones químicas: <i>time splitting</i> . . . . .	43
2.6.2.	El método semi-implícito de Bulirsh-Stoer . . . . .	44
2.7.	Algoritmo PISO . . . . .	45
2.7.1.	El problema del tablero de ajedrez: La interpolación de Rhie-Chow . . . . .	49
2.8.	Condiciones de borde e iniciales . . . . .	51
	<b>Referencias capítulo 2</b> . . . . .	<b>57</b>
<b>3.</b>	<b>Combustión difusiva turbulenta</b> . . . . .	<b>59</b>
	Nomenclatura . . . . .	59
3.1.	Promedios de Favre . . . . .	63
3.2.	Ecuaciones de transporte para un flujo con reacciones químicas . . . . .	64
3.2.1.	Ecuación de las especies en términos de la fracción de masa . . . . .	65
3.2.2.	Ecuación de la energía . . . . .	66
3.2.3.	Ecuación de la conservación de la masa y del momento . . . . .	69

3.2.4. Ecuación de estado . . . . .	70
3.3. Modelo de turbulencia . . . . .	71
3.4. Cinética química para la combustión de hidrocarburos . . . . .	72
3.4.1. Modelo de reacción global de un paso . . . . .	72
3.4.2. Términos fuentes en sistemas con múltiples reacciones químicas . . . . .	74
3.5. Modelos de Reacción para la combustión metano-aire . . . . .	75
3.5.1. Modelo de Bui-Phan . . . . .	76
3.5.2. Modelo de dos pasos de Westbrook y Dryer (WD) . . . . .	76
3.5.3. Modelo de dos pasos de Westbrook y Dryer Modificado (WDM) . . . . .	76
3.5.4. Modelo de cuatro pasos de Jones and Lindstedt (JL) . . . . .	77
3.6. Interacción química-turbulencia: el modelo PaSR . . . . .	77
3.7. Modelo termofísico . . . . .	81
3.8. Implementación numérica . . . . .	82
3.9. Caso de prueba: Llama D . . . . .	83
3.9.1. Datos para los modelos termofísico, químico y de turbulencia . . . . .	84
3.9.2. Generación de la malla . . . . .	87
3.9.3. Condiciones de borde e iniciales . . . . .	89
3.9.4. Selección de los esquemas de discretización y algoritmos de solución . . . . .	90
3.10. Resultados . . . . .	91
<b>Referencias capítulo 3</b>	<b>102</b>
<b>4. Aplicaciones al flujo supersónico</b>	<b>103</b>
Nomenclatura . . . . .	104
4.1. Propiedades del régimen supersónico . . . . .	106
4.2. Ecuaciones de transporte y modelo termofísico . . . . .	109
4.3. Técnicas de solución numérica . . . . .	111
4.3.1. Forma conservativa de las ecuaciones de gobierno . . . . .	111

4.3.2.	Métodos conservativos, el teorema de Lax-Wendroff y la condición de Entropía . . . . .	112
4.3.3.	Métodos <i>upwind</i> . . . . .	113
4.3.4.	Técnicas <i>flux difference splitting (FDS) - fluctuation splitting</i> . . . . .	114
4.3.5.	<i>Solver</i> Harten-Lax-van Leer-Contact (HLLC) . . . . .	121
4.3.6.	Técnicas <i>flux vector splitting (FVS)</i> . . . . .	122
4.3.7.	Algoritmo PISO: <i>solver</i> SonicFoam . . . . .	125
4.3.8.	Esquemas centrados de Kurganov . . . . .	127
4.4.	Casos de prueba . . . . .	135
4.4.1.	Selección de los esquemas numéricos y algoritmos de solución . . . . .	135
4.4.2.	Datos para el modelo termofísico . . . . .	136
4.4.3.	Flujo supersónico sobre un perfil tipo doble cuña . . . . .	137
4.4.4.	Flujo bidimensional en una toma de Aire supersónica . . . . .	146
4.4.5.	Flujo bidimensional y axisimétrico alrededor de un cuerpo romo . . . . .	152
	<b>Referencias capítulo 4</b>	<b>165</b>
	<b>5. Detonaciones</b>	<b>167</b>
	Nomenclatura . . . . .	167
5.1.	Modos de combustión . . . . .	170
5.2.	La Líneas de Rayleigh y la curvas de Hugoniot: relaciones de Rankine-Hugoniot . . . . .	172
5.2.1.	Líneas de Rayleigh . . . . .	172
5.2.2.	Curvas de Hugoniot . . . . .	173
5.2.3.	Ondas de detonación y deflagración . . . . .	173
5.3.	Ecuaciones de gobierno . . . . .	175
5.3.1.	Conservación de las especies . . . . .	175
5.3.2.	Conservación de la masa y el momento . . . . .	176
5.3.3.	Conservación de la energía . . . . .	176

5.3.4. Ecuación de estado . . . . .	177
5.4. Propiedades termofísicas y velocidad de propagación del sonido . . . . .	177
5.5. Teoría de Chapman-Jouguet . . . . .	178
5.6. Modelo ZND . . . . .	182
5.7. Estructura de las detonaciones en múltiples dimensiones . . . . .	183
5.8. Algoritmo de solución . . . . .	186
5.9. Condiciones de borde e iniciales . . . . .	188
5.10. Términos fuentes debidos a la actividad química: modelos cinéticos . . . . .	189
5.10.1. Modelos de Jachimowski para la combustión Hidrógeno-Aire . . . . .	189
5.10.2. Modelo cinético de Marinov 1996 para la combustión $H_2 : O_2 : Ar$ . . . . .	192
5.10.3. Verificación de los modelos químicos . . . . .	193
5.11. Casos de validación y verificación . . . . .	195
5.11.1. Tubo de choque con dos especies no reactivas . . . . .	195
5.11.2. Detonación plana unidimensional hidrógeno-aire (mezcla estequiométrica) . . . . .	198
5.11.3. Velocidad de la detonación en función de la relación de equivalencia para una mezcla $H_2$ -Aire . . . . .	202
5.11.4. Sobre la estructura de una detonación plana que cumple con la condición de Chapman Jouguet . . . . .	203
5.11.5. Convergencia hacia la velocidad de Chapman-Jouguet . . . . .	206
5.11.6. Ignición por reflexión de una onda de choque . . . . .	208
5.11.7. Múltiples reflexiones inducidas por una detonación plana, comparación con el caso no reactivo ( $2H_2 : O_2 : 7Ar$ ) . . . . .	211
5.11.8. Simulación bidimensional de la estructura celular de una detonación originada por puntos de alta energía en una mezcla $2H_2 : O_2 : 7Ar$ . . . . .	213
<b>Referencias capítulo 5</b>	<b>224</b>
<b>6. Conclusiones, aportes y trabajo futuro</b>	<b>225</b>
<b>A. Escalamiento de rhoCentralRF en el cluster Mendieta</b>	<b>235</b>

---

<b>B. Discretización las ecuaciones en openFoam™</b>	<b>239</b>
B.0.9. Escritura de las ecuaciones . . . . .	239
B.0.10. Selección de los esquemas de discretización . . . . .	240
B.0.11. Selección de los métodos de solución y configuración del algoritmo PISO .	241
B.1. Unidades en openfoam™ . . . . .	243

# Lista de figuras

2.1. Arreglos de mallado . . . . .	15
2.2. Celda poliédrica arbitraria . . . . .	16
2.3. Vector normal a una cara según el sentido de numeración de los puntos. . . . .	17
2.4. Interpolación lineal en las caras . . . . .	25
2.5. Flujo en la dirección $P \rightarrow N$ . . . . .	27
2.6. Variación de $\psi$ alrededor de la cara de la celda. . . . .	30
2.7. (a) Región TVD, (b) Esquemas central y <i>upwind</i> dentro de la región TVD, (c) Región TVD de segundo orden. . . . .	31
2.8. Corrección de la no-ortogonalidad. . . . .	32
2.9. Método de la corrección mínima . . . . .	33
2.10. Método de la corrección ortogonal . . . . .	33
2.11. Limitación del gradiente: b) reconstrucción sin limitador c) reconstrucción con limitador . . . . .	37
2.12. Diagrama de flujo algoritmo piso flujo compresible . . . . .	49
2.13. Gradiente de presión unidimensional. . . . .	50
2.14. Celda en el contorno. . . . .	51
3.1. Variación de $k_A(T)$ en el intervalo $277 K \leq T \leq 3000 K$ . . . . .	73
3.2. Concepto del modelo PaSR . . . . .	78
3.3. Geometría del quemador utilizado en los experimentos de la llama D de <i>Sandia Labs</i> . . . . .	87
3.4. Esquema del mallado por bloques para la llama D de <i>Sandia Labs</i> . . . . .	88
3.5. Malla axisimétrica llama D de <i>Sandia</i> . . . . .	89

3.6. Distribuciones de temperatura sobre el dominio (modelos cinéticos: BP y WD) . . .	94
3.7. Distribuciones de temperatura sobre el dominio (modelos cinéticos: WDM y JL) . . .	95
3.8. Distribución de las especies sobre el eje de simetría . . . . .	96
3.9. Distribuciones de $H_2$ y $CO$ sobre el eje de simetría (modelos WD-WDM y JL). . .	97
3.10. Distribuciones de temperatura sobre el eje de simetría. . . . .	98
3.11. Residuos de $O_2, H_2O, T$ y $p$ : (a) modelo de BP (b) modelo de JL . . . . .	99
4.1. Estructura de la solución al problema de Riemann . . . . .	116
4.2. Estructura de la solución al problema de Riemann linealizado . . . . .	117
4.3. Expansión sónica . . . . .	120
4.4. Arreglos de malla unidimensional tradicional y desplazado . . . . .	128
4.5. Esquema centrados de Kurganov & Tadmor (figura adaptada de [21, 55]) . . . . .	131
4.6. Discretización por volúmenes finitos (vectores involucrados en el cómputo de $w_f$ ) .	135
4.7. Dominio de cálculo: perfil doble cuña. . . . .	137
4.8. Regiones de flujo: perfil doble cuña. . . . .	139
4.9. Campos de velocidad, presión, temperatura y entropía para el perfil doble cuña ( <i>solver</i> : rhoCentralFoam) . . . . .	140
4.10. Campos de velocidad, presión, temperatura y entropía para el perfil doble cuña ( <i>solver</i> : dbnsFoam-AUSM+) . . . . .	141
4.11. Campos de velocidad, presión, temperatura y entropía para el perfil doble cuña ( <i>solver</i> : dbnsFoam-HLLC) . . . . .	141
4.12. Campos de velocidad, presión, temperatura y entropía para el perfil doble cuña ( <i>solver</i> : dbnsFoam-ROE) . . . . .	142
4.13. Distribución de presión sobre una línea vertical en $x = 1.25m$ para el perfil doble cuña(E: expansión, S: choque) . . . . .	143
4.14. Distribuciones de densidad y número de Mach a $x = 1.25m$ para el perfil doble cuña	144
4.15. Tiempos de cómputo perfil doble cuña ( $\Delta t = 5e - 4s$ , $N_c = 44000$ , 16 procesadores)	144
4.16. Residuos en la norma $L_2$ de la densidad para el perfil doble cuña ( <i>solvers</i> : rhoCentralFoam, dbnsFoam(AUSM+, ROE, HLLC)) . . . . .	145
4.17. Esquema de operación toma de aire supersónica . . . . .	146

4.18. Parámetros geométricos de la toma de aire y líneas de corriente que definen a $m_c$	147
4.19. Presión sobre la rampa principal de la toma de aire ( $M_\infty = 4.0$ )	148
4.20. Detalle de la distribución de presión en el conducto interno de la toma de aire ( $M_\infty = 4.0$ ) (rhoCentralFoam)	148
4.21. Captura de aire para ( $M_\infty = [3, 4, 5, 6, 7]$ )	149
4.22. Mach, presión y densidad en el conducto de la toma de aire	150
4.23. Relación de presiones totales para la toma de aire	151
4.24. Configuración de la malla: cuerpo romo configuración 2D.	153
4.25. Distribuciones de número de Mach y presiones: cuerpo romo configuración 2D (Malla-1).	154
4.26. Distribuciones de entropía: cuerpo romo configuración 2D (Malla-1).	155
4.27. Distribuciones de número de Mach y presiones: cuerpo romo configuración 2D (Malla-2)	156
4.28. Comparación de la distancia de la onda normal determinada con rhoCentralFoam con la obtenida por medio de la correlación de Billig para un cilindro y una esfera.	157
4.29. Residuos en la norma $L_2$ de $Ma$ , $p$ , $\rho$ y $T$ para las diferentes funciones limitadoras: cuerpo romo configuración 2D.	158
4.30. Malla cuerpo romo: configuración axisimétrica.	159
4.31. Cuerpo romo axisimétrico distribuciones de Mach: rhoCentralFoam (izq) - Brooks [66] (der).	160
4.32. Cuerpo romo axisimétrico distribución de presiones : rhoCentralFoam (izq) - Brooks [66] (der).	160
4.33. Cuerpo romo axisimétrico: distribución del coeficiente de presión	161
4.34. Cuerpo romo axisimétrico: cambios de Mach, presión, temperatura y densidad a través del choque.	161
5.1. Onda de combustión unidimensional	171
5.2. Soluciones admisibles en el diagrama $\hat{p} - \hat{v}$ (Rankine-Hugoniot)	174
5.3. Curvas de Hugoniot para diferentes estados de reacción parcial ( $n = [1, 2, 3, 4, 5]$ )	180

5.4. Detonación plana de $C_2H_2 : 3O_2 : 14Ar$ propagándose de izquierda a derecha a) Perfil producido por el movimiento del fluido por una detonación producida al extremo cerrado del conducto b) Imagen tipo Schlieren del frente reactivo c) Zona de reacción ideal (ZND): perfil de presión, temperatura y termicidad d) Zona de reacción ideal (ZND) distribución de las especies (Adaptada de [32]) . . . . .	183
5.5. Estructuras celulares observadas en diferentes mezclas reactivas: (a) $2H_2 : O_2 : 17Ar$ (b) $2H_2 : O_2 : 12Ar$ (c) $H_2 : N_2O : 1.33N_2$ (d) $C_3H_8 : 5O_2 : 9N_2$ adaptada de [32] . . . . .	184
5.6. Imágenes Schlieren de una detonación propagándose en una mezcla $2H_2 : O_2 : 85Ar$ adaptada de [33] . . . . .	184
5.7. Principales parámetros de la célula de la detonación (adaptada de [1]) . . . . .	185
5.8. Verificación de los modelos químicos: Perfil de temperatura para la mezcla $H_2$ -Aire ( $\phi = 2$ ) . . . . .	193
5.9. Tiempos de inducción para la oxidación del hidrógeno en función de la temperatura: Experimentos en tubos de choque y ajuste del criterio 5 % . . . . .	194
5.10. Tiempos de inducción vs. temperatura inicial ( $2H_2 : O_2 : 7Ar$ , $p_0 = 131.7 kPa$ , $\phi = 1.0$ ) . . . . .	195
5.11. Dominio de cálculo tubo de choque . . . . .	196
5.12. Distribuciones de presión, temperatura, velocidad, densidad, velocidad del sonido y fracciones másicas: tubo de choque con dos especies no reactivas . . . . .	197
5.13. Dominio de cálculo configuración inicial . . . . .	198
5.14. Distribuciones de $p$ , $T$ , $\log_{10}(\rho)$ , $Y [H_2O]$ modelos químicos: Jachimowski 1988-1992 y Marinov 1996 ( $t = 228.4\mu s$ ) (detonación plana $H_2$ – aire) . . . . .	199
5.15. Distribución de fracciones másicas de ( $H_2O$ , $H_2$ , $O_2$ y $H_e$ ) obtenidas con el modelo de Marinov en ( $t = 228.4\mu s$ ) (detonación plana $H_2$ – aire) . . . . .	200
5.16. Velocidad del flujo y velocidad del sonido (Jachimowski 1988-1992 y Marinov 1996) ( $t = 228.4\mu s$ ) (detonación plana $H_2$ – aire) . . . . .	200
5.17. Velocidad de la detonación ( $D$ ) en función de $\phi$ mezcla $H_2$ -aire para los modelos químicos Jachimowski 1988-1992 y Marinov 1996) ( $t = 228.4\mu s$ ) . . . . .	203
5.18. Perfiles $p$ y $u + a$ detonación plana ( $2H_2 : O_2 : 7Ar$ ) . . . . .	205
5.19. Convergencia hacia la velocidad de Chapman-Jouguet detonación plana ( $2H_2 : O_2 : 7Ar$ ) . . . . .	206
5.20. Diagrama $x$ vs. $t$ detonación plana $2H_2 : O_2 : 7Ar$ . . . . .	207
5.21. Diagrama $x$ vs. $t$ detonación plana $2H_2 : O_2 : 7Ar$ (Driver: He) . . . . .	207

5.22. Configuración inicial: Ignición por reflexión de una onda de choque . . . . .	208
5.23. Evolución temporal de la presión máxima ignición por reflexión de un choque a) Numéricos Oran [50] b) Numéricos Im [51] c) rhoCentralRF d) Experimentales Oran [50] . . . . .	209
5.24. Proceso de formación de la detonación, interacción de la onda reactiva con el choque reflejado . . . . .	210
5.25. Diagrama $x$ vs. $t$ : múltiples reflexiones de una detonación plana ( $2\text{H}_2 : \text{O}_2 : 7\text{Ar}$ ) .	211
5.26. Diagrama $x$ vs. $t$ : múltiples reflexiones de una onda de choque plana ( $2\text{H}_2 : \text{O}_2 : 7\text{Ar}$ )	211
5.27. Evolución temporal de la presión en $x = 0.05\text{ m}$ (múltiples reflexiones) . . . . .	212
5.28. Evolución temporal de la temperatura en $x = 0.05\text{ m}$ (múltiples reflexiones) . . . .	212
5.29. Evolución temporal de la velocidad en $x = 0.05\text{ m}$ (múltiples reflexiones) . . . . .	213
5.30. Configuración inicial y dominio de cómputo para la simulación bidimensional de la estructura celular . . . . .	214
5.31. Visualización de la estructura celular (presión máxima hasta $t = 81\mu\text{s}$ ) (comparación con los datos de [43]) . . . . .	215
5.32. Visualización de la célula temprana (presión máxima hasta $t = 81\mu\text{s}$ ) (comparación con los datos de [43]) . . . . .	215
5.33. Visualización de la estructura celular ( $2\text{H}_2 : \text{O}_2 : 7\text{Ar}$ , dominio extendido $L_d = 0.5\text{ m}$ ) . . . . .	217
5.34. Visualización experimental ( <i>smoke foil</i> ) estructura celular $2\text{H}_2 : \text{O}_2 : 7\text{Ar}$ [66] . . . .	217
5.35. Schlieren numérico de la interacción de las ondas en el punto tripe ( $t = 81\mu\text{s}$ , $2\text{H}_2 : \text{O}_2 : 7\text{Ar}$ ) . . . . .	218
5.36. Schlieren numérico de la densidad del proceso de formación de la estructura celular ( $2\text{H}_2 : \text{O}_2 : 7\text{Ar}$ ) . . . . .	219
5.37. Isobaras del proceso de formación de la célula temprana ( $2\text{H}_2 : \text{O}_2 : 7\text{Ar}$ ) . . . . .	220
A.1. <i>Speedup</i> de rhoCentralRF en el arreglo <i>capability</i> del cluster Mendieta de la UNC	236
A.2. <i>Sizeup</i> de rhoCentralRF en el arreglo <i>capacity</i> del cluster Mendieta de la UNC . . .	237



# Lista de tablas

2.2.	Funciones limitadoras: van Leer, Sweby, van Albada, MinMod y SUPERBEE . . . . .	31
3.2.	Datos de Arrhenius para los diferentes modelos de reacción metano-aire . . . . .	77
3.3.	Composiciones en porcentajes de la fracción de masa de cada especie . . . . .	84
3.4.	Condiciones de borde llama D de <i>Sandia</i> . . . . .	90
3.5.	Tiempos de cómputo combustión CH <sub>4</sub> : Air para cada modelo cinético (BP,WD,WDM,JL) 92	
3.6.	Máxima temperatura en $x = [0.15, 0.3, 0.45]$ m para cada modelo cinético (BP,WD,WDM,JL) 93	
3.7.	Pico de temperatura en la línea central para cada modelo cinético . . . . .	97
4.2.	Funciones limitadoras: VanLeer, VanAlbada y MinMod . . . . .	134
4.3.	Condiciones de borde: perfil doble cuña . . . . .	138
4.4.	Relaciones de presión en las regiones II,III,IV y V (perfil doble cuña) . . . . .	139
4.5.	Valores máximos de p ( $S_{I-IV}$ ) perfil doble cuña . . . . .	143
4.6.	Condiciones de borde: cuerpo romo configuración 2D . . . . .	153
4.7.	Presión de impacto: cuerpo romo configuración 2D (Malla-1) . . . . .	155
5.2.	Diferencias cuantitativas entre deflagraciones y detonaciones . . . . .	172
5.3.	Datos experimentales de la velocidad de propagación de la detonación, presión y temperatura de productos para diferentes mezclas [ $p_u = 1 atm(101325 Pa), T_u =$ $298 K]$ . . . . .	182
5.4.	Modelo cinético hidrógeno-aire (Jachimowski 1988, unidades: segundos, moles, $cm^3$ , calorías y $K$ ) . . . . .	190

5.5. Modelo cinético hidrógeno-aire (Jachimowski 1992, unidades: segundos, moles, $cm^3$ , calorías y $K$ ) . . . . .	191
5.6. Modelo cinético $H_2/O_2/Ar/$ (Marinov 1996, unidades: segundos, moles, $cm^3$ , calorías y $K$ ) . . . . .	192
5.7. Condiciones iniciales: caso $N_2 - N_2^2$ . . . . .	196
5.8. Condiciones iniciales: caso $H_2 - \text{aire}$ ( $\phi = 1.0$ ) . . . . .	198
5.9. Porcentaje de error con respecto a $D_{CJ}$ (detonación plana $H_2$ -aire, $\phi = 1.0$ ) . . . . .	201
5.10. Composición en fracciones másicas: mezcla combustible $H_2$ -aire en función de $\phi$ ( $n_{O_2} = 0.5$ ) . . . . .	202
5.11. Composición en equilibrio por detrás del frente detonación plana $7Ar : 2H_2 : O_2$ . . . . .	205
5.12. Condiciones iniciales: Ignición por reflexión de una onda de choque . . . . .	208
5.13. Condiciones de borde para la simulación de la estructura celular . . . . .	214
5.14. Comparación dimensiones características de la célula $2H_2 : O_2 : 7Ar$ . . . . .	216
A.1. Tiempos de cómputo, cómputo total y número de procesadores test de escalamiento fuerte en el arreglo <i>capability</i> del cluster Mendieta de la UNC . . . . .	236
A.2. Número de procesadores, tiempos de cómputo y tamaños de malla para el test de escalamiento débil (arreglo <i>capacity</i> ) . . . . .	237
B.1. Unidades utilizadas en openfoam <sup>TM</sup> . . . . .	243

# Capítulo 1

## Introducción

### 1.1. Introducción

Un flujo químicamente activo se puede definir como aquel en el cual la evolución del proceso fluidodinámico se ve acompañada de la actividad química entre las especies que constituyen el fluido de trabajo. El estudio de flujos gasdinámicos químicamente activos comprende desde flujos subsónicos hasta flujos con altas velocidades en los que los efectos compresibles no sólo provienen de la liberación de calor sino también se deben a aportes típicos de flujos con altas velocidades. Abordar este tipo de problemas requiere acoplar al sistema fluidodinámico un modelo cinético que tiene por objetivo modelar la actividad química.

En el campo de la dinámica de fluidos computacional, actualmente uno de los métodos más populares es el de los volúmenes finitos, método que cuenta con gran aceptación por parte de la comunidad académica e industrial. El desarrollo de métodos para tratar diferentes tipos de problemas desde la aparición de la computadora ha sido casi exponencial, han aparecido gran variedad de técnicas, algunas han permanecido en el tiempo, mientras otras han sido relegadas debido a diferentes condiciones como pueden ser dificultades de implementación, deficiencias en cuanto a características de rendimiento o por no ser robustas.

La popularidad del método de los volúmenes finitos se debe a que posee un conjunto de propiedades muy interesantes: implementación muy acorde con la realidad física del problema fluidodinámico, precisión, versatilidad, robustez, ser conservativo por naturaleza y posibilitar el tratamiento de geometrías complejas al no presentar restricciones de mallado (admite mallas no estructuradas).

Algunos paquetes comerciales han demostrado ser excelentes herramientas, si embargo, por ser paquetes cerrados presentan ciertas desventajas, siendo dos de las más notables la imposibilidad de conocer detalles referentes a las técnicas utilizadas y sus costos de licencias para usuarios que van desde cientos a miles de dólares estadounidenses. Los paquetes libres por su parte brindan acceso total al código y por lo tanto son una opción muy interesante cuando se pretende desarrollar nuevas técnicas resolutivas o actuar sobre las ya existentes a los efectos de adaptarlas para un fin específico. No obstante, se debe tener en cuenta que por tratarse de paquetes de libre distribución, si bien sus desarrolladores liberan el código, no suelen documentarlo adecuadamente, por lo que es recomendable recurrir a procedimientos de verificación y/o validación.

El paquete de libre acceso denominado openFoam™ (*Open Field Operation and Manipulation*) ha adquirido gran aceptación en diversos campos de la investigación y la industria. El amplio rango de esquemas de discretización y de solución que ofrece, además de utilidades para el pre y post procesamiento de datos y resultados, hace que openFoam™ constituya una opción más que interesante a tener en cuenta en el momento de efectuar simulaciones de problemas específicos.

Esta tesis es la continuación del trabajo presentado en [1], se incluyen nuevos resultados para el problema de la combustión difusiva turbulenta a baja velocidad, buscando mejoras en la aproximación mediante la implementación de modelos químicos más complejos que involucran considerar mayor cantidad de especies y reacciones químicas. Además, se presentan nuevos resultados enfocados a evaluar las capacidades actuales de openFoam™ en lo que se refiere a flujos con altas velocidades, se evalúan algunas de las técnicas incluidas dentro del paquete, como las nuevas implementaciones de *solvers* basados en densidad (`libdbnsFoam`) liberados con la versión foam-extended 3.0 disponible desde 2014 [2, 3]. Para llevar a cabo esta labor se seleccionan problemas característicos de la aerodinámica supersónica que permiten evaluar las capacidades de los *solvers* desde el punto de vista de su capacidad para representar de forma adecuada las diferentes ondas presentes en un campo de flujo.

Simular un proceso de combustión difusiva turbulenta no es trivial, esto se debe a la exigencia impuesta al código de cómputo con respecto a requerimientos en capacidad para simular las complejas interacciones entre la fluidodinámica y la actividad química [1]. El problema se aborda mediante la solución de las ecuaciones de conservación promediadas según Favre [4]. La turbulencia se modela mediante una versión modificada del modelo  $k - \epsilon$  original [5, 6]. La interacción turbulencia-química se modela con el concepto del reactor parcialmente mezclado (PaSR) [7]. Según este concepto la celda donde se efectúa el cálculo se divide en dos zonas, una reactiva y otra que no lo es. La fracción volumétrica reactiva de la celda se define por el factor  $\kappa$  ( $0 \leq \kappa \leq 1$ ) en la forma propuesta por Marzouk y Huckbay en 2010 [8].

Cuando el proceso químico está controlado por reacciones finitas, es importante decidir sobre el nivel de la cinética relevante al problema, a saber: utilizar reacciones químicas globales únicamente, o una combinación de reacciones globales y elementales, o el conjunto de reacciones elementales en su totalidad. Esta decisión es importante porque tendrá un impacto importante en los tiempos de cómputo.

Para mejorar los resultados presentados en [1], se implementan nuevos modelos de reacción para la combustión metano-aire. Se utiliza entonces, el modelo de dos pasos de Westbrook y Dryer el cual incluye un nuevo paso reversible para la oxidación del monóxido de carbono, lo que aumenta la complejidad del modelo químico en dos reacciones y una nueva especie [9]. Wang en 2012 propone agregar un paso de oxidación del hidrógeno al mecanismo de Westbrook y Dryer lo que da como resultado un nuevo modelo de 5 reacciones y 6 especies [10]. Finalmente se considera el modelo de Jones y Lindstedt de 6 reacciones que tiene en cuenta las mismas 6 especies pero considera una configuración distinta en cuanto a los pasos de reacción considerados [11]. En cada celda del dominio computacional y para cada intervalo de tiempo, determinar los términos fuentes en las ecuaciones de conservación de las especies y el asociado a la liberación de calor en la ecuación de la energía, requiere la integración de un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias (ODEs) que por lo general son rígidas (*stiffs*). Con temperaturas por debajo de  $7000K$  la hipótesis de equilibrio térmico es aplicable, por lo que no es necesario desacoplar los modos energéticos, sin embargo la definición de la entalpía y la energía involucran aportes debidos a las entalpías de formación de cada especie. Las velocidades de reacción son funciones de las concentraciones y temperatura, esta funcionalidad se expresa por medio de la ley de Arrhenius. Numéricamente la cinética química implica resolver un sistema con dimensiones dependientes directamente del nivel

de aproximación seleccionado y requiere métodos de integración con características puntuales en lo que respecta a estabilidad y precisión debido a la amplia gama de escalas temporales presentes. Para tratar esto y garantizar la estabilidad en los cálculos, se utiliza el método semi-implícito de Bulirsch-Stoer introducido por Bader y Deufhard, el cual ha mostrado muy buenas características para tratar sistemas asociados a reacciones químicas ([12])

En un medio continuo cuando el número Mach tiende a cero, las ecuaciones de gobierno del flujo compresible tienden hacia su contraparte incompresible. Sin embargo, las simulaciones numéricas aún exigen la discretización de las ecuaciones, lo cual conduce a un problema importante cuando  $M < 0.3$  y la densidad tiende a ser independiente de la presión: la amplificación de errores *round-off* en la determinación de la presión. Este problema afecta no sólo a la convergencia sino también la exactitud y conduce a diferencias importantes entre valores de la presión obtenidos con ecuaciones discretas y continuas [13, 14]. Cuando se desarrollan técnicas numéricas para solucionar problemas de transporte cualquiera sea la velocidad (o número de Mach), se pueden seguir dos familias de técnicas: las basadas en presión y en densidad.

Aquí para el estudio de la combustión difusiva con velocidades bajas, se utiliza una técnica resolutive basada en presión, lo cual contempla el uso de la presión como variable dependiente y el agregado de la ecuación de conservación correspondiente. Se emplea entonces, el método PISO (*Pressure Implicit with Splitting of Operators*), extendido para ser aplicado a flujos compresibles [15, 16]. Se comparan resultados obtenidos con la simulación numérica del *benchmark* denominado llama D con los datos experimentales producidos por Barlow y Frank [17] y con resultados numéricos obtenidos por Christ [18]. A diferencia de los resultados presentados en [1] se agregan comparaciones para las nuevas especies (monóxido de carbono e hidrógeno), se presentan comparaciones para las distribuciones de temperatura obtenidas con los nuevos modelos químicos y a su vez se extienden las comparaciones para las especies ya presentadas en [1].

Por otro lado una detonación es básicamente una onda de choque que se propaga en un medio reactivo induciendo a su paso la combustión y sustentándose por la reacción exotérmica producida por detrás de la onda. La simulación de detonaciones es demandante desde el punto de vista computacional incluso en el contexto unidimensional; esto se debe entre otros aspectos a que para capturar de forma apropiada algunos de sus parámetros se requieren grandes niveles de refinamiento [19]. En múltiples dimensiones capturar la estructura de la detonación la cual no es plana y describe patrones celulares inducidos por inestabilidades provenientes de la cinética química, involucra aún más refinamiento y por ende demanda más recursos computacionales. Es práctica usual utilizar mallado adaptivo en conjunto con condiciones de borde que mantienen la onda dentro del dominio de cálculo, así se acota al dominio de forma tal de minimizar el costo computacional. Diferentes técnicas numéricas han sido extendidas y aplicadas al estudio de las detonaciones, desde esquemas que determinan los flujos utilizando *solvers* de Riemann, métodos de la familia WENO/ENO, el método *Space-Time Conservation Element* entre otros, consiguiendo resultados de muy buena calidad pero con grandes costos computacionales asociados.

En vista de lo anterior, aquí se propone extender la técnica de los esquemas centrados de Kurganov al estudio de las detonaciones [20–22]. Previo a esto en el Cap. 4 se analizan diferentes técnicas distribuidas con openFoam<sup>TM</sup> enfocadas al estudio de flujos no reactivos con altas velocidades. Se consideran entonces dos metodologías desde el punto de vista de las variables primitivas: métodos basados en presión (el algoritmo PISO) y métodos basados en densidad (*flux difference splitting* y *flux vector splitting*). El algoritmo PISO plantea una ecuación de transporte para la presión la cual se deriva a partir de las ecuaciones de momento y continuidad. La característica principal de este método es dividir el proceso de solución en una serie de pasos de predicción/corrección en el que las operaciones sobre la presión están desacopladas de aquellas sobre la velocidad y la energía. Las

ecuaciones resultantes son resueltas mediante técnicas estándar. Aquí se presenta la metodología correspondiente a un esquema PISO de dos etapas, con el cual se consigue también una exactitud de segundo orden (en errores de discretización) [15]. A su vez, dentro de los métodos basados en densidad dos familias de técnicas son evaluadas, la conocida como *flux difference splitting* que considera a las propias ondas y su propagación en la evaluación de los flujos numéricos y las *flux vector splitting* que involucran en su formulación únicamente la velocidad y dirección de propagación de las ondas. Si bien los esquemas de Kurganov por lo general no se agrupan formalmente en ninguna de estas categorías, en la opinión del autor y basándose en que también utiliza velocidades y direcciones de propagación locales puede ser agrupada dentro de las técnicas *flux vector splitting*. Asimismo, se evalúan diferentes esquemas de cálculo con la finalidad de observar su comportamiento en la resolución de problemas típicos de la aerodinámica supersónica, buscando cuál de las técnicas proporciona el mejor compromiso costo-precisión. La librería `libdbns` posibilita la implementación de esquemas del tipo Godunov [23], empleando diferentes esquemas para evaluar los flujos interfaciales: *solvers* de Riemann aproximados (Roe-Pike [24], HLLC [25], Rusanov [26]) o esquemas del tipo AUSM [27] como el esquema AUSM+ [28] el cual no está incluido actualmente en la distribución extendida de openFoam™ y ha sido implementado con la finalidad de obtener conocimiento del funcionamiento de esta nueva librería liberada a mediados de 2014.

Los esquemas centrados introducidos por Nessyahu y Tadmor [29] y posteriormente extendidos a segundo orden por Kurganov-Tadmor y Kurganov, Noelle y Petrova [20, 22], proponen computar los flujos numéricos producto de la discretización en volúmenes finitos aplicando funciones de flujo que no involucran el uso de *solvers* de Riemann y que por lo tanto no requieren conocer la estructura de autovalores del problema [30]. La necesidad de conocer la estructura de autovalores se considera un cuello de botella en el proceso de cómputo, además de hacerlo más complejo cuando el Jacobiano involucra términos relacionados con las especies químicas. En consecuencia, la técnica propuesta por Kurganov ofrece un enfoque de alto orden susceptible de ser extendido a la simulación de detonaciones, lo cual constituye parte primordial del objetivo de esta tesis.

Este tipo de esquemas centrados han sido continuamente mejorados, empleando información más precisa de las velocidades locales de propagación utilizadas en la construcción de los flujos y extendiéndolos a múltiples dimensiones [20–22, 31]. Los esquemas centrados resultan ser además de eficientes, aplicables en mallas no estructuradas lo que ofrece una ventaja desde el contexto de abordar problemas que involucran geometrías complejas [32, 33]. Estos han sido aplicados a múltiples problemas, desde flujos incompresibles [34, 35], problemas de elasticidad [36], aplicaciones en semi-conductores [37], simulaciones de la magneto-hidrodinámica [38, 39] y flujos multifásicos [40] entre otros campos. A pesar de que los esquemas del tipo centrados han sido ampliamente utilizados, se registran muy pocas aplicaciones en el campo de la combustión, el trabajo presentado por Kurganov en 2003 describe una aplicación de estos para resolver ecuaciones hiperbólicas en una dimensión que involucran términos fuentes empleando un modelo reactivo binario [41]. En esta tesis se presenta una extensión de la implementación de los esquemas centrados de Kurganov en el entorno de openFoam™ a flujos químicamente activos empleando modelos de reacción complejos y aproximando todas las propiedades termofísicas relevantes con las tablas JANAF [42].

En un proceso detonante el mecanismo principal de ignición es la onda de compresión que inicia la reacción exotérmica [19]. Los efectos convectivos resultan más relevantes que los difusivos cuando se estudia la formación y propagación de dicha onda en el medio reactivo, por lo tanto se restringe la simulación al tratamiento de los términos convectivos y reactivos, es decir que se abordan y solucionan las ecuaciones de Euler en conjunto con las de las especies reactivas involucradas. La parte reactiva se modela empleando un modelo de velocidades finitas de reacción (*finite rate chemistry*), donde las velocidades de progreso y retroceso de las reacciones (ya sean globa-

les o elementales) se definen en función de constantes que tienen la forma de Arrhenius [43–47]. Se presentan simulaciones que involucran resolver no sólo el problema fluidodinámico, sino que requieren modelar la cinética química del sistema, para ello se utilizan dos modelos para la oxidación hidrógeno-aire propuestos por Jachimowski [48, 49] y otro introducido por Marinov [50], los modelos de Jachimowski involucran 13 especies y 33 reacciones mientras que el de Marinov 10 especies y 20 reacciones elementales.

Los métodos implícitos cuya principal ventaja es que el paso de tiempo  $\Delta t$  no está condicionado (teóricamente) por consideraciones de estabilidad, tienen la desventaja de incorporar la necesidad de resolver grandes sistemas de ecuaciones no lineales por cada paso de tiempo lo que los hace excesivamente costosos. Adicionalmente, se ha demostrado que el uso de grandes pasos de tiempo con esquemas implícitos incrementa el amortiguamiento numérico haciendo que los resultados obtenidos pierdan precisión [51]. Por lo que considerando la intrínseca naturaleza inestacionaria de las detonaciones en conjunto con las consideraciones de costo computacional, se descarta su utilización y se opta por aplicar una metodología del tipo paso fraccionado realizando el avance temporal de forma explícita.

En virtud de lo anterior, el algoritmo resolutivo del tipo paso fraccionado propuesto plantea resolver la cinética química separado del sistema fluidodinámico, luego con los datos obtenidos se computan los términos fuentes de las ecuaciones de las especies y la energía para entonces desarrollar el avance temporal del sistema fluidodinámico. La metodología propuesta se implementa en un nuevo *solver* denominado `rhoCentralRF` el cual posteriormente será empleado en diferentes problemas que involucran propagación de detonaciones con la finalidad de validar y verificar su funcionamiento y evaluar su eficiencia computacional en sistemas de cómputo masivamente paralelos para lo que se hace uso de los *clusters* integrados al sistema nacional: Mendieta (CCAD-UNC) y Piluso (CONICET-ROSARIO)

El *solver* `rhoCentralRF` como cualquier otro *solver* de `openFoam`<sup>TM</sup> permite seleccionar los esquemas de reconstrucción, interpolación e integración temporal en tiempo de corrida; por lo tanto, para cada uno de estos se cuenta con todos los disponibles actualmente en el paquete, y cualquier otro susceptible de implementar. El *solver* soporta geometrías 1D, 2D, axisimétricas y 3D. En cuanto a los modelos químicos, no presenta ningún tipo de restricción relativa a la cantidad de reacciones y especies a utilizar, no obstante si se requiere utilizar un nuevo modelo este deberá ser implementado ya sea utilizando el formato nativo de `openFoam`<sup>TM</sup> o el formato de CHEMKIN®. Las condiciones iniciales y de borde se deben proporcionar en variables primitivas ( $p, U, T$ ) y las correspondientes condiciones para las variables conservativas son determinadas en forma consistente, esto permite reutilizar las librerías de condiciones de borde proporcionadas por `openFoam`<sup>TM</sup> [52].

El código `rhoCentralRF` se verifica y valida mediante la comparación de resultados obtenidos con datos experimentales y/o numéricos disponibles. El primer paso en el proceso de validación es verificar y validar el buen funcionamiento de la parte química, primero se compara el perfil de temperatura obtenido con cada modelo bajo la hipótesis de volumen constante con datos de referencia disponibles del código CHEMKIN. Luego, cálculos a volumen constante efectuados con el modelo de Marinov se contrastan con datos y soluciones disponibles para el tiempo de inducción, discutiendo las implicaciones que dicho parámetro tiene en la resolución de los resultados. A continuación se prueba `rhoCentralRF` resolviendo el tubo de choque considerando dos especies, pero desactivando el acoplamiento químico; con esto se pretende verificar que se está resolviendo de forma correcta el problema fluidodinámico. El siguiente paso consiste en acoplar las partes química y fluidodinámica, para luego abordar distintos casos de verificación y validación de procesos detonantes. Se comparan entonces los resultados obtenidos con `rhoCentralRF` con re-

sultados previos para la mezcla  $2\text{H}_2 : \text{O}_2 : 3.75\text{N}_2$  calculados con el código `flow-two` [53]; para esto se consideran todos los modelos químicos para la combustión hidrógeno-aire implementados, así, en conjunto con los resultados de la sección de la validación del modelo químico, se selecciona el modelo cinético que será utilizado en todas las simulaciones subsiguientes. Se verifica la correcta convergencia hacia la velocidad teórica de propagación de la detonación (Chapman-Jouguet). Para esto se considera la mezcla hidrógeno-aire y se varía la composición en función de la relación de equivalencia ( $\phi$ ). Se resuelve la propagación 1D de una detonación en una mezcla estequiométrica hidrógeno-oxígeno diluida al 70 % con argón, con lo que se verifica que los resultados logren reproducir la estructura teórica 1D de la detonación de acuerdo la teoría de Zeldovich-von Neumann-Döring (ZND), se verifica el buen comportamiento de los resultados y se muestra cómo cambiando el gas del *driver* por helio se distingue con mayor precisión la presencia y estructura de las diferentes ondas presentes en la configuración obtenida. Se aborda el problema de la ignición de una mezcla combustible por la reflexión de un choque y la posterior transición hacia una detonación, se verifica cómo el tiempo de inducción obtenido midiendo el tiempo desde la reflexión hasta el 5 % de aumento en la temperatura presenta una buena aproximación con respecto a las simulaciones bajo la hipótesis de volumen constante. Se muestran comparaciones con datos experimentales disponibles para la presión máxima durante la evolución del proceso hasta la aparición de la onda reactiva que por medio de la interacción con el choque reflejado dará origen a la detonación. A continuación se analizan las diferencias entre las múltiples reflexiones de una detonación plana en un conducto cerrado y las reflexiones de una onda de choque que se propaga en la misma mezcla sin inducir actividad química.

Finalmente se estudia la estructura celular de la detonación para una mezcla hidrógeno-aire diluida al 70 % con argón lo que corresponde a un conocido y aceptado caso de prueba. Se hacen comparaciones de las dimensiones características de la célula con resultados numéricos y datos experimentales de fuentes disponibles, además se muestra cómo es el proceso de formación de la célula atendiendo a la formación y evolución de puntos triples desarrollados en el campo de flujo por la interacción del frente de la detonación y ondas inducidas por el proceso reactivo.

## 1.2. Justificación

Esta tesis constituye un aporte original desde diferentes puntos de vista. Desde el punto de vista numérico se adapta, implementa y prueba el esquema centrado de Kurganov al estudio de flujos químicamente activos. Si bien el campo de las detonaciones ha sido estudiado desde hace varias décadas, las técnicas utilizadas por lo general son costosas y lo que se busca es que el código desarrollado contribuya al estudio de las detonaciones consiguiéndose una metodología no tradicional más económica capaz de obtener soluciones comparables con técnicas tradicionales. Por otro lado, se contribuye de forma directa a la expansión de las herramientas de simulación ofrecidas por `openFoam`<sup>TM</sup> debido a que el código generado será liberado en su momento. A pesar de que se enfoca el interés al estudio de las detonaciones, `rhoCentralRF` no se encuentra limitado a dicho campo y podrá ser utilizado previa validación en otros patrones de flujo reactivos a altas velocidades.

## 1.3. Objetivos

### 1.3.1. Objetivo general

Adaptar e implementar una técnica numérica basada en los esquemas centrados de Kurganov dentro del entorno ofrecido por openFoam™ que permita la simulación de detonaciones en mezclas de gases.

### 1.3.2. Objetivos específicos

Objetivo 1: Verificar las capacidades de openFoam™ para modelar flujos químicamente activos.

Objetivo 2: Estudiar y cualificar el comportamiento del esquema de Kurganov dentro del entorno de openFoam™ en la simulación de flujos supersónicos.

Objetivo 3: Implementar y aplicar el esquema de Kurganov a las ecuaciones de Euler reactivas para el estudio de detonaciones en medios gaseosos.

## 1.4. Metodología

Si bien openFoam™ está escrito en C++, este cuenta con un lenguaje de programación propio que define una estructura de datos que ofrece un entorno de desarrollo para la implementación de librerías, *solvers* y aplicaciones enfocadas al desarrollo de simulaciones en el campo de la dinámica de fluidos computacional utilizando el método de volúmenes finitos. La metodología entonces consiste, en un proceso de familiarización con openFoam™ que a su vez, se utiliza para verificar el funcionamiento de diferentes librerías y evaluar los esquemas para los flujos supersónicos considerados. También, se realiza una exhaustiva revisión bibliográfica incluyendo los detalles relevantes en el cuerpo de la tesis, interrelacionando estos con la arquitectura del paquete. Finalmente, se desarrollan distintos casos de prueba, lo que implica la puesta a punto del código tanto en las computadoras personales utilizadas como en los entornos de cómputo de alto desempeño utilizados.

## Referencias capítulo 1

- [1] **L. F. Gutiérrez Marcantoni**, Simulación de Flujos Compresibles con openFOAM®, Master's thesis, Universidad Nacional de Córdoba, 2013.
- [2] **L. F. Gutierrez Marcantoni, J. P. Tamagno y S. A. Elaskar**, *High speed flow simulation using openfoam*, in Actas del Congreso X Argentino de mecánica computacional, Salta, Argentina, 2012.
- [3] **L. F. Gutiérrez Marcantoni, J. P. Tamagno y S. A. Elaskar**, *Assessment of openfoam® solvers in aerospace applications*, in Proceeding of the 1st Pan American Congress on Computational Mechanics, Buenos Aires (Argentina), 2015.

- [4] **A. Favre**, *Statistical equations of turbulent gases, Problems of hydrodynamics and continuum mechanics*, pp. 231–266, 1969.
- [5] **N. P. A. Nordin**, *Complex Chemistry Modeling of Diesel Spray Combustion*, Ph.D. thesis, Chalmers University of Technology, 2001.
- [6] **F. P. Kärrholm**, *Numerical Modelling of Diesel Spray Injection, Turbulence Interaction and Combustion*, Ph.D. thesis, Chalmers University of Technology, 2008.
- [7] **J. Chomiak**, y **A. Karlsson**, *Flame liftoff in diesel sprays, 26th Symposium (International) on Combustion*, pp. 2557–2564, 1996.
- [8] **O. A. Marzouk** y **E. D. Huckaby**, *A comparative study of eight finite-rate chemistry kinetics for CO/h<sub>2</sub> combustion, Engineering Applications of Computational Fluid Mechanics*, vol. 4(No. 3):pp. 331–356, 2010.
- [9] **C. K. Westbrook** y **F. L. Dryer**, *Simplified reaction mechanisms for the oxidation of hydrocarbon fuels in flames, Combustion science and technology*, vol. 27(1-2):pp. 31–43, 1981.
- [10] **L. Wang**, **L. Zhaohui**, **C. Sheng** y **Z. Chuguang**, *Comparison of Different Global Combustion Mechanisms Under Hot and Diluted Oxidation conditions, Combustion Science and Technology*, vol. 184(2):pp. 259–276, 2012.
- [11] **W. Jones** y **R. Lindstedt**, *Global reaction schemes for hydrocarbon combustion, Combustion and Flame*, vol. 73(3):pp. 233–249, 1988.
- [12] **G. Bader** y **P. Deuffhard**, *A semi-implicit mid-point rule for stiff systems of ordinary differential equations, Number. Math*, vol. 41:pp. 373–398, 1983.
- [13] **M. Storti** y **N. Nigro**, *Cfd presenta compresible+ incompresible un matrimonio por conveniencia*, 1997.
- [14] **L. S. Alves**, *Review of numerical methods for the compressible flow equations at low mach numbers*, 2009.
- [15] **R. Issa**, *Solution of the implicitly discretised fluid flow equations by operator-splitting, Journal of Computational Physics*, vol. 62(1):pp. 40 – 65, 1986.
- [16] **T. J. Chung**, *Computational Fluid Dynamics*, Cambridge University Press, 2nd ed., 2010.
- [17] **R. Barlow** y **J. Frank**, *Piloted CH<sub>4</sub>/Air flames C, D, E, and F, Sandia National Laboratories*, 2007.
- [18] **D. Christ**, *Simulating the combustion of gaseous fuels*, 2011.
- [19] **J. H. Lee**, *The detonation phenomenon*, vol. 2, Cambridge University Press Cambridge, 2008.
- [20] **A. Kurganov** y **E. Tadmor**, *New high-resolution central schemes for nonlinear conservation laws and convection-diffusion equations, Journal of Computational Physics*, vol. 160(1):pp. 241–282, 2000.
- [21] **A. Kurganov** y **G. Petrova**, *A third-order semi-discrete genuinely multidimensional central scheme for hyperbolic conservation laws and related problems, Numerische Mathematik*, vol. 88(4):pp. 683–729, 2001.

- [22] **A. Kurganov, S. Noelle y G. Petrova**, Semidiscrete Central-Upwind Schemes for Hyperbolic Conservation Laws and Hamilton–Jacobi Equations, vol. 23, 2001.
- [23] **E. F. Toro**, Riemann solvers and numerical methods for fluid dynamics: a practical introduction, Springer Science & Business Media, 2009.
- [24] **P. L. Roe**, *Approximate riemann solvers, parameter vectors, and difference schemes*, *Journal of Computational Physics*, vol. 43(2):pp. 357–372, 1981.
- [25] **P. Batten, M. A. Leschziner y U. C. Goldberg**, *Average-State Jacobians and Implicit Methods for Compressible Viscous and Turbulent Flows*, *Journal of Computational Physics*, vol. 137(1):pp. 38–78, 1997.
- [26] **V. Rusanov**, Calculation of Interaction of Non-steady Shock Waves with Obstacles, Technical translation, National Research Council of Canada, 1962.
- [27] **M.-S. Liou y C. J. Steffen**, *A new flux splitting scheme*, *Journal of Computational physics*, vol. 107(1):pp. 23–39, 1993.
- [28] **M.-S. Liou**, *A sequel to ausm: Ausm+*, *Journal of Computational Physics*, vol. 129(2):pp. 364–382, 1996.
- [29] **H. Nessyahu y E. Tadmor**, *Non-oscillatory central differencing for hyperbolic conservation laws*, *Journal of computational physics*, vol. 87(2):pp. 408–463, 1990.
- [30] **E. Rinaldi, R. Pecnik y P. Colonna**, *Exact Jacobians for implicit Navier–Stokes simulations of equilibrium real gas flows*, *Journal of Computational Physics*, vol. 270:pp. 459–477, 2014.
- [31] **A. Kurganov y G. Petrova**, *Central-upwind schemes on triangular grids for hyperbolic systems of conservation laws*, *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, vol. 21(3):pp. 536–552, 2005.
- [32] **P. Arminjon, M.-C. Viallon y A. Madrane**, *A finite volume extension of the lax-friedrichs and nessyahu-tadmor schemes for conservation laws on unstructured grids*, *International Journal of Computational Fluid Dynamics*, vol. 9(1):pp. 1–22, 1998.
- [33] **I. Christov y B. Popov**, *New non-oscillatory central schemes on unstructured triangulations for hyperbolic systems of conservation laws*, *Journal of Computational Physics*, vol. 227(11):pp. 5736–5757, 2008.
- [34] **R. Grauer y F. Spanier**, *A note on the use of central schemes for incompressible Navier–Stokes flows*, *Journal of Computational Physics*, vol. 192(2):pp. 727–731, 2003.
- [35] **D. Levy**, *A stable semi-discrete central scheme for the two-dimensional incompressible euler equations*, *IMA journal of numerical analysis*, vol. 25(3):pp. 507–522, 2005.
- [36] **A. Kurganov y M. Pollack**, *Semi-discrete central-upwind schemes for elasticity in heterogeneous media*, *SIAM J. Sci. Comput.*(Submitted for publication), 2011.
- [37] **C. L. Gardner, A. Gelb y J. Hernandez**, *A comparison of modern hyperbolic methods for semiconductor device simulation: Ntk central scheme vs. clawpack*, *VLSI Design*, vol. 15(4):pp. 721–728, 2002.
- [38] **S. Li**, *A fourth-order divergence-free method for mhd flows*, *Journal of Computational Physics*, vol. 229(20):pp. 7893–7910, 2010.

- [39] **P. Arminjon** y **R. Touma**, *Finite volume central schemes for 3-dimensional ideal mhd*, Centre de Recherches Mathematiques, Universite de Montreal, Canada, 2010.
- [40] **S. Marquez Damian**, An Extended Mixture Model for the Simultaneous Treatment of Short and Long Scale Interfaces, Ph.D. thesis, Universidad Nacional del Litoral, Santa Fe, Argentina., 2013.
- [41] **A. Kurganov**, *An accurate deterministic projection method for hyperboles systems with stiff source term*, in *Hyperbolic Problems: Theory, Numerics, Applications*, pp. 665–674, Springer, 2003.
- [42] **D. R. Stull** y **H. Prophet**, JANAF Thermochemical Tables, US National Bureau of Standards, 1971.
- [43] **J. Warnatz**, **U. Maas** y **R. Dibble**, *Combustion: physical and chemical fundamentals, modeling and simulation, experiments, pollutant formation*, Springer Verlag, New York, 2006.
- [44] **R. Kee**, **M. Coltrin** y **P. Glarborg**, *Chemically Reacting Flow: Theory and Practice*, John Wiley & Sons, 2003.
- [45] **K. K. Kuo.**, *Principles of Combustion*, John Wiley & Sons, Inc., 2nd ed., 2005.
- [46] **C. K. Law**, *Combustion physics*, Cambridge University Press, 2006.
- [47] **S. McAllister.**, **J. Y. Chen.** y **A. C. F. Pello**, *Fundamental of Combustion Processes*, Mechanical Engineering Series - Springer Science+Business Media, LLC 2011, 2011.
- [48] **C. J. Jachimowski**, An analytical study of the hydrogen-air reaction mechanism with application to scramjet combustion, vol. 2791, National Aeronautics and Space Administration, Scientific and Technical Information Division, 1988.
- [49] **C. J. Jachimowski**, An analysis of combustion studies in shock expansion tunnels and reflected shock tunnels, vol. 3224, Citeseer, 1992.
- [50] **N. M. Marinov**, **C. K. Westbrook** y **W. Pitz**, *Detailed and global chemical kinetics model for hydrogen*, *Transport phenomena in combustion*, vol. 1:p. 118, 1995.
- [51] **T. Geßner** y **D. Kröner**, *Dynamic mesh adaption for supersonic reactive flow*, in *Hyperbolic Problems: Theory, Numerics, Applications*, pp. 415–424, Springer, 2001.
- [52] **OpenFOAM**, 2015, URL [www.openfoam.com](http://www.openfoam.com), source Code.
- [53] **J. P. Tamagno**, **S. A. Elaskar** y **J. O. García**, *A numerical study of planar detonations*, *Latin American applied research*, vol. 42(2):pp. 161–166, 2012.

# Capítulo 2

## Descripción general de las técnicas numéricas

### Nomenclatura

#### Abreviaturas

CFL	Condición de Courant–Friedrichs–Lewy
EDPs	Ecuaciones en derivadas parciales
ESI	<i>Experts in Virtual Product Engineering to support Industrial Innovation</i>
FPCD	Factor de ponderación convección-difusión
fV	<i>fixed Value.</i>
MinMod	Función limitadora MinMod de Roe
PISO	<i>Pressure implicit with splitting of operators</i>
SIMPLE	<i>Semi-Implicit Method for Pressure linked equations</i>
SI	<i>International system of units</i>
TV	Variación total
TVD	Variación total disminuida
USCS	<i>United states customary system</i>
vanLeer	Función limitadora de van Leer
vanAlbada	Función limitadora de van Albada
zG	Gradiente Nulo

#### Alfabeto latino

$a$	Velocidad de propagación del sonido
$a_{ij}$	Coefficientes matriz de discretización
$C_o$	Número de courant
$D$	Coefficiente de difusión
$d$	Vector posición entre los centroides de las celda propietaria y vecina
$d_f$	Vector posición entre los centroides de la celda propietaria y la cara que la conecta con la celda vecina
$E$	Energía Total
$e$	Energía interna
$F_p$	Flujo convectivo de presión
$f$	Cara de la celda

$g$	Aceleración de la gravedad
$k$	Vector que mide la no-ortogonalidad
$m$	Vector que mide la oblicuidad de la celda
$N$	Centroide de la celda vecina
$n$	Vector normal
$n_c$	Número de celdas
$Pe$	Número de Peclet
$P$	Centroide de la celda propietaria
$p$	Presión
$p^*$	Presión de inicio algoritmo PISO
$Q$	Vector que representa otras fuentes de calor externas
$q$	Vector que representa al flujo de calor por conducción (difusión)
$R$	Vector columna de términos fuente
$r$	Vector posición del centroide de la celda
$r_{fN}$	Vector desde el centroide de la región intercelda (cara) al centroide de la celda vecina
$S(\psi)$	Término fuente
$S_f$	Vector de superficie de la cara de la celda
$T$	Temperatura
$\mathcal{T}$	Malla o grilla
$\mathcal{T}_i$	Celda $i$ -ésima
$t$	Tiempo
$U$	Velocidad de transporte
$V_p$	Volumen de la celda

### Alfabeto griego

$\beta(r)$	Función limitadora
$\Gamma$	Factor de interpolación
$\Delta t$	Paso de tiempo fluidodinámico
$\mu$	Viscosidad molecular
$\rho$	Densidad
$\underline{\underline{\sigma}}$	Tensor de tensiones
$\underline{\underline{\tau}}$	Tensor de tensiones viscosas
$\phi_c$	Flujo convectivo de una cantidad escalar
$\phi_d$	Flujo difusivo de una cantidad escalar
$\chi$	factor de ponderación convección-difusión
$\psi$	Compresibilidad
$\underline{\underline{\psi}}$	Cantidad tensorial genérica
$\Omega$	Dominio físico
$\Omega_i$	volumen de control
$\omega$	Factor limitador

### Superíndices

*	Paso de predicción algoritmo PISO
**	Paso de corrección algoritmo PISO
T	Transpuesta
$n$	Valor en el paso de tiempo actual
$n-1$	Valor en el paso de tiempo anterior

**Subíndices**

$DR$	<i>Driver</i>
$DV$	<i>Driven</i>
$P$	Valor evaluado en el centroide de la celda propietaria
$N$	Valor evaluado en el centroide de la celda vecina
$\delta\Omega$	Valor evaluado en el contorno del dominio
$f$	Valor evaluado en la cara
$UP$	Valor interpolado con el esquema <i>upwind</i>
$CD$	Valor interpolado con el esquema centrado

**Operadores**

$G'(e)$	Operador discreto que representa los flujos convectivos y difusivos de energía
$\mathbf{H}(\mathbf{U})$	Operador discreto que representa las contribuciones debidas al transporte puro y a los términos fuentes de la ecuaciones de momento
$(:n)$	Producto interno de dos tensores de orden $n$
$n\nabla(\ )$	Enésima derivada espacial
$\text{Tr}$	Traza
$\Delta,(),_i$	Operador divergencia discreto

## 2.1. Introducción

El método de los volúmenes finitos es uno de los más aceptados y populares en el campo de la dinámica de fluidos computacional (CFD). Dentro de sus principales características es de destacar que las ecuaciones producto de la discretización mantienen la conservación de su contraparte continua, por lo que el método es conservativo por construcción. Otro aspecto importante es su versatilidad en cuanto a lo que se refiere a discretización geométrica, ya que permite utilizar mallas no estructuradas y por ende tratar geometrías complejas [1, 2].

El proceso de discretización se puede dividir en tres partes fundamentales [3, 4].

1. Discretización espacial o del dominio mediante la generación de la malla de cómputo.
2. Discretización de las ecuaciones.
3. Discretización temporal.

Resulta conveniente definir una metodología genérica que permita generalizar el tratamiento de las ecuaciones a nivel computacional, con lo cual, se puede pensar en códigos numéricos más robustos que brindan la posibilidad de considerar diferentes tipos de problemas reutilizando el código y evitando al máximo su duplicación. Una de las premisas con las que se inició el proyecto openFoam™, fue implementar una plataforma para cómputo numérico que fuera generalizada y flexible al mismo tiempo, atendiendo a esto, se deben tener en cuenta todas las etapas a considerar al momento de la elaboración de un código numérico. Lo primero es seleccionar el método numérico a utilizar (en este caso volúmenes finitos), el tipo de malla que se deberá considerar, la forma en que se tratarán los contornos y los métodos de solución para los sistemas de ecuaciones provenientes de la etapa de discretización. Dentro de openFoam™ prácticamente no existen limitaciones en

cuanto a la selección de la malla, esto se debe a que el *software* se diseñó con soporte para mallas arbitrarias [5]. De forma similar, se cuenta con un amplio grado de versatilidad en lo referente a la selección de esquemas de discretización y algoritmos de solución. Así, el objetivo de este capítulo es proporcionar una descripción del entorno de discretización en volúmenes finitos ofrecido por openFoam™, presentando información teórica relevante a la discretización geométrica, esquemas y algoritmos de solución.

## 2.2. Discretización geométrica

La discretización geométrica es parte integral del proceso de solución de cualquier problema abordado mediante el método de volúmenes finitos. En particular openFoam™, fue diseñado para soportar mallas no estructuradas compuestas de celdas poliédricas arbitrarias en tres dimensiones, es decir, que en el sentido geométrico soporta distintos tipos de celdas (hexaedros, pirámides, celdas tipo cuña, tetraedros, etc). En general, admite definir celdas con cantidad arbitraria de caras poligonales, sin que exista restricción en cuanto al número y alineamiento de los ejes que las definen.

Dentro del entorno del *software* este tipo de mallas se denominan poli-mallas (*polymesh*). Un punto a destacar, es que únicamente soporta mallas tridimensionales y conformes, por lo que, para tratar casos unidimensionales, bidimensionales o axisimétricos, se deben emplear condiciones de borde especiales (ver Sección.2.8).

El dominio físico ( $\Omega$ ) se divide en volúmenes de control ( $\Omega_i$ ), en los cuales se formula una versión discreta de cada una de las ecuaciones de transporte a resolver. Dado un dominio  $\Omega$ , la discretización geométrica consiste en la división del mismo en un conjunto  $n_c$  de celdas computacionales ( $\mathcal{T}_i$ ). Estas celdas pueden o no corresponder con los volúmenes de control ( $\Omega_i$ ), esto dependerá del esquema de mallado utilizado. Dos de los esquemas de mallado más populares son: centrado en la cara y centrado en el vértice (dichos arreglos se observan en la Fig. 2.1). A su vez, el conjunto de celdas computacionales constituyen la **grilla** o **malla** computacional ( $\mathcal{T}$ ). En general la discretización debe satisfacer:

- El dominio debe ser cubierto completamente por la grilla ( $\mathcal{T} = \bigcup_{i=1}^{n_c} \mathcal{T}_i \wedge \Omega \subset \mathcal{T}$ ).
- Las celdas no se superponen (no debe existir solapamiento) ( $\mathcal{T}_i \cap \mathcal{T}_j = \emptyset \forall i \neq j$ ).
- No deben existir espacios interceldas, es decir deben ser contiguas.

Dichas condiciones deben satisfacerse para preservar las propiedades de conservación de las ecuaciones de gobierno sobre el dominio computacional [2]. Utiliza un arreglo de malla centrado en las celdas, implica que los volúmenes de control ( $\Omega_i$ ) tienen una correspondencia unívoca con las celdas de la malla computacional, este arreglo de mallado es el más utilizado actualmente [2, 6, 7], no obstante, existen otros arreglos como el centrado en el vértice del tipo *median dual*<sup>1</sup>.

Un punto a destacar de esta metodología de mallado, es que se adapta de forma adecuada con el refinamiento local y adaptivo, lo que permite añadir celdas en zonas del dominio donde se requiere

---

<sup>1</sup>En un arreglo centrado en el vértice, del tipo *median dual*, las variables se almacenan en los vértices y los volúmenes de control se ensamblan uniendo los centroides de celdas contiguas

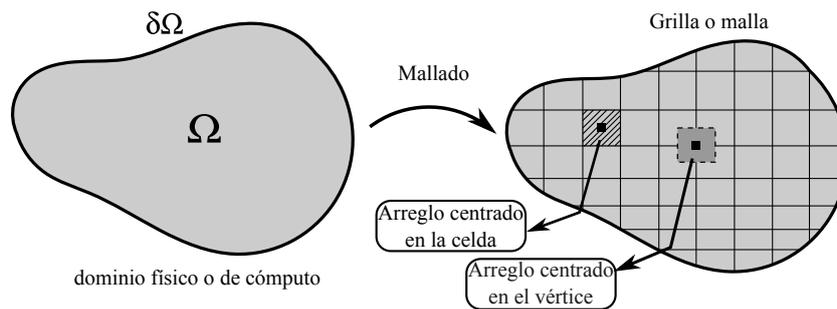


Fig. 2.1: Arreglos de mallado

mayor resolución [8]<sup>2</sup>.

Los valores de las variables dependientes se almacenan en el centroide de la celda, lo que se conoce como arreglo de **malla colocada** (*collocated mesh*), aunque también pueden ser almacenados tanto en los vértices como en las caras. Cuando se usa el sistema colocado de malla se emplea un tipo de corrección de la forma Rhie-Chow con la finalidad de evitar la aparición de oscilaciones, lo que daría lugar al conocido problema de la distribución de presiones tipo tablero de ajedrez (*checker-board*) Sección.2.7.1)[9]. Esta corrección es proporcional a la diferencia entre el gradiente de presión en el centroide de la celda y su valor interpolado a la cara [10, 11].

### 2.2.1. Descripción del esquema de mallado

La estructura de datos proporcionada por openFoam<sup>TM</sup> se diseñó para que los *solvers* implementados sean aplicables a múltiples dimensiones por defecto. De esta forma, un *solver* puede ser aplicado a un problema bidimensional usando condiciones de borde especiales en la dirección que no es de interés [12]. La Fig. 2.2 muestra una celda poliédrica arbitraria, donde:

- $P$  : Centroide de la celda propietaria.
- $r$  : Vector posición del centroide de la celda.
- $f$  : Cara que delimita el contorno de una celda adyacente a otra (región intercelda).
- $d$  : Vector posición entre los centroides de la celda propietaria y de la celda vecina.
- $d_f$  : Vector posición entre los centroides de la celda propietaria y de la cara que la conecta con la celda vecina.
- $N$  : Centroide de la celda vecina.
- $S_f$  : Vector de superficie de la cara de la celda (se define como el producto interno del vector normal a la celda y la superficie de la misma).

Cada celda está delimitada por un conjunto de caras planas y cada cara es compartida únicamente por dos celdas contiguas. Las celdas se dividen en dos grupos:

<sup>2</sup>Es importante hacer notar que openFoam<sup>TM</sup>, dada la arquitectura que utiliza para definir los esquemas de discretización, hasta 2015 sólo soporta mallas conformes

Celdas internas: Celdas en las que ninguna de sus caras coincide con la frontera del dominio cómputo

Celdas de contorno: Celdas en las cuales al menos una de sus caras está en contacto con la frontera

Se construye el vector de superficie de cada cara ( $S_f$ ), de forma tal, que apunte hacia afuera desde la celda que tiene la menor numeración. Este vector es normal a la cara y su magnitud coincide con el área de la misma. La celda con la menor numeración es la denominada **celda propietaria**, y las celdas con caras que rodean a una celda propietaria se denominan **celdas vecinas**. Para la celda genérica mostrada en la Fig. 2.2, la cara sombreada pertenece a la celda propietaria, por lo tanto, los centroides de las celdas propietaria y vecina en este caso son  $P$  y  $N$ . El punto central de la celda  $P$ , está localizado en el centroide de la misma, en consecuencia:

$$\int (\mathbf{x} - \mathbf{x}_p) dV = 0 \quad (2.1)$$

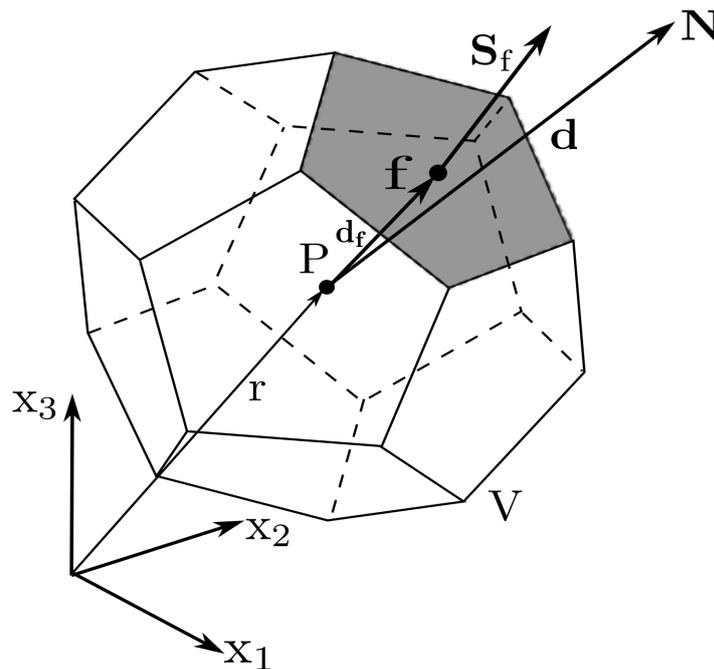


Fig. 2.2: Celda poliédrica arbitraria

### 2.2.2. Especificación de la malla y condiciones que debe satisfacer

Una malla dentro del entorno del *software* debe satisfacer ciertas condiciones de formato. Estas condiciones se enumeran a continuación [12].

**Puntos:** Se definen como un vector en tres dimensiones cuyas componentes definen el punto en cuestión ( $m$ ). Los puntos se compilan como una lista y se identifican con un índice que se cuenta partiendo de cero (estilo de numeración en  $C++$ ), dicho índice identifica al punto, y la lista no

puede contener dos puntos que representen la misma posición, ni ningún punto que no pertenezca al menos a una cara.

**Caras:** Una cara es una lista ordenada de puntos, donde cada punto de la lista que define la cara se identifica por el índice que lo representa dentro de la lista de puntos. La lista de índices de los puntos que definen una cara debe estar definida de forma tal, que dos puntos vecinos estén conectados por un eje. Las caras también se definen mediante una lista cuyo índice representa la posición de la cara, la normal de la cara debe respetar la ley de la mano derecha (si mirando hacia la cara, la numeración de los puntos que la definen está en sentido anti-horario, el vector normal apunta hacia el observador (ver Fig. 2.3). Se identifican dos tipos de caras:

- **Caras internas:** Son las caras que conectan dos celdas, para cada cara interna el orden de la lista de puntos que la representa debe ser tal que la normal a la cara apunte hacia la celda con el mayor índice.
- **Caras de contorno:** En este caso la normal se define de forma que apunte hacia afuera del dominio computacional. Las caras de contorno admiten cierto grado de deformación, es decir, los puntos que las definen no necesariamente deben ser coplanares, pero el centro de la cara debe estar contenido dentro de la misma.

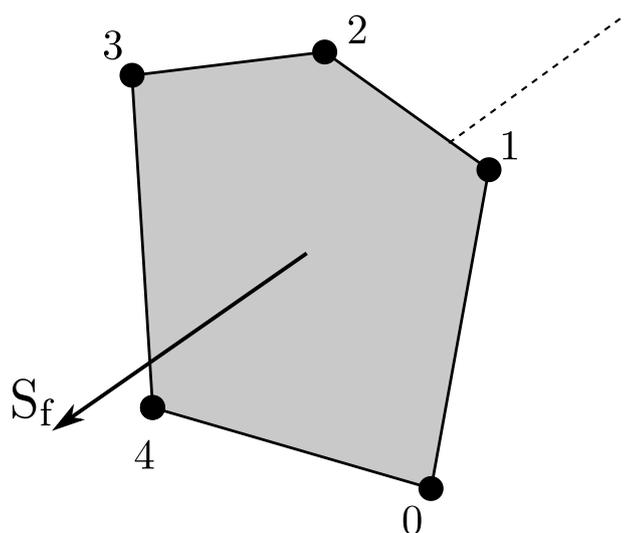


Fig. 2.3: Vector normal a una cara según el sentido de numeración de los puntos.

**Celdas:** Las celdas deben satisfacer los siguientes requerimientos:

- Deben cubrir todo el dominio.
- Deben ser convexas.
- Deben ser cerradas tanto en el sentido geométrico como topológico [8]:
  - Una celda geoméricamente cerrada, se define como aquella en la cual la suma de todos los vectores de superficie de sus caras es nula (todos los vectores normales a las caras de la celda deben apuntar hacia el exterior de la misma).
  - En el sentido topológico, la celda se considera cerrada si todos los ejes que la conforman son compartidos únicamente por dos caras de la celda en cuestión.

- Deben ser ortogonales, es decir, si se define para todas las celdas internas el vector que conecta los centroides de las mismas, éste se orienta de forma que apunta desde la celda identificada con menor índice hacia la de mayor índice. La restricción de ortogonalidad implica que para cada cara interna el ángulo entre el vector de superficie y el vector que conecta los centroides debe ser menor a  $90^\circ$ .

**Contornos:** los contornos se definen como una lista de *patches*, cada uno de los cuales está asociado a una condición de borde, un *patch* se define como una lista de índices de las caras que pertenecen a celdas del contorno. Los contornos deben ser cerrados y no necesariamente deben estar conectados físicamente.

## 2.3. Propiedades de los esquemas numéricos

Antes de introducir la técnica numérica, se considera importante exponer un breve resumen de las propiedades que en general deben satisfacer los esquemas numéricos para obtener soluciones de buena calidad.

### Consistencia

Esta importante propiedad de los esquemas numéricos, indica que se está resolviendo la ecuación de transporte seleccionada en su versión discreta y no otra que no corresponda. La diferencia entre la ecuación discreta y la ecuación exacta se conoce como **error de truncamiento**, si dicho error de truncamiento tiende a cero a medida que  $\Delta t \rightarrow 0 \wedge \Delta x \rightarrow 0$ , se puede decir que el esquema es consistente [9, 13].

### Precisión

Al aplicar una técnica numérica para resolver cualquier ecuación o sistema de ecuaciones, se obtiene una aproximación a la solución exacta, y es de esperar que la técnica seleccionada involucre distintas fuentes de error. Los tres principales tipos de errores sistemáticos introducidos por las aproximaciones numéricas son:

- **Error de modelado:** Dado por la diferencia entre el fenómeno físico real que se desea resolver y el que se resuelve aproximadamente. Es introducido por las diferentes hipótesis que se formulan.
- **Error de discretización:** Es el error introducido por la diferencia entre la solución exacta de las ecuaciones de gobierno en su forma continua y la que se obtiene con el sistema de ecuaciones discretas.
- **Errores de convergencia iterativa**<sup>3</sup>: Es el error introducido por la diferencia obtenida entre

---

<sup>3</sup>También conocidos como errores iterativos. Aquí se trata de errores en el sentido de la convergencia del método iterativo utilizado para resolver el sistema de ecuaciones, no en el de la convergencia a una solución independiente de la malla [9].

la solución al sistema de ecuaciones dada por un método iterativo y la solución exacta del mismo.

La precisión de un esquema numérico, es el orden con el cual el error de truncamiento decae a medida que se refina la malla. Un esquema de segundo orden de precisión de la variable espacial  $x$ , implica entonces que el término de truncamiento del esquema debe ser al menos de  $\mathcal{O}(\Delta x^2)$ .

## Estabilidad

La estabilidad de un esquema numérico se define como, la capacidad del mismo de no amplificar los distintos errores presentes a medida que el proceso de solución avanza. Para problemas inestacionarios, la estabilidad garantiza que el método proporciona una solución acotada si la solución exacta también lo es. En general la estabilidad de un esquema no es sencilla de estudiar, en consecuencia, cuando se analizan problemas que presentan acoplamientos, no linealidades y condiciones de borde complejas, habitualmente se requieren pasos de tiempo reducidos e incluso aplicar sub-relajación<sup>4</sup> a fin de garantizar la estabilidad [9].

## Conservación

Puesto que se desean resolver leyes de conservación, las cuales expresan el equilibrio existente entre la generación, consumo y los distintos tipos de flujos (convectivos-difusivos) de una propiedad transportada, es razonable pensar que a nivel discreto se deban respetar dichos principios a fin de obtener una solución coherente. Por lo tanto, se dice que un esquema de discretización es conservativo si y sólo si respeta la conservación a nivel discreto. El método de volúmenes finitos es conservativo por definición [1]. Hay que tener en cuenta, que un esquema puede ser consistente, estable y no-conservativo e incluso así producir soluciones correctas cuando se utilizan niveles altos de refinamiento espacial [9]. No obstante, esto es costoso desde el punto de vista computacional, de aquí que es recomendable en lo posible utilizar esquemas numéricos conservativos.

## Convergencia

Aquí se refiere a la convergencia en el sentido de la discretización geométrica (malla). Se considera que un esquema numérico es convergente si la variación en la solución obtenida para diferentes niveles de refinamiento son casi imperceptibles, es decir que la solución se hace independiente de la malla. Al igual que la estabilidad la convergencia es compleja de analizar, y en general se estudia por medio de experimentos numéricos [9]. Para problemas lineales de valor inicial el teorema de equivalencia de Lax indica que para un esquema que satisface la condición de consistencia, la estabilidad es la condición necesaria y suficiente para la convergencia [14].

---

<sup>4</sup>Al utilizar métodos iterativos, puede ocurrir que se presente inestabilidad producida por cambios abruptos en las variables de una iteración a otra, la sub-relajación condiciona la matriz del sistema con la finalidad de evitar este problema.

## Acotación

La condición o propiedad de acotación, establece que un esquema numérico debe respetar los límites físicos de la variable que representa, es decir, que si por ejemplo, se discretiza la densidad ( $\rho$ ) el esquema numérico no debe en ningún momento arrojar valores negativos; si se utiliza la fracción de masa el valor de la misma debe estar siempre dentro del intervalo ( $0 \leq Y_k \leq 1$ ). La acotación es difícil de garantizar, únicamente los esquemas de primer orden la garantizan y todos los esquemas de alto orden pueden dar lugar a soluciones no físicas cuando se utilizan en mallas con niveles no apropiados de refinamiento [9]. Sin embargo, para resolver este inconveniente en dichos esquemas numéricos aparecen las funciones limitadoras.

## Factibilidad

Aunque formalmente no es una propiedad de los esquemas de discretización, ciertamente afecta su comportamiento. La factibilidad está relacionada con el conjunto de hipótesis y simplificaciones que se hacen para modelar algún fenómeno físico, se relaciona con la parte numérica en el sentido de que si se parte de hipótesis incorrectas es probable que el método numérico adoptado diverja [9].

Es trascendental notar que los esquemas numéricos que se expondrán posteriormente cuentan con análisis exhaustivos en lo que respecta a cada una de las propiedades citadas [1–3, 6, 9, 15, 16, 18], por lo tanto, el definir las aquí tiene como objetivo dar un contexto adecuado en lo referente a los esquemas numéricos utilizados en el desarrollo de esta tesis.

## 2.4. Discretización de las ecuaciones (método de los volúmenes finitos)

Considerando la ecuación de transporte de una cantidad tensorial genérica  $\underline{\underline{\psi}}$ .

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial t}(\rho \underline{\underline{\psi}})}_{(1)} + \underbrace{\nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \underline{\underline{\psi}})}_{(2)} - \underbrace{\nabla \cdot \rho D \nabla \underline{\underline{\psi}}}_{(3)} = \underbrace{S(\underline{\underline{\psi}})}_{(4)} \quad (2.2)$$

donde  $\rho$  es la densidad,  $\mathbf{U}$  la velocidad de transporte y  $S(\underline{\underline{\psi}})$  el término fuente asociado a la producción o consumo de la cantidad transportada  $\underline{\underline{\psi}}$  (este último término puede ser o no función de la variable transportada). La ecuación de transporte genérica que se presenta, es una **ecuación diferencial en derivadas parciales de segundo orden**, en dicha ecuación (Ec. 2.2) se pueden identificar un término inestacionario o temporal (1), un término convectivo (2), un término difusivo (3) y un término fuente (4). Utilizando el método de Picard para linealizar el término fuente, éste puede ser escrito en la forma [16]:

$$S(\underline{\underline{\psi}}) = \underbrace{S_r \underline{\underline{\psi}}}_{(6)} + \underbrace{S_q}_{(7)} \quad (2.3)$$

Entonces, el término (6) se puede ver como un término reactivo y el restante (7) como un término fuente o de producción. El tipo de formulación que se presenta permite que esta ecuación genérica

adopte la forma apropiada dependiendo del problema que se esté abordando, y por lo tanto, tratar en forma similar a la gran mayoría de ecuaciones que en un momento dado pueden aparecer en la mecánica de fluidos computacional, por ejemplo, si se define a  $\underline{\underline{\psi}}$  como  $\underline{\underline{\psi}} = [1 \quad \mathbf{U} \quad e]$  se obtienen las **ecuaciones de Navier-Stokes**<sup>5</sup> [19, 20]:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U}) = 0 \quad (2.4)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \mathbf{U}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \mathbf{U}) = \rho \mathbf{g} + \nabla \cdot \underline{\underline{\sigma}} \quad (2.5)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho e) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} e) = \rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{U} + \nabla \cdot (\underline{\underline{\sigma}} \cdot \mathbf{U}) - \nabla \cdot \mathbf{q} + \rho \mathbf{Q} \quad (2.6)$$

Retomando la Ec. 2.2, al ser ésta de segundo orden, requiere para obtener un orden de precisión apropiado, que el esquema de discretización sea al menos de segundo orden. Considerando una celda arbitraria definida sobre el dominio computacional  $\Omega$  e integrando la Ec. 2.2, se tiene:

$$\int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial t} (\rho \underline{\underline{\psi}}) d\Omega + \int_{\Omega} \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \underline{\underline{\psi}}) d\Omega - \int_{\Omega} \nabla \cdot \rho D \nabla \underline{\underline{\psi}} d\Omega = \int_{\Omega} S(\underline{\underline{\psi}}) d\Omega \quad (2.7)$$

Empleando el teorema de la divergencia (teorema de Gauss), el segundo y tercer término del lado izquierdo en la Ec. 2.7 se transforman de integrales sobre la celda a integrales sobre sus contornos:

$$\int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial t} (\rho \underline{\underline{\psi}}) d\Omega + \int_{\delta\Omega} (\rho \mathbf{U} \underline{\underline{\psi}}) \cdot \mathbf{n} d\delta\Omega - \int_{\delta\Omega} (\rho D \nabla \underline{\underline{\psi}}) \cdot \mathbf{n} d\delta\Omega = \int_{\Omega} S(\underline{\underline{\psi}}) d\Omega \quad (2.8)$$

Integrando la Ec. 2.8 en el tiempo [1, 4, 8]:

$$\begin{aligned} \int_t^{t+\Delta t} \left\{ \frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \rho \underline{\underline{\psi}} d\Omega + \int_{\delta\Omega} (\rho \mathbf{U} \underline{\underline{\psi}}) \cdot \mathbf{n} d\delta\Omega - \int_{\delta\Omega} (\rho D \nabla \underline{\underline{\psi}}) \cdot \mathbf{n} d\delta\Omega \right\} dt \\ = \int_t^{t+\Delta t} \left\{ \int_{\Omega} S(\underline{\underline{\psi}}) d\Omega \right\} dt \end{aligned} \quad (2.9)$$

Se obtiene la forma genérica de las ecuaciones que en general se debe satisfacer sobre el volumen de control. Los esquemas empleados en la discretización deben ser, como ya se mencionó, al menos de segundo orden para obtener resultados que cuenten con la suficiente precisión. Este grado de aproximación depende del tipo de variación que se adopte para  $\underline{\underline{\psi}}(\mathbf{x}, t)$ . Para obtener una aproximación de segundo orden, la variación propuesta debe ser como mínimo lineal tanto en el espacio como en el tiempo. Para simplificar las expresiones involucradas en el siguiente desarrollo, se supondrá que  $\underline{\underline{\psi}}(\mathbf{x}, t)$  es una cantidad escalar (tensor de orden 0)  $\varphi(\mathbf{x}, t)$ . Si se propone una variación espacial para dicha variable alrededor de un punto  $P$  de la forma [8]:

$$\varphi(\mathbf{x}) = \varphi_P + \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{x}_P) \cdot (\nabla \varphi)_P \quad (2.10)$$

$$\varphi(t + \Delta t) = \varphi^t + \Delta t \left( \frac{\partial \varphi}{\partial t} \right)_t \quad (2.11)$$

<sup>5</sup>Nótese que el coeficiente de difusión se modifica de acuerdo a la cantidad transportada, para simplificar se utiliza el tensor de tensiones  $\underline{\underline{\sigma}} = -\nabla \cdot \mathbf{P} + \underline{\underline{\tau}}$ , donde  $\underline{\underline{\tau}}$  es el tensor de tensiones viscosas.

Usando la serie de Taylor y expandiendo a  $\varphi(\mathbf{x})$ :

$$\begin{aligned}\varphi(\mathbf{x}) &= \varphi_P + (\mathbf{x} - \mathbf{x}_P) \cdot (\nabla\varphi)_p \\ &+ \frac{1}{2} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_P)^2 : (\nabla\nabla\varphi)_P \\ &+ \frac{1}{3!} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_P)^3 :: (\nabla\nabla\nabla\varphi)_p + \frac{1}{n!} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_P)^n G^n\end{aligned}\quad (2.12)$$

donde:

$$G^n = (:n) (n\nabla\varphi)_p \quad (2.13)$$

donde a su vez  $(\mathbf{x} - \mathbf{x}_P)^n$  representa el enésimo producto tensorial del vector  $(\mathbf{x} - \mathbf{x}_P)$  por si mismo,  $(:n)$  simboliza el producto interno de dos tensores de orden  $n$ , y  $n\nabla\varphi$  la enésima derivada espacial de  $\varphi$ . Comparando el desarrollo en serie expuesto con la Ec. 2.10 se puede inferir que la aproximación es de segundo orden, puesto que la serie se trunca en  $(\mathbf{x} - \mathbf{x}_P)^2$ . Realizando un procedimiento similar para la aproximación temporal propuesta:

$$\varphi(t + \Delta t) = \varphi(t) + \Delta t \left( \frac{\partial\varphi}{\partial t} \right)_t + \frac{\Delta t^2}{2} \left( \frac{\partial^2\varphi}{\partial t^2} \right) + H \quad (2.14)$$

Es posible también concluir que la aproximación temporal es de segundo orden. Es decir, que en un caso unidimensional, el error en la solución se reducirá cuadráticamente a medida que el tamaño de la grilla y el paso de tiempo se refinen. A continuación se mostrará como se evalúan cada uno de los términos involucrados en la Ec. 2.9.

### 2.4.1. Aproximación de las integrales de volumen

Luego de integrar sobre el dominio a la ecuación de transporte genérica (Ec. 2.2), aparecen integrales que deben ser evaluadas sobre el volumen de la celda (Ec. 2.9):

$$\int \psi(\mathbf{x}) dV \quad (2.15)$$

Reemplazando en la expresión anterior la aproximación espacial propuesta en la sección anterior:

$$\int_V \psi(\mathbf{x}) dV = \int_V \left\{ \psi_p + (\mathbf{x} - \mathbf{x}_P) \cdot (\nabla\psi)_p \right\} dV \quad (2.16)$$

teniendo en cuenta que  $\int_V (\mathbf{x} - \mathbf{x}_P) dV = 0$ , es posible escribir:

$$\begin{aligned}\int_V \psi(\mathbf{x}) dV &= \int_V \psi_P dV \\ &= \psi_P \int_V dV \\ &= \psi_P V_P\end{aligned}\quad (2.17)$$

donde  $V_p$  es el volumen de la celda. Como se puede ver, las integrales de volumen se aproximan como el producto del volumen de la celda con el valor de la variable en el centroide de la misma <sup>6</sup>.

<sup>6</sup>Se ha venido utilizando la notación  $d\Omega$  para denotar al diferencial del dominio, sin embargo, dado que en este contexto el dominio es inherentemente el volumen de control, en algunas secciones se hará uso de la notación  $dV$  o  $d\Omega$  indistintamente como equivalentes, por lo cual se hace la salvedad aquí. De forma similar se seguirá considerando a  $\underline{\psi}$  como un tensor de orden arbitrario, sin embargo la notación se cambiará a  $\psi$  de aquí en adelante, a menos que se indique lo contrario.

### 2.4.2. Aproximación de las integrales de de superficie

Luego de aplicar el teorema de Gauss a los términos que involucran divergencias en la forma integral de la ecuación de transporte genérica (Ec. 2.9), aparece la necesidad de evaluar integrales de superficie

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot \boldsymbol{\psi} d\Omega = \oint_{\delta\Omega} \boldsymbol{\psi} \cdot \mathbf{n} d\delta\Omega \quad (2.18)$$

Definiendo a  $\mathbf{n}d\delta\Omega = d\mathbf{S}$ , se tiene:

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot \boldsymbol{\psi} d\Omega = \oint_{\delta\Omega} \boldsymbol{\psi} \cdot d\mathbf{S} \quad (2.19)$$

Suponiendo que todas las caras que componen el contorno de la celda son planas y que la celda es cerrada en el sentido topológico y geométrico (la superficie de integración es conexa y cerrada), la expresión anterior se puede aproximar como la suma de las integrales sobre todas las caras:

$$\oint_{\delta\Omega} \boldsymbol{\psi} \cdot d\mathbf{S} = \sum_f \left( \int_f \boldsymbol{\psi} \cdot d\mathbf{S} \right) \quad (2.20)$$

Reemplazando la aproximación espacial propuesta (Ec. 2.10) en la integral sobre las caras se consigue

$$\begin{aligned} \int_f \boldsymbol{\psi} \cdot d\mathbf{S} &= \int_f \{ \boldsymbol{\psi}_f + (\mathbf{x} - \mathbf{x}_f) \cdot (\nabla \boldsymbol{\psi})_f \} d\mathbf{S} \\ &= \int_f \boldsymbol{\psi}_f \cdot d\mathbf{S} + \left\{ \int_f (\mathbf{x} - \mathbf{x}_f) d\mathbf{S} \right\} \cdot (\nabla \boldsymbol{\psi})_f \\ &= \boldsymbol{\psi}_f \cdot \mathbf{S} \end{aligned} \quad (2.21)$$

En la Ec. 2.17 se observó, cómo al proponer una variación lineal para la variable de interés sobre el volumen de control, la integral de volumen de la propiedad transportada resulta ser el producto del volumen de la celda por el valor de dicha propiedad en el centroide de la misma. En consecuencia, es posible evaluar el lado izquierdo de la Ec. 2.18 como el producto de  $\nabla \cdot \boldsymbol{\psi}$  por el volumen de la celda, entonces, reemplazando la Ec. 2.20 en el lado derecho y empleando la Ec. 2.21 se obtiene la siguiente expresión para evaluar las integrales de superficie:

$$\begin{aligned} (\nabla \cdot \boldsymbol{\psi}) V_P &= \sum_f (\boldsymbol{\psi}_f \cdot \mathbf{S}) \\ (\nabla \cdot \boldsymbol{\psi}) &= \frac{1}{V_P} \sum_f (\boldsymbol{\psi}_f \cdot \mathbf{S}) \end{aligned} \quad (2.22)$$

La Ec. 2.22, corresponde a una versión discreta de segundo orden del teorema de Gauss [8, 20], la cual permite evaluar la divergencia de un campo tensorial  $\nabla \cdot \boldsymbol{\psi}$  como la suma del producto del valor de dicho campo en el centro de las caras por el vector de superficie saliente de las mismas dividida por el volumen de la celda. Considerando la discretización geométrica descrita, el vector de área  $\mathbf{S}_f$  apunta hacia afuera desde el centroide de la celda si y sólo si la cara  $f$  pertenece a la celda propietaria. Para las caras vecinas, el vector de área apunta en sentido contrario, esto se tiene en cuenta en la sumatoria sobre las caras de la siguiente forma

$$\sum_f (\boldsymbol{\psi}_f \cdot \mathbf{S}) = \sum_{f_o} (\boldsymbol{\psi}_f \cdot \mathbf{S}_f) - \sum_{f_v} (\boldsymbol{\psi}_f \cdot \mathbf{S}_f) \quad (2.23)$$

La expresión anterior divide la sumatoria sobre las caras propietarias  $f_o$  y vecinas  $f_v$  atendiendo a la orientación del vector de superficie.

### 2.4.3. Términos convectivos

Cuando se analizó la discretización de la ecuación de transporte genérica, se mostró que luego de aplicar el teorema de Gauss a los términos que estaban afectados por el operador divergencia, estos pasan de ser integrales sobre el volumen a ser integrales de superficie, es decir:

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \psi) d\Omega = \int_{\delta\Omega} (\rho \mathbf{U} \psi) \cdot \mathbf{n} d\delta\Omega$$

Esta clase de términos da lugar a los denominados **flujos convectivos**  $\phi_c$ , empleando lo expuesto en la Sección.2.4.2, esta integral se puede aproximar de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} \int_{\delta\Omega} (\rho \mathbf{U} \psi) \cdot \mathbf{n} d\delta\Omega &= \sum_f (\rho \mathbf{U} \psi)_f \cdot \mathbf{S} \\ &= \sum_f ((\rho \mathbf{U})_f \cdot \mathbf{S}) \psi_f \\ &= \sum_f \phi_c \psi_f \end{aligned} \quad (2.24)$$

Para calcular los flujos convectivos (Ec. 2.24) es necesario conocer el valor de  $\psi$  en las caras, el cual se determina a partir del valor en el centro de la celda. Para determinar el valor de  $\psi_f$  se utilizan **esquemas de interpolación**, estos esquemas deben garantizar que la variable correspondiente se mantenga acotada y no dé lugar a la aparición de valores espurios.

### 2.4.4. Esquemas de interpolación (Reconstrucción)

Con el método de los volúmenes finitos es fundamental contar con procedimientos adecuados que permitan interpolarla variable transportada desde el centro de las celdas  $\psi_P$  al centro de las caras  $\psi_f$ . El *software* empleado en este trabajo utiliza mallas no estructuradas, por lo tanto, resulta poco conveniente emplear otros puntos que no sean  $P$  y  $N$  [8]. Es decir, se utilizan únicamente los puntos más cercanos al volumen de control.

Existen distintos esquemas de interpolación que pueden ser utilizados para evaluar el valor de la variable sobre la cara a partir de su valor en el centroide de la celda. A continuación se describen brevemente algunos de ellos y en el Cap. 4 se describen esquemas que corresponden al estudio de flujos con altas velocidades, esquemas que se construyen atendiendo a características propias de dichos patrones de flujo.

#### Esquema centrado

El esquema centrado supone una variación lineal entre los centroides de las celdas, puesto que se consideran mallas no estructuradas, en general, la distancia entre los puntos no será constante.

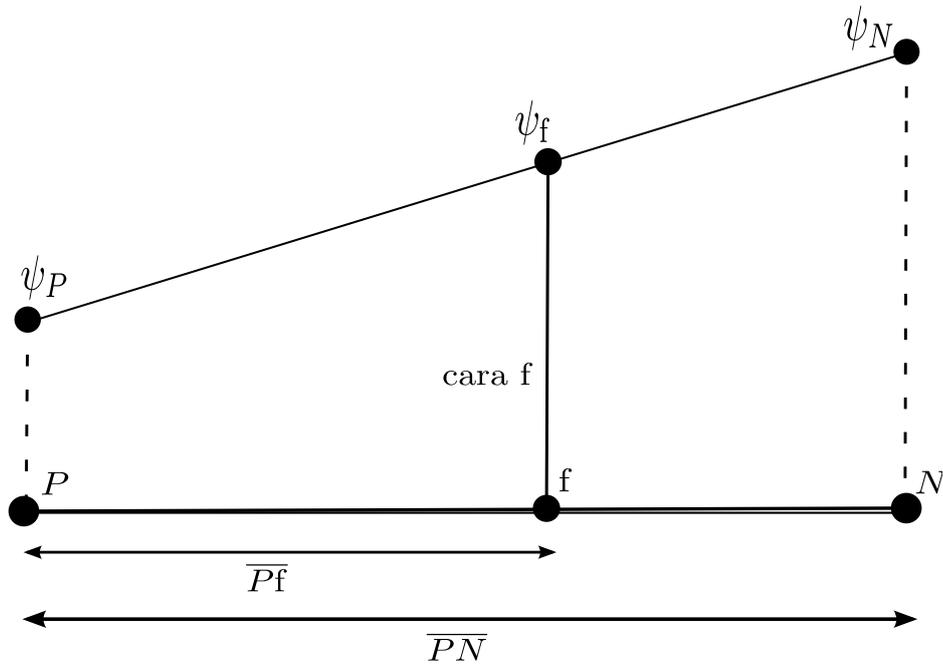


Fig. 2.4: Interpolación lineal en las caras

Dada la variación lineal supuesta (Fig. 2.4), el valor de  $\psi_f$  se puede aproximar:

$$\begin{aligned}\psi_f &= \frac{\psi_N - \psi_P}{\overline{PN}} (\overline{PN} - \overline{fN}) + \psi_P \\ &= \psi_N \left(1 - \frac{\overline{fN}}{\overline{PN}}\right) + \psi_P \frac{\overline{fN}}{\overline{PN}}\end{aligned}\tag{2.25}$$

Mediante expansión en serie de Taylor, es simple mostrar que este esquema es de segundo orden (Sección.2.4) inclusive en mallas no uniformes, sin embargo, tiende a inducir oscilaciones cuando se utiliza en problemas donde la convección es dominante. Por esta razón aparecen esquemas más sofisticados que garantizan dicha condición [9], estos esquemas se conocen como esquemas tipo *upwind* y se construyen atendiendo a ciertas características físicas de las ecuaciones a resolver, donde una de las más notables es que distinguen la dirección del flujo, es decir, tienen en cuenta la dirección de influencia de acuerdo a la dirección de propagación de las ondas [2]. Este es el caso de los esquemas que se introducirán en Cap. 4.

### Esquema *upwind*

En un flujo con efectos convectivos fuertes, al determinar el valor de una variable dependiente en una cara  $\psi_f$  del volumen de control, es evidente que el valor en dicha cara se verá influenciado en mayor medida por la información proveniente de algunos nodos en particular. El esquema centrado es incapaz de ponderar dicha influencia, ya que tiene en cuenta en igual medida la influencia de todos los nodos circundantes. Para solventar esta incapacidad del esquema centrado aparece el esquema *upwind*. Con el esquema *upwind*, los valores en las caras se evalúan dependiendo de la dirección del flujo [2]:

$$\psi_f = \frac{\max(\phi_c, 0)\psi_P + \min(\phi_c, 0)\psi_N}{\phi_c}\tag{2.26}$$

Este esquema no permite que aparezcan coeficientes negativos en la matriz del sistema, por lo que garantiza resultados acotados y físicamente posibles, sin embargo, al realizar la expansión en serie de Taylor [9], se observa que únicamente retiene el primer término de la serie, entonces a diferencia del esquema centrado, únicamente es de primer orden de precisión. La principal desventaja del esquema *upwind* es que al ser de primer orden da origen a la aparición de **falsa difusión o difusión numérica** [16]. No obstante, la aparición de dicha difusión numérica no sólo se asocia con el orden del esquema numérico, también se ve influenciada por la grilla (falta de alineación del flujo con las direcciones de la grilla) y por la presencia de fuertes gradientes en el campo de flujo [1]. La falsa difusión se reduce a medida que la malla se refina y mediante la utilización de esquemas con un orden de aproximación superior.

### Esquema centrado *upwinded* (linear *upwind*)

El esquema centrado *upwinded*, se puede pensar como la aplicación de una corrección al esquema *upwind* mediante la utilización del gradiente en la celda aguas arriba de la interfaz. La denominación dada aquí al esquema se debe a la nomenclatura utilizada dentro de openFoam™, no obstante, como se menciona más adelante, el procedimiento aquí descrito es parte fundamental de la reconstrucción en mallas no estructuradas. Se considerará un arreglo unidimensional como el que se mostró en la Fig. 2.4 y se supondrá flujo positivo de  $P$  hacia  $N$ . Este esquema interpola el valor en la cara utilizando la siguiente expresión:

$$\psi_f = \psi_{f,UP} + \nabla\psi_{AR_f} \cdot \mathbf{r}_{fAR_c} \quad (2.27)$$

donde  $\psi_{f,UP}$  es el valor de la variable de interés en la cara evaluado con el esquema *upwind*,  $\nabla\psi_{AR_c}$  el gradiente de  $\psi$  evaluado en la celda ubicada aguas arriba, y  $\mathbf{r}_{fAR_c}$  el vector de posición entre el centroide de la cara y el centroide de la celda aguas arriba. En un caso con flujo desde  $P$  hacia  $N$  ( $\phi_c > 0$ ) mostrado en la Fig. 2.4 se tiene:

$$\psi_f = \psi_P + \nabla\psi_P \cdot \mathbf{r}_{fP} \quad (2.28)$$

Nótese que para utilizar dicho esquema se requiere evaluar el gradiente en cada celda, lo cual se deja abierto por ahora, dado que en una sección posterior se introducirá la forma cómo se realiza esta estimación (Sección.2.4.7). Este esquema es de segundo orden y limita la difusión de acuerdo a la aproximación que se utilice para evaluar el gradiente. Es evidente que este esquema se deriva de la expansión en serie de Taylor  $\psi$  alrededor del centroide de  $P$  [21].

### Esquema híbrido o combinado

El esquema híbrido es una combinación del esquema *upwind* y el centrado en un sentido más general que el esquema centrado *upwinded* [1]. Este esquema se basa en el número de Peclet local para evaluar el flujo neto a través de las caras.

$$Pe = \frac{\text{flujo convectivo}}{\text{flujo difusivo}} = \frac{\phi_c}{\phi_d} \quad (2.29)$$

De la definición del número de Peclet, es evidente que para altos valores del mismo los efectos convectivos serán preponderantes sobre los difusivos y viceversa. El esquema híbrido propuesto por Spalding en 1972 [22], intercambia el esquema de discretización entre centrado y *upwind*

acorde a un criterio similar al presentado aquí, el cual está basado en éste último. En este caso la interpolación de  $\psi_f$  resulta:

$$\psi_f = (1 - \chi) (\psi_f)_{UP} + \chi (\psi_f)_{CD} \quad (2.30)$$

donde los subíndices  $CD$  y  $UP$  representan a los valores obtenidos al interpolar con los esquemas centrado y *upwind* respectivamente. El parámetro  $\chi$  (el cual se denominará aquí **factor de ponderación convección-difusión** (FPCD)) se encuentra dentro del intervalo  $0 \leq \chi \leq 1$ , y tiene implícita la ponderación de los efectos convectivos frente a los difusivos. Este parámetro determina la cantidad de difusión numérica introducida en la solución. Cabe notar que definiendo a  $\chi = 0$  se recupera al esquema *upwind*, y con  $\chi = 1$  al centrado. Esto indica que a medida que los efectos convectivos sean más importantes, el valor seleccionado para el FPCD debe aproximarse a la unidad, lo que proporciona un primer indicio de que es factible escribir a los esquemas numéricos de forma tal que se pueda llegar a una expresión genérica de los mismos.

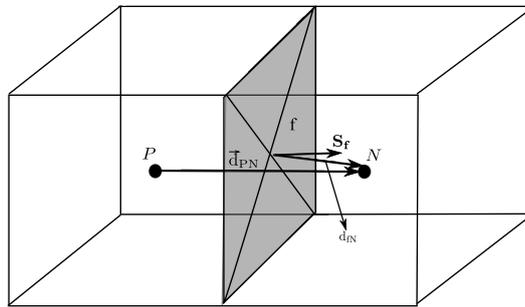


Fig. 2.5: Flujo en la dirección  $P \rightarrow N$

### Generalización de los esquemas de interpolación

Considérese el transporte por convección en un dominio unidimensional de una cantidad escalar  $\psi$  como es mostrado en la Fig. 2.5, supóngase que se interpola el valor de la variable de interés hacia la cara de la siguiente forma [8, 19]:

$$\psi_f = \Gamma \psi_P + (1 - \Gamma) \psi_N \quad (2.31)$$

donde al **factor de interpolación** ( $\Gamma$ ) se le asigna una forma apropiada consistente con el tipo de esquema que se considere. Así, si se supone una discretización que emplea el esquema centrado (Sección.2.4.4) dicho factor toma la forma:

$$\Gamma_{CD} = \frac{\overline{fN}}{\overline{PN}} \quad (2.32)$$

Operando con  $\Gamma_{CD}$  sobre la Ec. 2.31, es evidente que se recupera la aproximación para  $\psi_f$  provista por el esquema centrado (Ec. 2.25):

$$\psi_f = \left(1 - \frac{\overline{fN}}{\overline{PN}}\right) \psi_N + \frac{\overline{fN}}{\overline{PN}} \psi_P \quad (2.33)$$

Esto conduce a pensar que cualquier esquema de discretización puede ser implementado proporcionando la forma apropiada al factor de interpolación ( $\Gamma$ ). Ahora considérese que se aplica el

esquema *upwind* (Sección.2.4.4), según lo indicado por la Ec. 2.26, es claro que el flujo convectivo ( $\phi_c = \mathbf{U} \cdot \boldsymbol{\psi}_f$ ) resulta en la dirección positiva si  $\phi_c > 0$ , con lo que:

$$\phi_c = \phi_P \quad (2.34)$$

De esta forma, para un flujo convectivo en la dirección positiva si se toma el factor de interpolación ( $\Gamma$ ) en la Ec. 2.31 con valor unitario se obtiene la discretización proporcionada por el esquema *upwind*, de forma similar, para el caso contrario (flujo en la dirección negativa) el valor que adoptará  $\Gamma$  será nulo. De acuerdo a esto, el factor de interpolación correspondiente al esquema *upwind* se define como:

$$\Gamma_{UP} = \frac{\max(\phi_c, 0)}{\phi_c} \quad (2.35)$$

Recordando que para el esquema híbrido (Sección.2.4.4) la interpolación de la variable de interés resulta:

$$\boldsymbol{\psi}_f = (1 - \chi) (\boldsymbol{\psi}_f)_{UP} + \chi (\boldsymbol{\psi}_f)_{CD} \quad (2.36)$$

luego, reemplazando en la ecuación anterior (Ec. 2.36) la Ec. 2.31 se obtiene:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\psi}_f &= (1 - \chi) (\boldsymbol{\psi}_f)_{UP} + \chi (\boldsymbol{\psi}_f)_{CD} \\ &= (1 - \chi) (\Gamma \boldsymbol{\psi}_p + (1 - \Gamma) \boldsymbol{\psi}_N)_{UP} + \chi [\Gamma \boldsymbol{\psi}_p + (1 - \Gamma) \boldsymbol{\psi}_N]_{CD} \\ &= (1 - \chi) [\Gamma_{UP} \boldsymbol{\psi}_p + (1 - \Gamma_{UP}) \boldsymbol{\psi}_N] + \chi [\Gamma_{CD} \boldsymbol{\psi}_p + (1 - \Gamma_{CD}) \boldsymbol{\psi}_N] \\ &= [(1 - \chi) \Gamma_{UP} + \chi \Gamma_{CD}] (\boldsymbol{\psi}_p - \boldsymbol{\psi}_N) + \boldsymbol{\psi}_N \end{aligned} \quad (2.37)$$

De esta forma es posible generalizar los esquemas numéricos mediante el ya definido FPCD (ver Ec. 2.30) y un **factor limitador** ( $\omega = ((1 - \chi) \Gamma_{UP} + \chi \Gamma_{CD})$ ), dicha generalización se conoce como esquemas tipo *upwind* sesgados [1], puesto que combinan una contribución del esquema centrado y una del *esquema upwind* en la interpolación.

### Esquemas de Alto orden en mallas no estructuradas y reconstrucción

Considérese el esquema *central upwinded* introducido previamente en la Sección.2.4.4, la interpolación sobre la cara dada por dicho esquema para un flujo desde  $P$  hacia  $N$  tiene la forma:

$$\boldsymbol{\psi}_f = \boldsymbol{\psi}_P + \nabla \boldsymbol{\psi}_P \cdot \mathbf{r}_{fP} \quad (2.38)$$

Este tipo de interpolación se conoce como **reconstrucción** y es parte fundamental del método de volúmenes finitos, debido a que en diferentes técnicas en el contexto de mallas no estructuradas el orden de la aproximación depende del tipo de reconstrucción utilizada [23]. Para mallas no estructuradas la forma de reconstrucción introducida por Barth y Jespersen resulta [21, 23]:

$$\boldsymbol{\psi}_f = \boldsymbol{\psi}_P + \Psi(r) \nabla \boldsymbol{\psi}_P \cdot \mathbf{r}_{fP} \quad (2.39)$$

donde  $\Psi(r)$  es la función limitadora, la cual es la encargada de que el valor reconstruido respete el principio de monotonicidad, y por lo tanto, el valor reconstruido se encuentre acotado entre los valores máximos y mínimos circundantes [21]. La forma de reconstrucción dada por Ec. 2.39 requiere conocer el gradiente en  $P$ , esto se conoce como **reconstrucción del gradiente** y es abordado en la Sección.2.4.7.

## Esquemas TVD

Como se mostró anteriormente el esquema centrado es de segundo orden pero produce oscilaciones en la solución, el esquema *upwind* no presenta el problema de las oscilaciones pero genera falsa difusión al ser únicamente de primer orden. Previamente se determinó que es posible establecer una generalización de los esquemas numéricos empleando una función que define al FPCD en función del gradiente en la cara de la celda, además, se introdujo el procedimiento de reconstrucción donde se mencionó el uso de la función limitadora y el concepto de la monotonicidad. A continuación se desarrolla una discusión más detallada de estos conceptos.

Los esquemas definidos hasta el momento, no cuentan con un equilibrio apropiado entre la difusión numérica que agregan a la solución (caso del esquema *upwind*) y un adecuado orden de precisión. Para resolver este problema aparecen los **esquemas TVD** (variación total disminuida) [24, 25] con la finalidad de evitar la aparición de oscilaciones en la solución y controlar la difusión numérica que se agrega.

Originalmente los esquemas TVD fueron introducidos en el campo de la dinámica de gases con el objetivo principal de resolver problemas de carácter hiperbólico [26]. En dicho contexto, se estableció que la propiedad fundamental que deben satisfacer los esquemas de alto orden con el fin de brindar una solución estable, acotada y libre de oscilaciones, es la conocida como **preservación de la monotonicidad**. Las condiciones necesarias para que un esquema preserve la monotonicidad se pueden expresar como [1, 2, 15, 18]:

1. No deben aparecer mínimos o máximos en la solución.
2. De existir máximos o mínimos en la solución, estos respectivamente no deben aumentar o disminuir.

Es decir, para cualquier condición inicial  $\psi(0, \mathbf{x})$  la cual no es decreciente o creciente, la solución numérica  $\psi^n$  para cualquier instante de tiempo futuro  $\{n = 1, 2, 3, \dots\}$  no debe presentar una amplificación o creación de nuevos extremos locales. La idea de los esquemas TVD introducida por Harten [24] tiene por objetivo prevenir la amplificación o creación de nuevos extremos en la solución en regiones del flujo en la que existen altos gradientes (p.e, en la vecindad de una onda de choque) [2]. La condición que debe satisfacer un esquema TVD es que la variación total (TV), definida a nivel discreto como:

$$\text{TV}(\psi^n) = \sum_i (\psi^n_N - \psi^n_P) \quad (2.40)$$

satisfaga [25]:

$$\text{TV}(\psi^{n+1}) \leq \text{TV}(\psi^n) \quad (2.41)$$

Sweby demostró que este tipo de esquemas satisfacen la **condición de entropía**<sup>7</sup> lo que es de suma importancia para obtener soluciones físicamente posibles [25].

Retomando la Ec. 2.37 en la forma:

$$\psi_f = \omega (\psi_P - \psi_N) + \psi_N \quad (2.42)$$

<sup>7</sup>Al resolver numéricamente las ecuaciones de Euler, pueden aparecer soluciones físicamente imposibles que violan la segunda ley de la termodinámica, por lo tanto, es necesario que el esquema numérico que sea utilizado para el cálculo respete la condición de que a través de una onda de choque la entropía debe incrementar y no viceversa.

donde  $\omega = ((1 - \chi)\Gamma_{UP} + \chi\Gamma_{CD})$  es el **factor limitador**, que a su vez depende del FPCD (el cual como ya se mencionó debe ser una función apropiada. Supóngase que se selecciona al FPCD como alguna función evaluada localmente  $\chi = \Psi(\psi_P - \psi_N)$ , donde dicha función de alguna forma está relacionada con el gradiente de la propiedad transportada ( $\nabla\psi$ ), dicha función en este contexto se conoce como **función limitadora**, la cual es una función de los gradientes sucesivos de la solución ( $\chi = \Psi(r)$ ) (Fig. 2.6) [1, 3, 24, 25] :

$$r = \frac{\psi_C - \psi_U}{\psi_D - \psi_C} \quad (2.43)$$

donde los puntos U,C y D, son seleccionados atendiendo a la dirección del flujo.

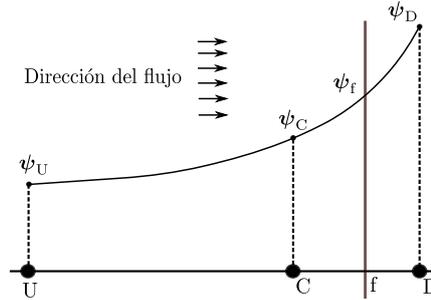


Fig. 2.6: Variación de  $\psi$  alrededor de la cara de la celda.

Para garantizar que un esquema numérico sea TVD, éste debe satisfacer la condición (Fig. 2.7.a) [25]:

$$0 \leq \left( \frac{\psi(r)}{r}, \psi(r) \right) \leq 2 \quad (2.44)$$

En la Fig. 2.7.b se observa que el esquema *upwind*, introducido anteriormente, corresponde a  $\psi(r) = 0$ , el cual es de primer orden tal cual fue indicado previamente; también de la misma figura se puede ver que el esquema centrado (segundo orden) corresponde a  $\psi(r) = 1$ , es decir, a pesar de que la función  $\psi(r)$  se encuentre sobre la región TVD, esto no garantiza que el esquema sea de segundo orden. Sweby demostró que para que un esquema TVD sea de segundo orden es necesario que la función limitadora satisfaga:

$$\psi(1) = 1 \quad (2.45)$$

Por lo tanto, una función limitadora que cumpla la condición TVD (Ec. 2.44) y además atraviese el plano  $\psi - r$  en (1,1) garantizará un esquema de segundo orden. De aquí que se puede establecer la región TVD de segundo orden (Fig. 2.7.c) como aquella en la cual :

- Si  $0 < r < 1$ , el límite inferior y superior serán respectivamente  $\psi(r) = r$  y  $\psi(r) = 1$ , entonces el esquema será TVD si  $r \leq \psi(r) \leq 1$ .
- Si  $r > 1$ , el límite inferior y superior serán respectivamente  $\psi(r) = 1$  y  $\psi(r) = r$ , entonces el esquema será TVD si  $1 \leq \psi(r) \leq r$ .

A lo largo de los años han aparecido gran variedad de funciones limitadoras con diferentes características, por ejemplo, la función limitadora de van Leer [27], la de Sweby [25], la de van Albada [28] y las funciones Min-Mod y SUPERBEE de Roe [29]. Puesto que no es el objetivo central de este trabajo analizar cada una de ellas, únicamente se mencionarán algunas de las existentes (ver Tab. 2.2), de las cuales a su vez se seleccionarán las adecuadas para el desarrollo de algunas de las

	$\psi(r)$
van Leer	$\frac{r +  r }{1 + r}$
Sweby <sup>8</sup>	$\max [0, \min (\beta r, 1), \min (r, \beta)]$
van Albada	$\frac{r + r^2}{1 + r^2}$
MinMod	$\max [0, \min (r, 1)]$
SUPERBEE	$\max [0, \min (2r, 1), \min (r, 2)]$

Tabla 2.2: Funciones limitadoras: van Leer, Sweby, van Albada, MinMod y SUPERBEE

simulaciones numéricas objeto de la presente tesis.

Nótese que todas las funciones limitadoras citadas aquí, son simétricas, es decir se verifica que[1]:

$$\frac{\psi(r)}{r} = \psi\left(\frac{1}{r}\right) \quad (2.46)$$

Esta característica de simetría es deseable ya que garantiza que la acción limitante opera de la misma forma tanto en los gradientes de avance como en los de retroceso.

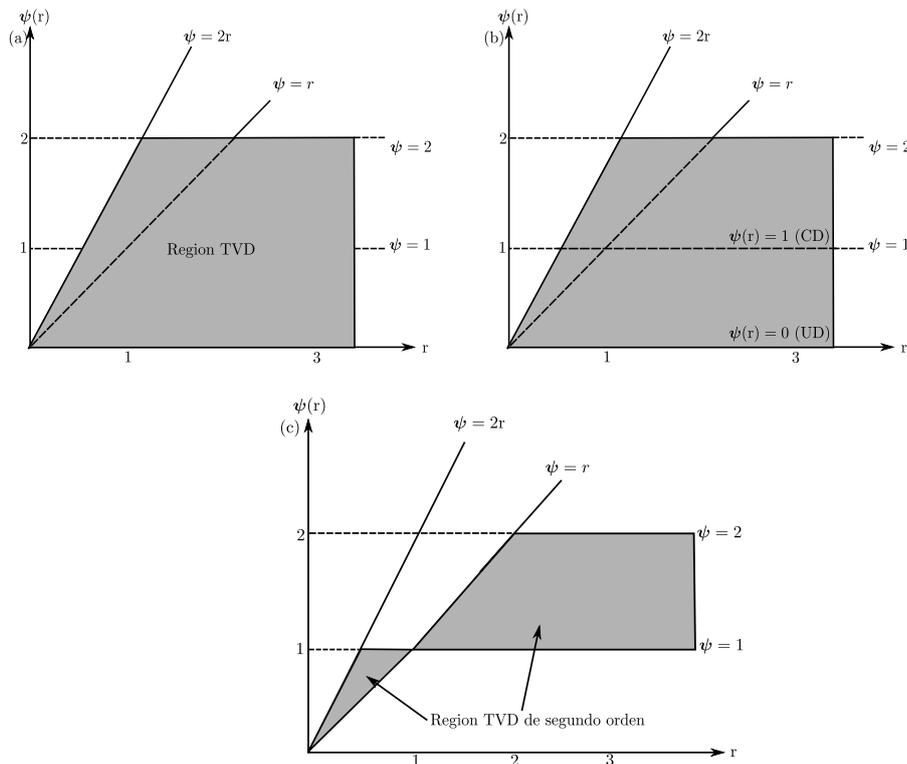


Fig. 2.7: (a) Región TVD, (b) Esquemas central y *upwind* dentro de la región TVD, (c) Región TVD de segundo orden.

En esta sección se mostró que dentro de openFoam<sup>TM</sup> existe una amplia grilla de esquemas de discretización disponibles para tratar las interpolaciones, lo que proporciona la posibilidad de seleccionar el más adecuado atendiendo al problema que se pretende resolver. Aunque aquí no se mencionaran, dentro de openFoam<sup>TM</sup> existen enfoques alternativos en lo que respecta a esquemas de alto orden. En lugar de emplear esquemas basados en la técnica TVD, dentro de los esquemas implementados también se encuentran los basados en el enfoque alternativo denominado *Normalized Variable Diagram* (NVD) [8, 30, 31]. Puesto que aquí no se emplea dicho enfoque únicamente se menciona a nivel informativo.

### 2.4.5. Términos difusivos

Al aplicar el teorema de Gauss al término difusivo de la Ec. 2.2, se transforma a la integral de volumen en una de superficie:

$$\int_V \nabla \cdot \rho D \nabla \psi d\Omega = \int_{\delta\Omega} (\rho D \nabla \psi) \cdot \mathbf{n} d\delta\Omega$$

Utilizando lo expuesto en la Sección.2.4.2 es posible aproximar el término del lado derecho de la ecuación anterior en la forma:

$$\int_{\delta\Omega} (\rho D \nabla \psi) \cdot \mathbf{n} d\delta\Omega = \sum_f (\rho D \nabla \psi)_f \cdot \mathbf{S} + \sum_f (\rho D)_f \mathbf{S} \cdot (\nabla \psi)_f \quad (2.47)$$

Se observa que es necesario realizar un procedimiento de interpolación para evaluar el coeficiente de difusión en las caras, lo cual según lo expuesto en la Sección.2.4.4, no es problema incluso en mallas no estructuradas. Sin embargo, también se hace necesario evaluar el gradiente de la variable de interés. Al utilizar mallas no estructuradas se encuentra presente la posibilidad de tener distintos grados de ortogonalidad<sup>9</sup>. Se requiere entonces implementar un procedimiento que permita evaluar gradientes teniendo en cuenta los efectos de la no ortogonalidad y al mismo tiempo consiguiendo una aproximación del orden adecuado.

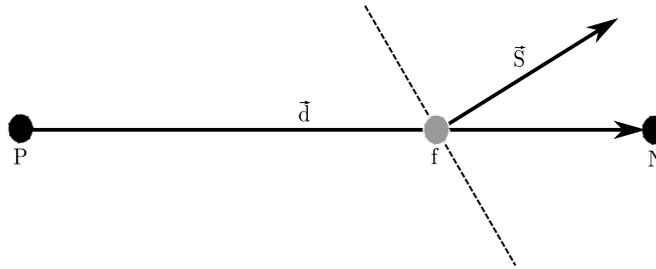


Fig. 2.8: Corrección de la no-ortogonalidad.

Supóngase que el producto entre el vector de superficie  $\mathbf{S}$  y el gradiente de la variable de interés  $(\nabla \psi)_f$  se puede dividir en una contribución ortogonal y una de corrección [8]:

$$\mathbf{S} \cdot (\nabla \psi)_f = \underbrace{\Delta \cdot (\nabla \psi)_f}_{\text{Contribución Ortogonal}} + \underbrace{\mathbf{k} \cdot (\nabla \psi)_f}_{\text{Corrección No Ortogonal}} \quad (2.48)$$

Los vectores  $\Delta$  y  $\mathbf{k}$  se eligen de forma tal que satisfacen:

$$\mathbf{S} = \Delta + \mathbf{k} \quad (2.49)$$

A su vez, el vector  $\Delta$  se selecciona buscando que sea paralelo al vector de posición  $\mathbf{d}$  que conecta los centroides de las celdas (Fig. 2.8). Esto permite evaluar dicha contribución ortogonal como<sup>10</sup>:

$$\Delta \cdot (\nabla \psi)_f = |\Delta| \frac{\psi_N - \psi_P}{|\mathbf{d}|} \quad (2.50)$$

Ahora sólo resta evaluar la corrección de la no-ortogonalidad. Para hacer esta corrección existen distintos métodos, los cuales se discuten brevemente a continuación [8, 20].

<sup>9</sup>La ortogonalidad se define como el ángulo (medido en grados) dado por el vector definido por los centroides y el vector normal a la cara intercelda

<sup>10</sup>Esta contribución ortogonal responde a la componente del gradiente en la dirección de  $\mathbf{d}$ .

### Método de la corrección mínima

Se descompone el vector de superficie ( $S$ ) de forma tal que el término de corrección en la Ec. 2.49 aporte la mínima contribución posible. Tomando ortogonales a  $\Delta$  y  $k$ :

$$\Delta = \frac{\mathbf{d} \cdot \mathbf{S}}{\mathbf{d} \cdot \mathbf{d}} \mathbf{d} \quad (2.51)$$

Con lo que  $k$  resulta:

$$\mathbf{k} = \mathbf{S} - \frac{\mathbf{d} \cdot \mathbf{S}}{\mathbf{d} \cdot \mathbf{d}} \mathbf{d} \quad (2.52)$$

Nótese que a medida que la no-ortogonalidad aumenta la contribución desde los nodos se hace menor.

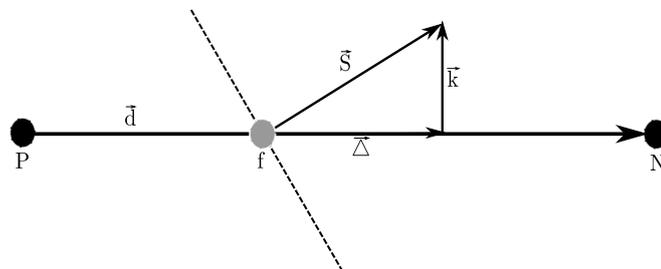


Fig. 2.9: Método de la corrección mínima

### Método de la corrección ortogonal

Mantiene la misma contribución de los nodos involucrados independiente de la no ortogonalidad (Fig. 2.10), se define al vector  $\Delta$ :

$$\Delta = \frac{\mathbf{d}}{|\mathbf{d}|} |\mathbf{S}| \quad (2.53)$$

De esta forma para  $k$  se tiene:

$$\mathbf{k} = \mathbf{S} - \frac{\mathbf{d}}{|\mathbf{d}|} |\mathbf{S}| \quad (2.54)$$

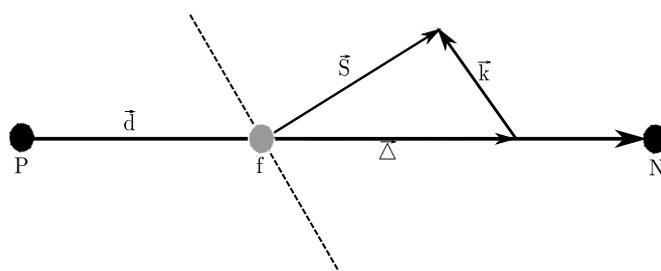


Fig. 2.10: Método de la corrección ortogonal

### Método de sobre-relajación

Esta técnica pondera la influencia en los nodos involucrados de acuerdo con el incremento de la no-ortogonalidad:

$$\Delta = \frac{\mathbf{d}}{\mathbf{d} \cdot \mathbf{S}} |\mathbf{S}|^2 \quad (2.55)$$

Es interesante ver que en mallas ortogonales la versión discreta del término difusivo únicamente satisface la propiedad de acotación (*boundedness property*), es decir que el enfoque de corrección afecta de manera contundente la acotación de la solución [1, 9]. En mallas con alto grado de no-ortogonalidad pueden aparecer soluciones no acotadas, entonces si la preservación de la acotación es de mayor importancia que la precisión de la solución, las correcciones de no ortogonalidad deben ser limitadas o descartadas definitivamente y se debe optar en lo posible por una construcción de la malla más adecuada.

Todos los métodos que se mencionaron pueden ser aplicados a fin de evaluar el término asociado a la corrección de la no-ortogonalidad, la diferencia de aplicar uno u otro tiene consecuencias en la precisión y estabilidad de acuerdo a la no-ortogonalidad de la malla [8].

Finalmente, la forma discreta del término difusivo resulta:

$$\mathbf{S} \cdot (\nabla \psi)_f = |\Delta| \frac{\psi_N - \psi_P}{|\mathbf{d}|} + \mathbf{k} \cdot (\nabla \psi)_f \quad (2.56)$$

donde  $\Delta$  y  $\mathbf{k}$  quedan determinados de acuerdo a alguna de las metodologías expuestas (Sección.2.4.5, Sección.2.4.5, Sección.2.4.5) y el gradiente en la cara de la celda de la propiedad transportada puede ser interpolado por ejemplo utilizando el esquema centrado:

$$(\nabla \psi)_f = \left(1 - \frac{f\bar{N}}{P\bar{N}}\right) (\nabla \psi)_N + \frac{f\bar{N}}{P\bar{N}} (\nabla \psi)_P \quad (2.57)$$

y en general:

$$(\nabla \psi)_f = (1 - \Gamma) (\nabla \psi)_N + \Gamma (\nabla \psi)_P \quad (2.58)$$

### 2.4.6. Términos fuentes

Los términos fuentes pueden ser función de la variable transportada (p.e, en el caso de la ecuación de las especies el término de producción/consumo de las mismas es función de su concentración). Cabe notar que cualquier término que aparezca en una ecuación de gobierno que no pueda ser expresado como convectivo, difusivo o temporal puede ser tratado como un término fuente [8]. Sin embargo, es importante tener presente el impacto tanto en la acotación como en la precisión de la solución de la discretización seleccionada para los términos fuentes con respecto a los otros términos de la ecuación. Existen distintas metodologías para tratar los términos fuentes, openFoam™ ofrece 3 alternativas [16, 32]:

- Tratamiento explícito: Se especifica al término fuente como un valor que se ha calculado de algún modo y entra de forma explícita dentro de la ecuación como una contribución al vector del lado derecho.

- Tratamiento implícito: el término fuente se integra sobre el dominio y se evalúa de forma implícita (es decir con la ecuación que lo contiene).
- Tratamiento implícito/explicito: El tratamiento implícito de los términos fuentes afecta los coeficientes de la matriz resultante de la discretización, incrementando o reduciendo su dominancia diagonal. Si ésta se reduce, se puede afectar la estabilidad del método iterativo seleccionado para solucionar el sistema, dado este inconveniente, openFoam<sup>TM</sup> ofrece un procedimiento de discretización mixto, el cual trata a los términos fuentes de forma implícita si los coeficientes  $(a_{ij})$  satisfacen:  $a_{ij} > 0$  es decir no son negativos, de lo contrario se tratan de forma explícita.

### Tratamiento implícito de los términos fuentes

De acuerdo a lo expresado en la sección anterior y recordando que en la Sección.2.4 se postuló que el término fuente puede ser expresado:

$$S_\psi(\psi) = S_r\psi + S_q \quad (2.59)$$

Utilizando lo expuesto en la Sección.2.4.1, la discretización del término fuente conduce a:

$$\int_V (S_r\psi + S_q) dV = S_r V_p \psi_p + S_q V_p \quad (2.60)$$

En la sección donde se abordan los métodos de solución a los sistemas de ecuaciones provenientes de la discretización (Sección.2.5), se ampliará un poco más la importancia del tratamiento implícito de los términos fuentes de acuerdo a lo expuesto por Jasak [8].

### 2.4.7. Reconstrucción de los gradientes.

Los gradientes resultan ser términos explícitos y pueden ser evaluados empleando diferentes tipos de técnicas. En la Sección.2.4.4 se expuso el esquema de discretización central *upwinded*, y se observó que la utilización de dicho esquema requiere la evaluación del gradiente en cada celda. Aquí se expondrán las distintas técnicas actualmente implementadas dentro de openFoam<sup>TM</sup> que permiten dicha estimación.

#### Enfoque Gaussiano

De acuerdo a lo expuesto hasta el momento, resulta lógico que el primer enfoque para la reconstrucción se base en utilizar el teorema de Gauss para convertir un término que involucra un gradiente de una integral de volumen a una de superficie (Sección.2.4.2):

$$\begin{aligned} \int_\Omega \nabla(\psi) dV &= \int_S \psi dS \\ &= \sum_f \mathbf{S}_f \psi_f \end{aligned} \quad (2.61)$$

Al utilizar el esquema centrado para interpolar a  $\psi$ , el gradiente resulta ser constante sobre la celda, es decir:

$$\nabla(\psi)_P V_p = \sum_f \mathbf{S}_f \psi_f \quad (2.62)$$

Entonces el gradiente en el centroide se interpola:

$$\nabla(\psi)_p = \frac{1}{V_P} \sum_f \mathbf{S}_f \psi_f \quad (2.63)$$

Para obtener  $\psi_f$  se puede por ejemplo utilizar el esquema centrado o alguno de los expuestos en la Sección.2.4.4.

### Método de los mínimos cuadrados

Este método se basa en tres ideas fundamentales [10]:

1. El valor en un punto  $P$  puede ser extrapolado a un punto vecino  $N$  usando el gradiente en  $P$ .
2. El valor extrapolado a  $N$  puede ser comparado con el valor verdadero en  $N$ , y por lo tanto se puede estimar el error.
3. Si se minimiza el cuadrado de los errores ponderados en todos los puntos vecinos de  $P$  con respecto al gradiente, entonces la aproximación del gradiente será de buena calidad.

Definiendo al tensor  $\underline{\underline{\mathbf{G}}}$ :

$$\underline{\underline{\mathbf{G}}} = \sum w_N^2 \mathbf{d} \mathbf{d} \quad (2.64)$$

donde  $\mathbf{d}$  es el vector posición entre  $P$  y  $N$ , y la función de ponderación es definida como:

$$w_N = \frac{1}{|\mathbf{d}|} \quad (2.65)$$

El gradiente en  $P$  puede ser evaluado:

$$\nabla(\psi)_P = \sum_N w_N^2 \mathbf{G}^{-1} \cdot \mathbf{d} (\psi_N - \psi_P) \quad (2.66)$$

### Cómputo del gradiente normal a la cara de la celda

En algunas ocasiones se requiere evaluar el componente normal del gradiente entre dos celdas adyacentes, dicho componente resulta [4, 8, 10]:

$$\mathbf{S}_f \cdot \nabla(\psi)_f = |\mathbf{S}_f| \frac{\psi_N - \psi_P}{|\mathbf{d}|} \quad (2.67)$$

Nótese que esta expresión resulta análoga a la que se utiliza para evaluar el gradiente en la cara en los términos difusivos. Dicha aproximación es de segundo orden para mallas ortogonales, en el caso de mallas no ortogonales es necesario introducir correcciones y aplicar esquemas de interpolación con mayor grado de elaboración (ver Sección.2.4.4 y Sección.2.4.5).

### Limitadores para el gradiente y la reconstrucción

Un problema recurrente es que algunos esquemas numéricos violan la propiedad de acotación, lo cual da lugar a soluciones no físicas y a la aparición de oscilaciones en las soluciones numéricas, esto presenta un impacto de particular importancia en zonas donde se esperan altos gradientes (p.e, en la vecindad de las ondas de choque)[2]. Una alternativa para contribuir a la acotación y evitar la aparición de dichas oscilaciones espurias en el campo reconstruido, es utilizar la técnica conocida como limitación del gradiente (*gradient limiter*). Esta técnica se basa en el **principio de monotonicidad**, limitando el valor del gradiente que se utiliza para reconstruir los valores de los campos en las regiones contiguas a la cara de la celda.

Para llevar a cabo la limitación del gradiente existen distintas técnicas: **limitadores estándar**, **limitadores multidimensionales** y **funciones limitadoras**. Tanto la técnica de limitadores estándar como la multidimensional se encuentran en una subclase que se conoce en la literatura como métodos no diferenciables (*non-differentiable form*), dado que se basan en limitar el gradiente empleando los valores máximo y mínimo de las celdas adyacentes sin aplicar ningún tipo de función de suavizado. Por otro lado, las funciones limitadoras del tipo diferenciable utilizan una función suave que impone la monotonicidad. Aquí se expondrá únicamente la técnica de limitación estándar y se hará una breve referencia a la técnica multidimensional.

Las técnicas de limitación pueden ser aplicadas con respecto a los valores determinados en las caras o a los valores nodales, sin embargo, al utilizar los valores en el centro de la celda (nodos) se reducen los efectos disipativos [33]. Considérese un campo reconstruido el cual presenta oscilaciones locales en alguna dirección  $s$  (Fig. 2.11.a):

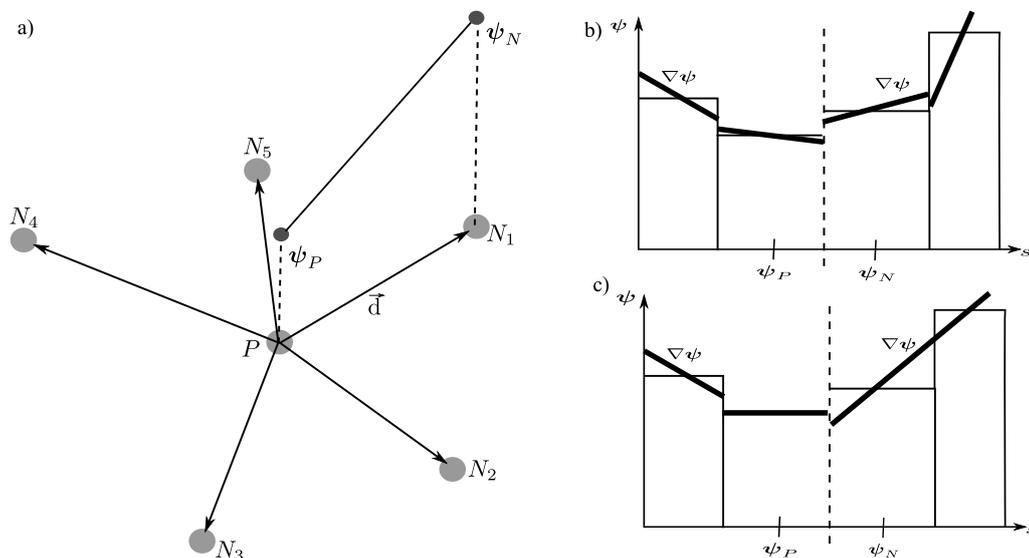


Fig. 2.11: Limitación del gradiente: b) reconstrucción sin limitador c) reconstrucción con limitador

En mallas no estructuradas con el fin de reducir el nivel de oscilaciones del campo reconstruido, es posible utilizar la función limitadora introducida por Barth y Jaspersen [21] a fin de limitar el gradiente utilizado para dicha reconstrucción. Esta función limitadora, básicamente tienen en cuenta el máximo y mínimo del campo tanto en la celda propietaria como en la vecina, para posteriormente definir un factor escalar que limita el gradiente, y así lograr que el campo reconstruido satisfaga la propiedad de acotación. La técnica propuesta por Barth y Jaspersen consiste en determinar un factor escalar  $\Psi$  tal que limite el gradiente utilizado para la reconstrucción:

$$\nabla\psi_N = \Psi_P \nabla\psi_N \quad (2.68)$$

El objetivo es encontrar un valor  $\Psi$  con tal magnitud que prevenga la formación de extremos en el campo reconstruido [34]. La forma de  $\Psi$  propuesta por Barth y Jasperesen resulta [2, 21, 34]:

$$\Psi_P = \min_N \begin{cases} \min \left( 1, \frac{\psi_{\max} - \psi_P}{\Delta_2} \right) & \text{si } \Delta_2 > 0 \\ \min \left( 1, \frac{\psi_{\min} - \psi_P}{\Delta_2} \right) & \text{si } \Delta_2 < 0 \\ 1 & \text{si } \Delta_2 = 0 \end{cases} \quad (2.69)$$

donde  $\Delta_2$ ,  $\psi_{\min}$  y  $\psi_{\max}$  están dados por:

$$\Delta_2 = \text{sign} \{ (\nabla \psi)_P \cdot \mathbf{d}_f \} \{ |(\nabla \psi)_P \cdot \mathbf{d}_f| + \omega_m \} \quad (2.69a)$$

$$\psi_{\max} = \max(\psi_P, \max_N \psi_N) \quad (2.69b)$$

$$\psi_{\min} = \min(\psi_P, \min_N \psi_N) \quad (2.69c)$$

Aquí  $\Delta_2$  es el producto entre el gradiente y el vector posición de la cara intercelda con respecto al centroide de la celda propietaria,  $\omega_m$  la precisión de la computadora y se introduce en la Ec. 2.69a con la finalidad de evitar que aparezcan valores muy chicos. En la Fig. 2.11.b, se puede observar un campo el cual se ha hecho la reconstrucción sin la utilización de ningún tipo de función limitadora y en la Fig. 2.11.c se observa el efecto del limitador<sup>11</sup>. En el caso multidimensional se aplica el factor limitador por separado en la dirección de cada cara, mientras que en el caso estándar se aplica el limitador a cada una de las componentes del gradiente [5].

La función limitadora de Barth y Jasperesen es algo difusiva, además de ser no diferenciable, con lo que la reconstrucción resultante tampoco lo será, lo que impacta negativamente en la convergencia [35, 36]. Para esta función  $\Psi$  está dado por:

$$\Psi_P = \min_N \begin{cases} \frac{1}{\Delta_2} \left[ \frac{(\Delta_1^2 + \varepsilon^2)\Delta_2 + 2\Delta_2^2\Delta_{1,\max}}{\Delta_{1,\max}^2 + 2\Delta_2^2 + \Delta_{1,\max}\Delta_2 + \varepsilon^2} \right] & \text{si } \Delta_2 > 0, \\ \frac{1}{\Delta_2} \left[ \frac{(\Delta_1^2 + \varepsilon^2)\Delta_2 + 2\Delta_2^2\Delta_{1,\min}}{\Delta_{1,\min}^2 + 2\Delta_2^2 + \Delta_{1,\min}\Delta_2 + \varepsilon^2} \right] & \text{si } \Delta_2 < 0, \\ 1 & \text{si } \Delta_2 = 0 \end{cases} \quad (2.70)$$

con  $\Delta_{1,\max} = \psi_{\max} - \psi_i$  y  $\Delta_{1,\min} = \psi_{\min} - \psi_i$ , donde  $\psi_{\max}$ ,  $\psi_{\min}$  y  $\Delta_2$  están dados por Ec. 2.69a, Ec. 2.69b y Ec. 2.69c. El parámetro  $\varepsilon^2$  se encarga de controlar el nivel de limitación. Si se impone  $\varepsilon^2 = 0$  la limitación es completa lo que puede retardar la convergencia. Es práctica común seleccionar a  $\varepsilon^2$  proporcional a una longitud característica [2]:

$$\varepsilon^2 = (K\Delta h)^3 \quad (2.71)$$

donde  $K$  es una constante con  $\mathcal{O}(1)$  y  $\Delta h$  la raíz cúbica del volumen (en 2D la raíz cuadrada del área) del volumen de control.

En el Cap. 4 los métodos utilizados con la librería `dbnsFoam` hacen uso bien sea de la función de Barth-Jasperesen o de la función de Venkatakrisnan.

<sup>11</sup>Cabe notar que el objetivo de este tipo de limitación es similar al que se realiza al utilizar esquemas de interpolación TVD.

### 2.4.8. Esquemas de integración temporal

Hasta ahora se habló de como tratar a cada uno de los términos de la ecuación de transporte genérica (Ec. 2.2), pero no se ha introducido la forma de realizar el avance temporal. Para esto se parte de la Ec. 2.9

$$\int_t^{t+\Delta t} \left\{ \frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho \psi d\Omega + \int_{\delta\Omega} (\rho \mathbf{U} \psi) \cdot \mathbf{n} d\delta\Omega - \int_{\delta\Omega} (\rho D \nabla \psi) \cdot \mathbf{n} d\delta\Omega \right\} dt \quad (2.72)$$

$$= \int_t^{t+\Delta t} \left\{ \int_{\Omega} S(\psi) d\Omega \right\} dt$$

Reemplazando en la Ec. 2.72 las aproximaciones propuestas en las secciones anteriores para los términos convectivo, difusivo y fuente (Ec. 2.24, Ec. 2.50 y Ec. 2.60), además, suponiendo que el volumen de control no cambia en el tiempo<sup>12</sup>:

$$\int_t^{t+\Delta t} \left\{ \left( \frac{\partial}{\partial t} (\rho \psi) \right)_p V_p + \sum_f \phi_c \psi_f - \sum_f (\rho D)_f \mathbf{S} \cdot (\nabla \psi)_f \right\} dt \quad (2.73)$$

$$= \int_t^{t+\Delta t} \{ S_r V_p \psi_p + S_q V_p \} dt$$

Expresión que se conoce como forma **semi-discreta** de la ecuación de transporte [3, 8]. Existen diferentes formas de tratar tanto las integrales temporales como la variación temporal de cada uno de los términos en la Ec. 2.73. Denotando por  $f(t, \psi(\mathbf{x}, t))$  a todos los términos espaciales, la Ec. 2.73 se puede escribir en la siguiente forma compacta [37]:

$$V_p \int_t^{t+\Delta t} \left\{ \left( \frac{\partial}{\partial t} (\rho \psi) \right)_p \right\} dt = \int_t^{t+\Delta t} f(t, \psi(\mathbf{x}, t)) dt \quad (2.74)$$

Integrando el miembro izquierdo de Ec. 2.74:

$$V_p (\rho^n \psi^n - \rho^{n-1} \psi^{n-1}) = \int_t^{t+\Delta t} f(t, \psi(\mathbf{x}, t)) dt \quad (2.75)$$

Aquí  $n$  y  $n-1$ , representan respectivamente el valor en el nuevo paso de tiempo y en el anterior. En este punto lo único que resta es definir la aproximación para evaluar al miembro derecho en la Ec. 2.75, para lo cual existen diferentes alternativas, en lo que sigue se expondrán tres de los métodos habituales dentro de openFoam<sup>TM</sup>.

- **Método de Euler explícito** Se aproxima al miembro derecho de la Ec. 2.75 en la siguiente forma [37]:

$$\int_t^{t+\Delta t} f(t, \psi(\mathbf{x}, t)) dt = f(t, \psi(\mathbf{x}, t^{n-1})) \Delta t \quad (2.76)$$

La integración se lleva a cabo de manera explícita utilizando los valores del paso de tiempo anterior (en el primer paso de tiempo se usan las condiciones iniciales), al ser explícito no requiere la solución de ningún sistema de ecuaciones, pero presenta restricciones en la selección del paso de tiempo. Resulta ser estable para valores del número de Courant menores

<sup>12</sup>Al suponer que el volumen de control no cambia en el tiempo, utilizando el teorema del transporte de Reynolds se verifica:  $\frac{d}{dt} \int_{\Omega} f dV = \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial t} f dV$

a 0.5 [3, 9, 18], el número de Courant dentro de openFoam™ está definido<sup>13</sup> [8] :

$$Co = \frac{|\mathbf{U}| \Delta t}{|\mathbf{d}|} \quad (2.77)$$

De forma que dada una malla, se deberá buscar un paso de tiempo tal que:

$$\frac{|\mathbf{U}| \Delta t}{|\mathbf{d}|} < \frac{1}{2} \quad (2.78)$$

Este esquema de integración temporal es el más sencillo y al realizar la expansión en serie de Taylor es fácil comprobar que es de primer orden de precisión [9]. Sin embargo, presenta la restricción indicada por el número de Courant, esta restricción se hace más evidente en problemas rígidos (*stiff*) donde por lo general existen diferentes escalas temporales involucradas, lo cual implica que se requiera emplear pasos de tiempo muy cortos. Este tipo de restricciones se evitan utilizando métodos de integración temporal implícitos los cuales resultan incondicionalmente estables bajo ciertas condiciones [2, 3, 9, 15, 38].

### ■ Método de Euler implícito

Utilizando este método, el miembro derecho de la Ec. 2.75 es aproximado en la siguiente forma [37]:

$$\int_t^{t+\Delta t} f(t, \psi(\mathbf{x}, t)) dt = f(t, \psi(\mathbf{x}, t^n)) \Delta t \quad (2.79)$$

Es decir, que se evalúan los términos espaciales en  $f(t, \psi(\mathbf{x}, t))$  utilizando los valores de  $\psi$  correspondientes al paso de tiempo  $n$ , lo que implica la solución de un sistema algebraico [9, 15]. El método resulta incondicionalmente estable en la medida que no se encuentren involucrados términos fuente del tipo *stiff*, es decir que no presenta problemas de inestabilidad ante pasos de tiempo largos (caso contrario al método de Euler explícito). Al igual que el método de Euler explícito también es de primer orden de precisión [9].

### ■ Método de Crank-Nicholson

Este esquema de integración temporal supone una variación lineal en el tiempo para  $f(t, \psi(\mathbf{x}, t))$  [9] :

$$\int_t^{t+\Delta t} f(t, \psi(\mathbf{x}, t)) dt = \frac{1}{2} [f(t, \psi(\mathbf{x}, t^{n-1})) + f(t, \psi(\mathbf{x}, t^n))] \Delta t \quad (2.80)$$

Requiere la evaluación de los términos espaciales tanto en el paso de tiempo  $n$  como en  $n - 1$  y al igual que el esquema de Euler implícito involucra la solución de un sistema algebraico, es de segundo orden de precisión, también resulta incondicionalmente estable, pero no garantiza que se satisfaga la propiedad de acotación [9].

Los esquemas de integración temporal pueden ser escritos en forma compacta:

$$\int_t^{t+\Delta t} f(t, \psi(\mathbf{x}, t)) dt = (1 - C)f(t, \psi(\mathbf{x}, t^{n-1})) \Delta t + Cf(t, \psi(\mathbf{x}, t^n)) \Delta t \quad (2.81)$$

Donde  $C$ , toma un valor apropiado dependiendo del esquema de integración que sea seleccionado, por ejemplo, para el método de Euler implícito  $C = 1$ .

<sup>13</sup>Satisfacer el número de Courant (también conocido como condición CFL) es condición necesaria pero no suficiente para garantizar la convergencia del método.

## 2.5. Métodos de solución aplicables de los sistemas de ecuaciones provenientes de la discretización

En las secciones anteriores se definió como tratar en forma discreta a cada uno de los términos involucrados en la ecuación de transporte genérica (Ec. 2.2), el resultado de la discretización puede ser escrito formalmente como [4, 8, 9]

$$a_p \psi_P^n + \sum a_N \psi_N^n = R_P \quad (2.82)$$

donde  $a_p$  y  $a_N$  representan respectivamente las contribuciones de las celdas propietarias y vecinas, en consecuencia, se tiene tantas ecuaciones como el producto del número de celdas por la cantidad de variables dependientes. En general la representación discreta del sistema de ecuaciones puede ser escrita en forma matricial:

$$[A] \psi = \mathbf{R} \quad (2.83)$$

donde  $[A]$  es una matriz dispersa<sup>14</sup> cuya diagonal corresponde a las contribuciones de  $\psi_P$  y los coeficientes fuera de la diagonal corresponden a las contribuciones de  $\psi_N$ . En este caso  $\psi$  representa al vector columna de variables dependientes y  $\mathbf{R}$  el vector de términos fuente. La matriz  $[A]$  a su vez puede ser descompuesta en dos matrices  $[D]$  y  $[N]$ , donde  $[D]$  contiene los coeficientes de la diagonal y  $[N]$  los coeficientes fuera de la diagonal. Este tipo de descomposición permite optimizar la forma en que se aplican algunos algoritmos de solución.

Para resolver el sistema de ecuaciones (Ec. 2.83) se pueden utilizar ya sean métodos directos o iterativos. Los métodos directos resultan más costosos dado que el número de operaciones aritméticas necesario para alcanzar la solución es proporcional a las dimensiones del sistema de ecuaciones, y por lo tanto, al tamaño de la malla, por lo que es convencional preferir los métodos iterativos sobre los directos.

Los métodos iterativos parten de una solución inicial, la cual se corrige a medida que el proceso evoluciona y se detiene una vez se satisface una tolerancia preestablecida [2, 9, 15]. Actualmente la versión de openFoam<sup>TM</sup> distribuida por ESI (*Experts in Virtual Product Engineering to Support Industrial Innovation*) únicamente cuenta con algoritmos de solución del tipo iterativos, mientras que, en la versión extendida se han implementado también métodos del tipo directo. Aquí no se dará una descripción detallada de dichos algoritmos puesto que no hacen parte de los objetivos de este trabajo.

Los algoritmos de solución deben ser seleccionados atendiendo a si la matriz del sistema proveniente de la discretización es simétrica o asimétrica, lo que en general depende de la ecuación que se esté considerando como de la malla que se utilice. Por ejemplo, la ecuación para el cálculo de la presión resultante de la aplicación del algoritmo PISO, luego del proceso de discretización e incluso en mallas no estructuradas, entrega una matriz simétrica. Por su parte las ecuaciones del tipo convección-difusión generan matrices que pueden o no ser simétricas [9]. En la literatura concerniente a métodos iterativos para sistemas lineales dispersos, existen diferentes algoritmos para llevar a cabo el procedimiento de solución [39]. Dentro de la versión de openFoam<sup>TM</sup> aquí utilizada están implementados los siguientes métodos iterativos<sup>15</sup> [12]:

<sup>14</sup>Entiéndase por matriz dispersa, una matriz en la cual la mayoría de sus coeficientes son nulos.

<sup>15</sup>Actualmente en la versión de openFoam 3.1.ext se ha implementado una nueva clase para la manipulación de las matrices que permite la implementación de *solvers* completamente acoplados, esto originó conllevó a la inclusión de nuevos algoritmos de solución para los sistemas algebraicos, sin embargo aquí sólo se mencionaron los *solvers* iterativos, debido a que resultan ser los pertinentes a los fines de la presente tesis

- Método del gradiente conjugado preconditionado (PCG).
- Método del gradiente biconjugado preconditionado (PBiCG).
- Método multimalla (*Generalised geometric-algebraic multi-grid (GAMG)*).
- Algoritmo diagonal.
- *Solvers* con suavizador (*Smooth solver*).

Los métodos preconditionados, hacen uso de un preconditionador con el fin de mejorar la velocidad de convergencia [9]. El método PCG se utiliza para matrices simétricas y el PBiCG para matrices asimétricas, los preconditionadores disponibles son:

- Cholesky incompleto (DIC)
- Cholesky incompleto rápido
- Factorización LU incompleta (DILU)
- GAMG
- Diagonal

Los preconditionadores también deben seleccionarse atendiendo a si la matriz a tratar es simétrica o no, por ejemplo, el preconditionador Cholesky incompleto se utiliza para matrices simétricas y el DILU para asimétricas. En cuanto a los *solvers* con suavizador, los suavizadores disponibles se listan a continuación:

- Gauss-Seidel
- Cholesky incompleto (DIC)
- Cholesky incompleto con Gauss-Seidel (DICgaussSeidel)

Al igual que en el caso de los preconditionadores, también se pueden seleccionar suavizadores que aplican a matrices simétricas, por ejemplo tanto el DIC como el DICgaussSeidel son para matrices simétricas.

Los algoritmos iterativos requieren que la matriz sea diagonalmente dominante, la discretización de la parte lineal de los términos fuentes (Sección.2.4.6) está intrínsecamente relacionada con dicha dominancia diagonal, si  $S_r < 0$  la contribución entra directamente en la diagonal de la matriz del sistema, por lo tanto incrementa su dominancia diagonal, en el caso contrario  $S_r > 0$  la dominancia diagonal se ve disminuida. Por lo tanto, en lo posible resulta conveniente para  $S_r > 0$  incluir la contribución de forma explícita, con lo que el aporte será tenido en cuenta dentro del vector  $R_P$  y no se verá afectada la dominancia diagonal.

Para concluir con lo expuesto en esta sección, resta por decir que la elección apropiada del método de solución iterativo es de suma importancia, esto se debe a que tiene un impacto contundente en el costo computacional ya que el desempeño del mismo dependerá de las características de la matriz que se esté tratando. En la actualidad los métodos iterativos siguen siendo la opción más

adecuada al tratar mallas con gran cantidad de celdas [20]. Dado que no es uno de los objetivos de esta tesis analizar en detalle las características de los distintos métodos de solución implementados en openFoam™, se sugiere consultar las referencias [9, 39, 40] para obtener detalles relacionados con este tópico.

## 2.6. Ecuaciones diferenciales ordinarias rígidas (*stiff ODES*)

Cuando se abordan problemas donde la solución contiene escalas significativamente diferentes para la variable independiente, se dice que se está abordando un problema cuyo modelo matemático está dado por ecuaciones rígidas (*stiffs equations*).

Dada una ecuación diferencial ordinaria de la forma  $y' = f(t, y)$ , se dice que es rígida si su solución exacta  $y(t)$  contiene un término que decae exponencialmente a cero, mientras que la magnitud de su derivada crece mucho más a medida que  $t \rightarrow \infty$  [41]. Formalmente la ecuación  $y' = f(t, y)$  es rígida si al integrarla en el intervalo  $[t_1, t_2]$  con  $y(a) = y_a$ , la función  $f$  tiene una constante de Lipschitz<sup>16</sup>  $C$  mucho más grande respecto de la longitud del intervalo y de una tolerancia preestablecida.

### 2.6.1. Sistemas rígidos en el modelado de las reacciones químicas: *time splitting*

El modelado de las reacciones químicas da origen a sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias rígidas. En general, modelar la cinética química involucra considerar sistemas que contienen grandes cantidades de especies y reacciones, y el tiempo computacional necesario para resolver el problema es función de dicha cantidad. Debido a que algunas especies reaccionan más rápido que otras pueden existir grandes diferencias en las escalas temporales, siendo estas diferencias el origen de la rigidez del sistema.

Teniendo en mente el problema de la rigidez y atendiendo a que se debe abordar un problema químico cinético en un entorno discreto que involucra desde miles hasta millones de celdas, es evidente que se debe contar con técnicas de solución apropiadas en lo que respecta a estabilidad, eficiencia y precisión [42]. Es de hacer notar que el uso de técnicas explícitas convencionales significa la penalización excesiva del paso de tiempo en miras de satisfacer los requisitos de estabilidad [41].

Por otro lado, los métodos implícitos son estables y precisos, pero en la práctica poco utilizados debido a sus excesivos costos computacionales [42]. A pesar de que las técnicas implícitas, teóricamente no restringen el paso de tiempo, se ha observado que usar grandes pasos de tiempo incrementa el amortiguamiento numérico, lo que da lugar a pérdidas en la precisión temporal, por lo que en procesos inestacionarios se prefiere el uso de métodos del tipo paso fraccionado. En la de cada de los 90 algunos autores mostraron cómo utilizar técnicas del tipo paso fraccionado *time splitting o fractional step* en el modelado de problemas que involucran reacciones químicas en el campo de la dinámica de gases [43, 44]. Dichos métodos proponen desacoplar el problema original

<sup>16</sup>Dada una función  $f$  tal que:  $|f(x_1) - f(x_2)| \leq C|x_1 - x_2| \forall \{x_1, x_2\} \in I$ ,  $C$  se conoce como la constante de Lipschitz en  $I$

en dos sub-problemas, de forma tal, que los procesos químico y fluidodinámico se resuelven en diferentes etapas y su interacción se da por medio de términos fuentes.

El enfoque propuesto en esta tesis plantea tratar por separado los diferentes términos (convectivos, difusivos y fuentes). Considerando que los términos asociados con la cinética química requieren métodos con características especiales, resulta práctico aislar el proceso químico del fluidodinámico, así, el problema convección-difusión-reacción se fracciona en dos etapas:

$$\phi_t = f \quad (2.84)$$

$$\phi_t + \mathcal{L}\phi = f(\phi) \quad (2.85)$$

En un primer paso se resuelve la parte que modela al término fuente asociado a la actividad química (Ec. 2.84). Luego, se utiliza esta solución para incorporar sus efectos en la ecuación que contiene el aporte de los demás términos involucrados (representados por el operador  $\mathcal{L}$ ). A continuación se obtiene  $\phi^{n+1}$  a partir de Ec. 2.85.

Si el ejemplo anterior correspondiera a la ecuación de transporte de la especie  $i$  ( $\psi = Y_i$ ), entonces primero se resuelve la ODE asociada a su velocidad de reacción el cual determina al término fuente de su respectiva ecuación de transporte.

### 2.6.2. El método semi-implícito de Bulirsh-Stoer

El método original basado en la regla del punto medio introducido por Bulirsh y Stoer no es aplicable a ecuaciones rígidas (stiffs). No obstante, Bader y Deuffhard derivaron una discretización semi-implícita aplicable a ecuaciones rígidas [45]. El punto de partida es la forma implícita de la regla del punto medio:

$$y^{n+1} - y^{n-1} = 2hf \left( \frac{y^{n+1} + y^{n-1}}{2} \right) \quad (2.86)$$

Para convertir a la última ecuación en la forma semi-implícita se linealiza el lado derecho alrededor de  $f(y^n)$ :

$$\left[ 1 - h \frac{df}{dy} \right] \cdot y^{n+1} = \left[ 1 + h \frac{df}{dy} \right] \cdot y^{n-1} + 2h \left[ f(y^n) - \frac{df}{dy} y^n \right] \quad (2.87)$$

Con fines computacionales, la implementación práctica resulta:  $\Delta_k = y^{n+1} - y^n$  con  $h = H/m$ , así para el primer paso se obtiene:

$$\Delta_0 = \left[ 1 - h \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{y}} \right]^{-1} \cdot h\mathbf{f}(y^0) \quad (2.88a)$$

$$y^1 = y^0 + \Delta_0$$

Entonces para  $n = 1, 2, 3, \dots, m-1$  se consigue:

$$\Delta_n = \Delta_{n-1} + 2 \left[ 1 - h \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{y}} \right]^{-1} \cdot [h\mathbf{f}(y^n) - \Delta_{n-1}] \quad (2.89a)$$

$$y^{n+1} = y^n + \Delta_n$$

De esta forma para el paso de tiempo  $\Delta t = H$  se lleva a cabo una aproximación que se basa en subdividir el intervalo de integración en  $m$  fracciones más chicas de tamaño  $h$ , de forma tal que la solución final es:

$$\Delta_m = \left[ 1 - h \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{y}} \right]^{-1} \cdot [h \mathbf{f}(y^n) - \Delta_{m-1}] \quad (2.90a)$$

$$\bar{y}^m = y_m + \Delta_m$$

El método semi-implícito de Bulirsh-Stoer introducido por Bader y Deuffhard es considerado una excelente rutina para la gran gama de problemas rígidos, no obstante, en algunas ocasiones puede suceder que aparezca una matriz singular, caso que no se corresponde con las aplicaciones consideradas en la presente tesis.

## 2.7. Algoritmo PISO

Por lo general, las ecuaciones que gobiernan la mecánica de fluidos se encuentran acopladas vía distintas variables, por ejemplo, las ecuaciones de Navier-Stokes para flujos a velocidades supersónicas presentan un fuerte acoplamiento entre la presión y la velocidad, por el contrario en la combustión de baja velocidad ( $M < 0.3$ ) el acoplamiento presión-velocidad es débil y los efectos de compresibilidad<sup>17</sup> provienen de fuertes gradientes de temperatura allí presentes. Se recurre entonces al algoritmo de solución PISO (*Pressure Implicit with Splitting of Operators*) el cual es una técnica no iterativa para resolver el acoplamiento presión-velocidad.

En capítulos subsecuentes se introducirán las respectivas ecuaciones de gobierno para los procesos fluidodinámicos considerados en esta tesis, no obstante, para realizar el análisis pertinente a esta sección, se utilizará el sistema de ecuaciones derivado en la Sección.2.4 previo remplazo de  $\psi = [1 \quad \mathbf{U} \quad e]$  en la ecuación de transporte genérica (Ec. 2.2):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U}) = 0 \quad (2.91)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \mathbf{U}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \mathbf{U}) = \rho \mathbf{g} + \nabla \cdot \underline{\underline{\sigma}} \quad (2.92)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho e) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} e) = \rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{U} + \nabla \cdot (\underline{\underline{\sigma}} \cdot \mathbf{U}) - \nabla \cdot \mathbf{q} + \rho Q \quad (2.93)$$

Al abordar la solución de este sistema de ecuaciones, tradicionalmente se cuenta con dos enfoques que dependen de las variables primitivas seleccionadas (entendiéndose por variables primitivas a las que se obtienen directamente al resolver las distintas ecuaciones de transporte involucradas). Dependiendo de si una de las variables primitivas es la densidad o la presión, los métodos

<sup>17</sup>Tradicionalmente el término flujo compresible se aplicó a flujos en los cuales los cambios en densidad estaban asociados a cambios significativos en presión y velocidad, sin embargo, en la literatura se suele emplear el término "flujo compresible a baja velocidad" para designar flujos en los cuales dichos cambios en densidad son producto únicamente de fuertes gradientes de temperatura

clásicos se han denominado métodos **basados en presión** y **basados en densidad** [2, 46]. A su vez, los métodos de solución también pueden ser clasificados en métodos **acoplados** y **segregados**. Los métodos acoplados resuelven el sistema de ecuaciones de forma simultánea, aunque este tipo de metodologías sean costosas computacionalmente y pueden llegar a ser inviables cuando el grado de discretización necesario en la malla es muy alto. Por otro lado están los métodos segregados los cuales resuelven las ecuaciones en forma secuencial. En el caso vectorial componente por componente (p.e, ecuación de momento).

En el sistema de ecuaciones Ec. 2.91-Ec. 2.93, se tiene una ecuación de transporte para la densidad, para cada componente de la velocidad y para la variable energética considerada, sin embargo, la presión no cuenta con una ecuación de transporte independiente, lo cual, en el caso incompresible dificulta su obtención ya que la ecuación de estado deja de ser aplicable y la de la energía desaparece [15, 20]. Existe la forma alternativa aplicable tanto al caso incompresible como compresible, de derivar una ecuación independiente para la presión a partir de las ecuaciones de momento y continuidad. En esta metodología se basan gran variedad de métodos que originalmente fueron desarrollados para tratar las ecuaciones de Navier-Stokes incompresibles, como por ejemplo, el método SIMPLE (*Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations*) introducido por Patankar y Spalding [47], el SIMPLER (SIMPLE *revised*) [16], el SIMPLEC (SIMPLE *consistent*) [48] y el método PISO [49] entre otros.

Todos estos métodos se pueden ver como algoritmos del tipo predicción-corrección, puesto que parten de valores estimados y corrigen la solución a medida que el proceso de cálculo se desarrolla con la finalidad de que ésta satisfaga de forma simultánea a las ecuaciones de momento y continuidad.

Haciendo un breve recuento de lo expuesto hasta el momento, la utilización de un método basado en densidad, evita la necesidad de derivar una ecuación para la presión y tener que desarrollar un método de cálculo que garantice se cumpla la ecuación de continuidad, sin embargo ha sido demostrado que los métodos basados en densidad en el límite inferior de la compresibilidad ( $M < 0.3$ ) fallan dado que la presión tiende a ser independiente de la densidad y por lo tanto la ecuación de estado que relaciona a dichas variables deja de ser aplicable. De aquí, que los métodos basados en presión sean preferidos en régimen incompresible. A su vez estos métodos son susceptibles de ser extendidos al régimen compresible, para lo cual se hace necesario considerar tanto a la ecuación de estado como de la energía, puesto que estas ecuaciones permiten acoplar entre si a la densidad, presión y temperatura [15, 20, 49].

Retomando las ecuaciones de Navier-Stokes (Ec. 2.91-Ec. 2.93), remplazando el tensor de tensiones, asumiendo fluido Newtoniano, utilizando la ley de Fourier para evaluar el flujo de calor por conducción y despreciando la fuerza volumétrica, se puede escribir:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U}) = 0 \quad (2.94)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \mathbf{U}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \mathbf{U}) - \nabla \cdot \left( \mu \left( \nabla \mathbf{U} + (\nabla \mathbf{U})^T \right) \right) = -\nabla \left( p + \frac{2}{3} \mu \nabla \cdot \mathbf{U} \right) \quad (2.95)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho e) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} e) - \nabla \cdot (\lambda \nabla T) = & -\nabla \cdot (p \mathbf{U}) - \nabla \cdot \left( \frac{2}{3} \mu (\nabla \cdot \mathbf{U}) \mathbf{U} \right) \\ & + \nabla \cdot \left( \mu \left( \nabla \mathbf{U} + (\nabla \mathbf{U})^T \right) \cdot \mathbf{U} \right) + \rho \mathbf{Q} \end{aligned} \quad (2.96)$$

Además, considerando el comportamiento de un gas perfecto, la ecuación de estado resulta:

$$p = \rho R T = \rho \psi^{-1} \quad (2.97)$$

donde  $\psi$  es la compresibilidad del gas, dada por:

$$\psi = \frac{1}{RT} \quad (2.98)$$

La ecuación de momento en forma semi-discreta se puede escribir:

$$a_p \mathbf{U}_p^n = \mathbf{H}(\mathbf{U}) - \nabla p \quad (2.99)$$

De donde:

$$\mathbf{U}_p^n = (a_p)^{-1} (\mathbf{H}(\mathbf{U}) - \nabla p) \quad (2.100)$$

Aquí se introduce el operador  $\mathbf{H}(\mathbf{U})$ , dicho operador discreto contiene dos contribuciones, una debida al transporte puro (flujos convectivos y difusivos de momento) y otra proveniente de los términos fuente de la ecuación de momento:

$$\mathbf{H}(\mathbf{U}) = \mathbf{R}_p - \sum a_N \psi_N^n \quad (2.101)$$

A su vez  $\mathbf{R}_p$  contiene la contribución del término inestacionario y cualquier otra que pueda ser tratada como término fuente:

$$\mathbf{R}_p = \mathbf{R}_o + \frac{\mathbf{U}^{n-1}}{\Delta t} \quad (2.102)$$

Atendiendo a que la ecuación de estado puede ser escrita:

$$\rho = p\psi \quad (2.103)$$

la variación temporal de la densidad se puede escribir como:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t}(p\psi) \quad (2.104)$$

El término en la ecuación de continuidad que involucra la divergencia del producto velocidad-densidad puede ser expresado:

$$\nabla \cdot (\rho \mathbf{U}) = \nabla \cdot (\rho (a_p)^{-1} \mathbf{H}(\mathbf{U})) - \nabla \cdot (\rho (a_p)^{-1} \nabla p) \quad (2.105)$$

Ahora escribiendo al primer término del segundo miembro en la Ec. 2.105 en forma de un término convectivo (de acuerdo a lo expuesto en Sección.2.4.3)

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (\rho (a_p)^{-1} \mathbf{H}(\mathbf{U})) &= \nabla \cdot (\psi p (a_p)^{-1} \mathbf{H}(\mathbf{U})) \\ &= \nabla \cdot (F_p p) \end{aligned} \quad (2.106)$$

donde  $F_p$  es el flujo convectivo que tiene en cuenta los efectos de la presión, al cual se le denominará en este trabajo como **flujo convectivo de presión**, y está dado por:

$$F_p = \psi (a_p)^{-1} \mathbf{H}(\mathbf{U}) \quad (2.107)$$

Utilizando desde la Ec. 2.104 a la Ec. 2.107 en la ecuación de continuidad (Ec. 2.94) se logra obtener una ecuación independiente para la presión:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\psi p) + \nabla \cdot (F_p p) - \nabla \cdot (\rho (a_p)^{-1} \nabla p) = 0 \quad (2.108)$$

Nótese que utilizando el esquema centrado, es decir asumiendo una variación lineal los coeficientes  $a_p$  y  $a_N$  están dados por: (Ec. 2.25):

$$a_p = \frac{\sum_f f_x \mathbf{S}_f}{V_p}$$

$$a_N = \frac{1 - f_x}{V_p} \mathbf{S}_f$$

$$f_x = \frac{\overline{fN}}{\overline{PN}}$$

Como se puede observar, la Ec. 2.108 posee el formato de la ecuación genérica (Ec. 2.2), sin embargo en este caso el flujo convectivo de presión, no resulta ser un flujo en el sentido descrito por la ecuación de transporte genérica, es decir que no es un flujo de volumen/masa. No obstante, la Ec. 2.108 puede ser discretizada empleando las técnicas descritas anteriormente para los términos convectivos, difusivos y temporales. Cabe notar que en el límite de la compresibilidad la ecuación para la presión presentada aquí se reduce a su forma incompresible, lo cual en principio permitiría aplicarla tanto en régimen compresible como incompresible [8, 46].

Una vez definida la ecuación para la presión y su discretización, a continuación se presentan los pasos a seguir para la aplicación del algoritmo PISO [15, 20, 49].

1. Se usa el campo de presión disponible  $p^*$  del paso anterior de corrección o temporal para determinar los flujos.
2. Se resuelve la ecuación discreta de momento en forma implícita utilizando las presiones disponibles, esto entrega  $\mathbf{U}^*$ . Este paso se conoce como **predicador del momento**.
3. Se calcula la nueva presión  $p^{**}$  por medio de la Ec. 2.108 empleando el campo de velocidad obtenido en el paso 2. Este paso se conoce como **corrector de la presión**.
4. Se determina la densidad utilizando la ecuación de estado  $\rho = \psi p^{**}$  (aquí también puede ser usada la ecuación de continuidad).
5. Se corrige la velocidad utilizando la ecuación discreta de momento, donde para determinar los flujos se utiliza el campo de presión corregido en el paso 4, aquí se obtiene  $\mathbf{U}^{**}$ .
6. La ecuación de energía se escribe en forma implícita:

$$\left( \frac{1}{\Delta t} - \frac{B_0}{\rho^*} \right) \rho^* e^* = G'(e^*) - \Delta(p^* \mathbf{U}^{**}) + J(\mathbf{U}^*) + Q + \frac{\rho^n e^n}{\Delta t} \quad (2.109)$$

Aquí  $G'(e) = \{[B] - \text{tr}[B]e\}$  representa los flujos convectivos y difusivos de energía sin considerar la contribución de los elementos centrales de la matriz  $B$ . El operador discreto  $J(\mathbf{U}^*)$  corresponde a la versión discreta de los términos de calor y trabajo, y  $\Delta$  al operador divergencia discreto. En este paso se obtiene  $e^*$  y en consecuencia  $T^*$  puede ser evaluada desde  $e^*$  y  $\mathbf{U}^{**}$ .

7. Si el criterio de convergencia no se satisface se regresa al paso 3 y se aplica un nuevo paso de corrección de presión.

8. Se inicia de nuevo el proceso para un nuevo paso de tiempo.

Es importante notar que la ecuación para la presión se desarrolló utilizando las ecuaciones de momento y continuidad discretas, dado que hacerlo directamente desde sus formas diferenciales, no garantizaría que sus términos fueran discretizados de forma consistente con la discretización de los términos correspondientes en las ecuaciones utilizadas para derivarla [49]. En consecuencia, la presión que se obtiene y las subsecuentes velocidades, no satisfacen de forma simultánea a las

ecuaciones de conservación de la masa y momento. Con la metodología aquí adoptada se garantiza automáticamente que la ecuación de presión estará discretizada en forma consistente con la de las ecuaciones de las que proviene [49]. En la Fig. 2.12 se muestra el diagrama de flujo que representa el procedimiento que sigue el algoritmo PISO.

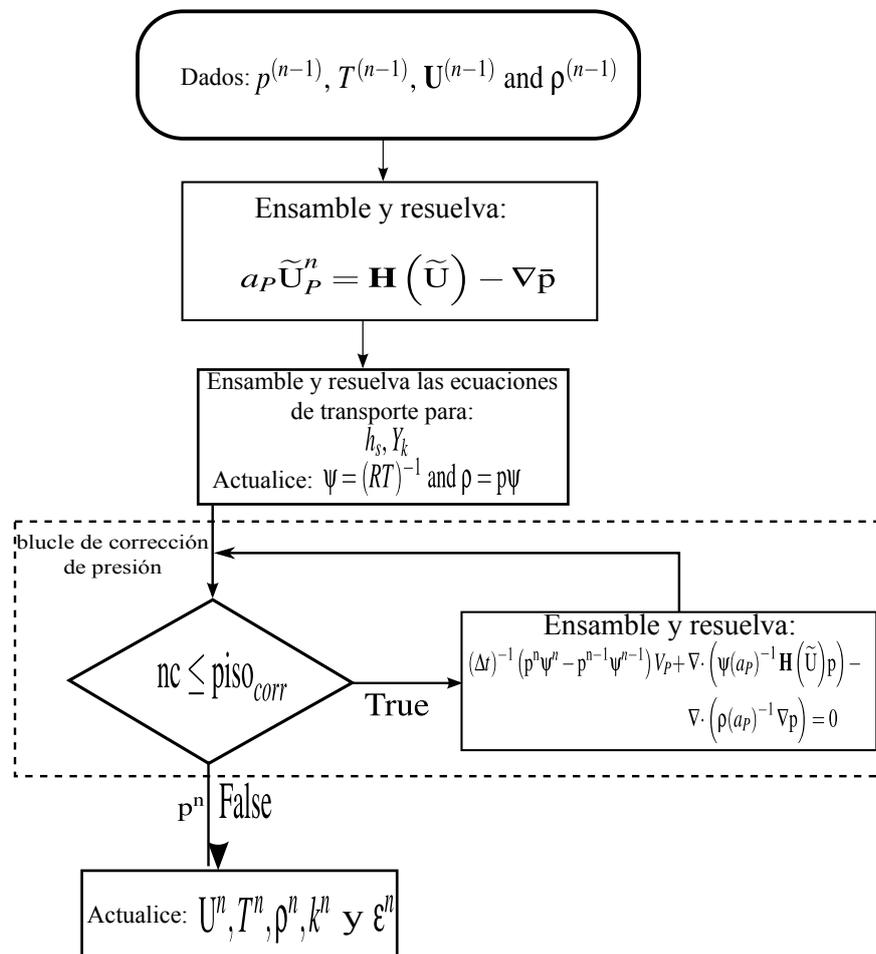


Fig. 2.12: Diagrama de flujo algoritmo piso flujo compresible

Por último es importante mencionar que la precisión del algoritmo PISO es de segundo orden para el esquema de dos etapas consecutivas y de tercer orden para el caso de tres etapas [49]. Cabe notar que aquí se introdujo el método PISO de dos etapas, en el cual se utiliza un único paso de predicción para la energía sin ninguna corrección, no obstante, existe la posibilidad de utilizar hasta 4 etapas de predicción-corrección en el acoplamiento presión-velocidad, las cuales involucran considerar un paso de corrección para la energía. Una descripción más detallada de la base teórica de este esquema se lleva a cabo en el Cap. 4 [15, 49].

### 2.7.1. El problema del tablero de ajedrez: La interpolación de Rhie-Chow

El problema del tablero de ajedrez (*checkerboard problem*) como es conocido popularmente, se refiere a la distribución de presión obtenida al emplear el esquema de interpolación centrado junto con un arreglo de malla colocado.

Considérese la distribución de presiones unidimensional mostrada en la Fig. 2.13, aplicando el

esquema centrado, el gradiente de presión en  $P$  resulta:

$$(\nabla p)_P = \frac{p_E - p_W}{2\Delta x} \quad (2.110)$$

Centrando la atención en la ecuación para la presión derivada en la sección anterior (Ec. 2.108), la evaluación del tercer término el cual involucra la divergencia, requiere que el gradiente de presión sea interpolado a las caras de las celdas a partir de los puntos vecinos. Ahora, si se considera una celda adyacente, se requieren los puntos contiguos, donde uno de estos puntos comparte información en ambas interpolaciones, y dado que dependiendo de la celda considerada el vector de superficie estará orientado en sentido opuesto, esto generará que se cancelen los coeficientes asociados a los puntos interpolados. Por ende, en la molécula computacional para evaluar el laplaciano no se dispone de los puntos inmediatamente adyacentes al nodo considerado, esto da origen a que aparezca la distribución de presión tipo tablero de ajedrez, y deja expuesto que la causa de la misma está asociada directamente a los puntos seleccionados para almacenar los valores de la presión y al esquema centrado utilizado para su interpolación. Para solucionar este problema exis-

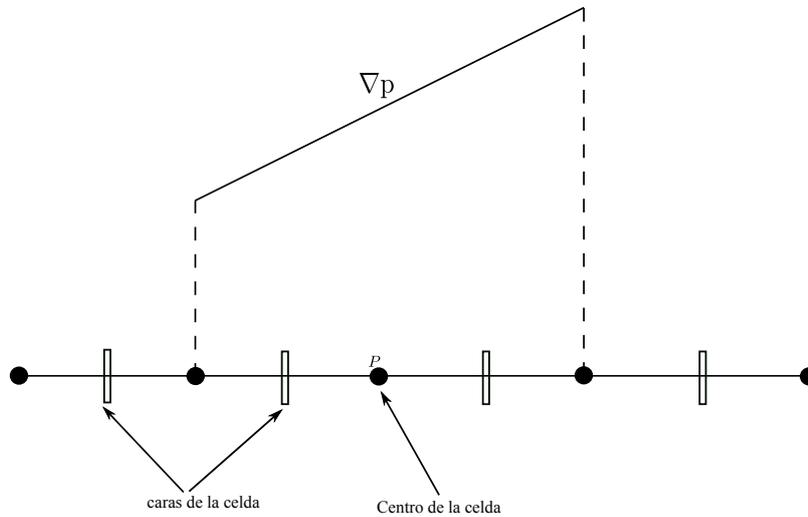


Fig. 2.13: Gradiente de presión unidimensional.

ten distintas posibilidades, una de ellas es utilizar mallas escalonadas, en las cuales se almacena la velocidad y la presión en distintos puntos [1], y otro enfoque en el cual se utilizan procedimientos especiales de interpolación. Dentro de openFoam™ se utiliza el último enfoque materializado en la interpolación propuesta por Rhie y Chow, con el cual la interpolación resulta [1, 20, 50]:

$$\mathbf{U}_f = f_x \mathbf{U}_P + (1 - f_x) \mathbf{U}_N + (a_p)_f^{-1} \mathbf{n} \left[ \mathbf{n} \cdot (\nabla p)_f^{CE} - \frac{p_N - p_P}{|\mathbf{d}|} \right] \quad (2.111)$$

donde  $(a_p)_f$  corresponde al valor del coeficiente de la diagonal de la ecuación de momento interpolado en la cara y  $\mathbf{n}$  es el vector unitario normal a la dirección de  $\mathbf{d}$ . En la expresión entre paréntesis de la Ec. 2.111 se puede ver que aparecen dos formas distintas de evaluar el gradiente, primero una en la que se utiliza el esquema centrado para interpolar:

$$(\nabla p)_f^{CE} = f_x (\nabla p)_P + (1 - f_x) (\nabla p)_N \quad (2.112)$$

la segunda, que corresponde a la evaluación del gradiente normal a la cara (ésta se puede ver como un término de corrección):

$$\mathbf{n} \cdot (\nabla p)_f = \frac{p_N - p_P}{|\mathbf{d}|} \quad (2.113)$$

Este último término es introducido con la finalidad de remover el problema asociado a la falta de los puntos de interpolación inmediatamente adyacentes al punto en consideración, y de esta forma darle soporte compacto a la interpolación de la presión [20].

## 2.8. Condiciones de borde e iniciales

Cuando se elige un volumen de control, se está seleccionando un conjunto finito de puntos del continuo, el cual debe estar delimitado de alguna forma. El rol que cumplen las condiciones de borde es imponer dichos límites, es decir, aíslan al sistema bajo consideración del ambiente externo aplicando condiciones apropiadas a las variables sobre dicho contorno. La ubicación y el tipo de condiciones de borde dependen del conocimiento que se tenga respecto a las condiciones físicas del flujo y su influencia en la solución.

Las condiciones de borde se pueden dividir en **numéricas y físicas**. Las condiciones de borde numéricas a su vez se pueden clasificar en **esenciales** o del tipo **Dirichlet** y **naturales** o del tipo **Neumann**. Las del tipo Dirichlet se refieren a la condición en la cual se establece el valor de la variable como un valor conocido o fijo en la frontera:

$$\psi|_{\delta\Omega} = \psi(\mathbf{x}) \quad \forall \mathbf{x} \in \delta\Omega \quad (2.114)$$

En contraste, las del tipo Neumann, se definen como condiciones en las cuales se fija el gradiente de la variable en el contorno:

$$\nabla\psi \cdot \mathbf{n}|_{\delta\Omega} = \psi(\mathbf{x}) \quad \forall \mathbf{x} \in \delta\Omega \quad (2.115)$$

Esta última de condición de borde se conoce también como condición de flujo, puesto que corresponde a imponer el flujo de la variable en el contorno. Con respecto a la evaluación de los flujos convectivos y difusivos, cabe señalar que, los flujos convectivos requieren el valor de la variable  $\psi$  y los flujos difusivos el gradiente de la misma  $\nabla\psi$ , en consecuencia, se deben tener en cuenta las siguientes consideraciones para cada una de las condiciones de borde descritas. En un contorno en el que se ha impuesto una condición del tipo Dirichlet se conoce  $\psi$ , lo cual permite la evaluación directa de los flujos convectivos, por el contrario, en el caso de los flujos difusivos se requiere  $\nabla\psi$ , donde dicho gradiente puede ser evaluado de la siguiente forma[37]:

$$(\mathbf{S} \cdot \nabla\psi)_{\delta\Omega} = \frac{|\mathbf{S}_f|}{|\mathbf{d}_n|} (\psi_{\delta\Omega} - \psi_P - \mathbf{k} \cdot (\nabla\psi)_P) \quad (2.116)$$

donde  $\mathbf{k}$  es el vector que mide la no-ortogonalidad y  $\mathbf{d}_n$  es el vector normal a la cara desde el centroide de la celda (Fig. 2.14).

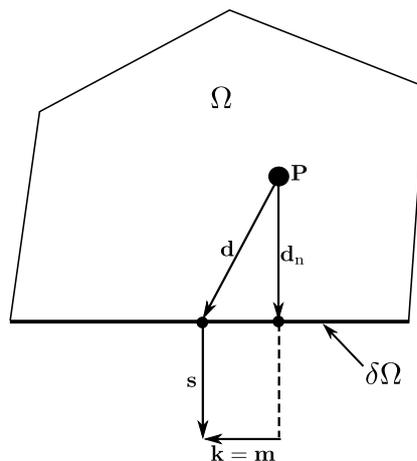


Fig. 2.14: Celda en el contorno.

Para las condiciones de borde del tipo Neumann, se conoce el valor del gradiente  $\nabla\psi$ , y para evaluar  $\psi$  se puede utilizar la siguiente extrapolación [8]:

$$\psi_{\delta\Omega} = \psi_P + |\mathbf{d}_n| \left( \frac{|\mathbf{S}_f|}{|\mathbf{S}_f|} \nabla\psi \right)_{\delta\Omega} + \mathbf{m} \cdot (\nabla\psi)_{\delta\Omega} \quad (2.117)$$

Donde  $\mathbf{m}$  es el vector que mide la oblicuidad de la celda (ver Fig. 2.14). El método descrito para evaluar  $\nabla\psi$  resulta ser de primer orden, de aquí que en general es preferible utilizar mallas lo más ortogonales posibles. Si para evaluar  $\psi$  se utiliza su expansión en serie de Taylor la precisión del método resulta ser de segundo orden [37].

Es muy importante tener en cuenta que la correcta imposición de las condiciones de borde impacta de manera trascendental a la solución que se desea obtener, esto quiere decir, que una condición de borde impuesta de forma incorrecta ocasionará que los resultados no describan de forma adecuada el fenómeno físico que se desea simular e incluso puede llegar a causar inestabilidades numéricas [8].

Dentro de openFoam™ se incluye una amplia gama de condiciones de borde, cada una de ellas diseñada para tratar distintos tipos de problemas. Esto brinda gran versatilidad al momento de seleccionar la más adecuada para el caso que se desea abordar. También cabe mencionar que de no contarse con la condición adecuada, la misma puede implementarse. A continuación se incluye una breve descripción de las condiciones de borde que para los fines de este trabajo fueron consideradas relevantes [1, 3, 20, 33, 51, 52]:

#### ■ Entradas (*inlets*)

- Flujo compresible subsónico ( $0.3 \leq M_\infty \leq 0.8$ ): Se impone la temperatura, la velocidad del flujo y por consistencia gradiente nulo de presión.
- Flujos supersónicos: Se deben imponer condiciones sobre todas las variables que están involucradas en la simulación  $p, \mathbf{U}, T$ .

#### ■ Salidas (*outlets*)

- Flujo compresible subsónico  
Este tipo de condición de borde se debe imponer de forma tal que se satisfaga el balance global de masa en el volumen de control, para lo cual existen dos formas [8]:
  - Se proyecta la distribución de velocidad hacia el interior del dominio, dichas velocidades se escalan de forma que satisfagan el balance de masa y por consistencia se impone gradiente nulo para la presión.
  - Se impone la presión en el contorno y a la velocidad se le impone gradiente nulo. Aquí la conservación de masa se ve garantizada por medio de la ecuación para la presión (Ec. 2.108).
- Flujos supersónicos: La condición impuesta no debe permitir ninguna reflexión (ver **Condiciones de campo lejano**).

#### ■ Paredes (*walls*)

La imposición de las condiciones de borde en un contorno donde existe una pared dependen del tipo de flujo, si éste es **inviscido**, la condición de pared se reduce a la de **deslizamiento** (*slip condition*), en la cual la componente normal de la velocidad es nula y la componente tangencial toma el valor que le corresponda. En el caso viscoso, se impone la velocidad del contorno, es decir que si la pared es estática se impondrá velocidad nula, de lo contrario debe imponerse la velocidad de desplazamiento de la pared.

#### ■ Condiciones de simetría y periódicas

A continuación se describen algunas de las condiciones que tienen en cuenta algún tipo de simetría o periodicidad en el problema a resolver:

- **Plano de simetría (*symmetry plane*)**

Esta condición implica que la componente normal de la variable dicho plano debe ser nula. Las componentes paralelas al contorno deben ser proyectadas desde el interior del dominio hacia las caras que coinciden con el contorno.

- **Condición de borde cíclica**

Existen algunos patrones de flujo que describen un comportamiento periódico de una o múltiples coordenadas, en estos casos es suficiente con modelar la porción del problema que presenta un comportamiento periódico. Este tipo de condición de borde permite considerar dos contornos que no se encuentran físicamente conectados como si lo estuvieran.

- **Condición de borde tipo cuña (*wedge*)**

Es una condición de borde implementada dentro de openFoam™ que permite simular problemas con simetría axial mediante una porción del dominio. Por ejemplo, en el caso del flujo sobre un cuerpo como a ángulo de ataque nulo, es posible modelar el problema como una sección tipo cuña especificando la condición *wedge* sobre los contornos laterales de la cuña.

- **Condiciones de campo lejano (*far field conditions*)**

Son condiciones de borde que pretenden simular el comportamiento de una frontera que delimita al volumen de control de la corriente libre, lo cual implica tener en cuenta diferentes condiciones que recaen en la naturaleza de las ecuaciones que gobiernan al tipo de flujo considerado. Esto resulta de particular importancia en la simulación de flujos compresibles supersónicos descritos por un sistema de ecuaciones en derivadas parciales de tipo hiperbólico. Debido a dicha naturaleza hiperbólica, las condiciones de borde que interactúan con la corriente libre no deben admitir ningún tipo de reflexión.

El sistema de ecuaciones de Navier-Stokes en el caso compresible, presenta tres características  $U + a$ ,  $U - a$  y  $U$ , que pueden ser obtenidas resolviendo un problema de autovalores de la matriz Jacobiana del sistema. Supóngase que ( $U > a$ ), en este caso todas las ondas viajan en la misma dirección, mientras que en el caso subsónico donde ( $U < a$ ) dos viajan en la dirección del flujo y la otra ( $U - a$ ) en la dirección contraria, por lo tanto, es un requerimiento esencial que la imposición de las condiciones de borde sea consistente con la propagación de dichas ondas. Esto quiere decir, que si las ondas inciden en el dominio computacional, su región de dependencia se encuentra fuera del mismo, lo que implica que la información de la que dependen no se encuentra disponible. Esto origina la necesidad de especificar la información transportada por dichas ondas desde contornos del dominio donde se supone una entrada de flujo (*inlets*).

Por otro lado, para las ondas que viajan hacia afuera del dominio la región de dependencia corresponde a dicho dominio, lo que quiere decir que no es necesario imponer ningún tipo de condición sobre las variables de interés en dichos contornos (*outlets*). Puesto que en el caso supersónico todas las ondas viajan en la misma dirección, no debe existir ningún tipo de reflexión sobre el contorno de salida, y por lo tanto no se admite ningún tipo de condición sobre las variables. Por esta razón se implementan condiciones de borde del tipo absorbente que permiten la propagación de dichas ondas hacia el flujo libre o campo lejano. Este tipo de condiciones se basan en la dirección de propagación de las ondas y son ampliamente utilizadas en la simulación de flujos a alta velocidad [52, 53]. En openFoam™ se encuentran implementadas las siguientes condiciones de borde que aplican dicho tipo de análisis:

- **Transmisión de ondas (*Wave Transmissive*)**

Esta condición de borde crea una tendencia en el campo al que se aplica hacia el valor impuesto en el campo lejano, mientras que el campo instantáneo toma un valor consistente con la característica saliente.

- **Flujo libre supersónico**

Transmite las ondas de choque oblicuas a los alrededores. Cabe notar que esta condición presenta problemas cuando las ondas de choque se aproximan a ondas casi normales al contorno [5].

- **Condición vacía (*empty*)**

Esta condición de borde propia de openFoam™, fue diseñada especialmente para ser impuesta a un contorno de forma tal que en la dirección del mismo no se determine la solución de ninguna de las variables involucradas. Esto quiere decir, que por medio de la aplicación de esta condición se puede simular un problema unidimensional o bidimensional, aunque la malla esté definida de forma tridimensional.

En lo que respecta a las condiciones de borde a imponer a las variables asociadas con los modelos de turbulencia, en la entrada del flujo se debe fijar el valor de las mismas. A la salida se impone gradiente nulo y sobre las paredes el tratamiento depende del modelo considerado y de si es aplicable o no una ley de pared [8].

Cabe hacer notar que en el caso de un *outlet* en el cual se espera flujo completamente supersónico, bastará con imponer condición de gradiente nulo en vista de que todas las ondas viajan en la dirección de salida; por el contrario si en la salida existiese una mezcla de flujo supersónico y subsónico, se hará necesario imponer condiciones del tipo *wave transmissive* a fin de garantizar la no reflexión de ondas sobre dicho contorno.

Finalmente las condiciones iniciales aparecerán o no dependiendo de si el problema considerado es inestacionario o no. En este trabajo se consideran las ecuaciones de transporte reteniendo sus términos temporales, aunque no se estudian las soluciones transitorias, se requiere de condiciones iniciales para cada uno de los campos involucrados. Las condiciones iniciales responden a la situación física de las variables al momento en que se inicia la simulación, en ocasiones es práctica usual el utilizar métodos de bajo orden (flujo potencial) para determinar los campos que serán utilizados luego como condiciones iniciales [2].

## Referencias capítulo 2

- [1] **H. Versteeg** y **W. Malalasekera**, An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method, Pearson Education Limited, 2007.
- [2] **J. Blazek**, Computational fluid dynamics: principles and applications, Elsevier Science, 3rd ed., 2015.
- [3] **C. Hirsch**, Numerical Computation of Internal and External Flows, vol. 1, Elsevier Ltd, 2007.
- [4] **H. Rusche**, *Computational fluid dynamics of dispersed two-phase flows at high phase fractions*, *Direct*, (December), 2002.
- [5] **OpenFOAM**, 2015, URL [www.openfoam.com](http://www.openfoam.com), source Code.

- [6] **R. Pletcher, J. Tannehill y D. Anderson**, Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer, Third Edition, Series in Computational and Physical Processes in Mechanics and Thermal Sciences, CRC Press, 2012.
- [7] **J. Wendt**, Computational Fluid Dynamics: An Introduction, A von Karman Institute book, Springer Berlin Heidelberg, 2010.
- [8] **H. Jasak**, Error Analysis and Estimation for the Finite Volume Method with Applications to Fluid Flows, Ph.D. thesis, Imperial College of Science, Technology and Medicine, 1996.
- [9] **J. Ferziger y M. Perić**, Computational methods for fluid dynamics, Springer Berlin etc, 3rd ed., 2002.
- [10] OpenFOAM - The Open Source CFD Toolbox - Programmer's Guide, OpenCFD Ltd, 2014.
- [11] **F. P. Kärrholm**, Numerical Modelling of Diesel Spray Injection, Turbulence Interaction and Combustion, Ph.D. thesis, Chalmers University of Technology, 2008.
- [12] OpenFOAM - The Open Source CFD Toolbox - User's Guide, OpenCFD Ltd, 2015.
- [13] **W. Oberkampf, M. Sindir y A. Conlisk**, *Guide for the verification and validation of computational fluid dynamics simulations*, Am. Institute of Aeronautics and Astronautics, 1998.
- [14] **J. Strikwerda**, Finite difference schemes and partial differential equations, Society for Industrial Mathematics, 2004.
- [15] **T. J. Chung**, Computational Fluid Dynamics, Cambridge University Press, 2nd ed., 2010.
- [16] **S. Patankar**, Numerical heat transfer and fluid flow, Hemisphere Pub, 1980.
- [17] **P. R., A. D. A. y T. J. C.**, Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer, Third Edition, Series in Computational and Physical Processes in Mechanics and Thermal Sciences, Taylor & Francis, 1997.
- [18] **P. Wesseling**, Principles of computational fluid dynamics, vol. 29, Springer Verlag, 2010.
- [19] **H. Weller, G. Tabor, H. Jasak y C. Fureby**, *A tensorial approach to computational continuum mechanics using object orientated techniques*, *Comp. in Phys.*, vol. 12(6):pp. 620–630, 1998.
- [20] **H. Jasak**, *Numerical solution algorithms for compressible flows*, Lecture Notes, 2007, faculty of Mechanical Engineering and Naval Architecture, University of Zagreb, Croatia.
- [21] **T. Barth y D. Jespersen**, *The design and application of upwind schemes on unstructured meshes*, in 27th aerospace sciences meeting, vol. 89, 1989.
- [22] **D. B. Spalding**, *A novel finite-difference formulation for different expressions involving both first and second derivatives*, *Int. J. Numer. Meth. Engng.*, vol. 4:pp. 551 – 559, 1972.
- [23] **M. Darwish y F. Moukalled**, *Tvd schemes for unstructured grids*, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 46(4):pp. 599–611, 2003.
- [24] **A. Harten**, *High resolution schemes for hyperbolic conservation laws*, *Journal of computational physics*, vol. 49(3):pp. 357–393, 1983.
- [25] **P. Sweby**, *High resolution schemes using flux limiters for hyperbolic conservation laws*, *SIAM journal on numerical analysis*, pp. 995–1011, 1984.

- [26] **C. B. Laney**, *Computational gasdynamics*, Cambridge University Press, 1998.
- [27] **B. Van Leer**, *Towards the ultimate conservative difference scheme. ii. monotonicity and conservation combined in a second-order scheme*, *Journal of Computational Physics*, vol. 14(4):pp. 361–370, 1974.
- [28] **G. Van Albada**, **B. Van Leer** y **W. Roberts Jr**, *A comparative study of computational methods in cosmic gas dynamics*, *Astronomy and Astrophysics*, vol. 108:pp. 76–84, 1982.
- [29] **P. Roe**, *Characteristic-based schemes for the euler equations*, *Annual review of fluid mechanics*, vol. 18(1):pp. 337–365, 1986.
- [30] **M. Darwish**, *A new high-resolution scheme based on the normalized variable formulation*, *Numerical Heat Transfer, Part B Fundamentals*, vol. 24(3):pp. 353–371, 1993.
- [31] **M. Darwish** y **F. Moukalled**, *Normalized variable and space formulation methodology for high-resolution schemes*, *Numerical Heat Transfer*, vol. 26(1):pp. 79–96, 1994.
- [32] **E. Oran** y **J. Boris**, *Numerical Simulation of Reactive Flow*, Cambridge University Press, 2nd ed., 2001.
- [33] **H. Jasak**, *Finite volume discretisation with polyhedral cell support*, 2009.
- [34] **K. Michalak** y **C. Gooch**, *Differentiability of slope limiters on unstructured grids*, in Proceedings of Fourteenth Annual Conference of the Computational Fluid Dynamics Society of Canada, 2006.
- [35] **V. Venkatakrishnan**, *On the accuracy of limiters and convergence to steady state solutions*, AIAA, 1993.
- [36] **K. Michalak** y **C. Ollivier-Gooch**, *Limiters for unstructured higher-order accurate solutions of the euler equations*, in Proceedings of the AIAA forty-sixth aerospace sciences meeting, 2008.
- [37] **F. Juretic**, *Error Analysis in Finite Volume CFD*, Ph.D. thesis, Imperial College of Science, Technology and Medicine, 2004.
- [38] **E. F. Toro**, *Riemann solvers and numerical methods for fluid dynamics: a practical introduction*, Springer Science & Business Media, 2009.
- [39] **Y. Saad** y **Y. Saad**, *Iterative methods for sparse linear systems*, vol. 20, PWS publishing company Boston, 1996.
- [40] **T. Behrens**, *Openfoam's basic solvers for linear systems of equations*, Tech. rep., Technical University of Denmark, 2009.
- [41] **G. Hairer** y **G. Wanner**, *Solving Ordinary Differential Equations II*, Springer, 2010.
- [42] **E. Edith**, *Numerical and approximative methods in some mathematical models*, Tech. rep., 2006.
- [43] **L. Clifford**, **A. Milne** y **B. Murray**, *Numerical modeling of chemistry and gas dynamics during shock-induced ethylene combustion*, *Combustion and flame*, vol. 104(3):pp. 311–327, 1996.

- [44] **R. P. Fedkiw, B. Merriman y S. Osher**, *High accuracy numerical methods for thermally perfect gas flows with chemistry*, *Journal of Computational Physics*, vol. 132(2):pp. 175–190, 1997.
- [45] **G. Bader y P. Deuffhard**, *A semi-implicit mid-point rule for stiff systems of ordinary differential equations*, *Number. Math*, vol. 41:pp. 373–398, 1983.
- [46] **M. Storti y N. Nigro**, *Cfd presenta compresible+ incompresible un matrimonio por conveniencia*, 1997.
- [47] **S. Patankar y D. Spalding**, *A calculation procedure for heat, mass and momentum transfer in three-dimensional parabolic flows*, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 15(10):pp. 1787–1806, 1972.
- [48] **J. Van Doormaal y G. Raithby**, *Enhancements of the simple method for predicting incompressible fluid flows*, *Numerical heat transfer*, vol. 7(2):pp. 147–163, 1984.
- [49] **R. Issa**, *Solution of the implicitly discretised fluid flow equations by operator-splitting*, *Journal of Computational Physics*, vol. 62(1):pp. 40 – 65, 1986.
- [50] **W. Chow y C. Rhie**, *Numerical study of the turbulent flow past an airfoil with trailing edge separation*, *AIAA journal*, vol. 21(11), 1983.
- [51] **T. Poinsot y D. Veynante**, *Theoretical and Numerical Combustion*, R. T. Edwards, Inc., 2nd ed., 2005.
- [52] **T. Poinsot y S. Lelef**, *Boundary conditions for direct simulations of compressible viscous flows*, *Journal of computational physics*, vol. 101(1):pp. 104–129, 1992.
- [53] **H. Kreiss**, *Initial boundary value problems for hyperbolic systems*, *Communications on Pure and Applied Mathematics*, vol. 23(3):pp. 277–298, 1970.



# Capítulo 3

## Combustión difusiva turbulenta

### Nomenclatura

#### Abreviaturas

CFL	Condición de Courant–Friedrichs–Lewy
EDPs	Ecuaciones en derivadas parciales
fV	fixed Value
<i>ODEs</i>	<i>Ordinary differential equations</i>
PISO	<i>Pressure implicit with splitting of operators</i>
PSR	<i>Perfectly stirred reactor</i>
PaSR	<i>Partially stirred reactor</i>
RANS	<i>Reynolds–averaged Navier–Stokes</i>
SIBS	<i>Semi implicit method of bulirsh and stoer</i>
zG	Gradiente Nulo

#### Alfabeto latino

$A$	Factor pre-exponencial
$A_s$	Constante de Sutherland
$a_{ij}$	Coefficientes matriz de discretización
$a_{ki}$	Coefficientes de ajuste polinomios tablas JANAF
$C$	Concentración
$C_{\text{mix}}$	Coefficiente de mezcla
$C_p$	Calor específico a presión constante
$Co$	Número de Courant
$C_v$	Calor específico a volumen constante
$\underline{\underline{D}}$	Tensor de deformaciones
$\overline{D}_k$	Coefficiente de difusión de la especie $k$
$D$	Coefficiente de difusión
$d_i$	Diámetro de ingreso del combustible
$d_p$	Diámetro del piloto
$E_a$	Energía de activación
$f_{k,j}$	Fuerza volumétrica $j$ sobre la especie $k$
$g$	Aceleración de la gravedad
$GRR$	Velocidad de reacción global

$H$	Entalpía total
$h_s$	Entalpía sensible
$I_t$	Intensidad de la turbulencia
$\mathbf{k}$	Vector que mide la no-ortogonalidad
$k$	Energía cinética turbulenta
$k_A$	Coefficiente de Arrhenius
$k_i^b$	Constante de reacción de retroceso
$k_i^f$	Constante de reacción de avance
$L_t$	Longitud característica
$l$	Dimensión lateral de la sección transversal del túnel
$n$	Exponente de la temperatura
$Pr$	Número de Prandtl
$Pr_t$	Número de Prandtl turbulento
$p$	Presión
$p^*$	Presión de inicio algoritmo PISO
$\mathbf{Q}$	Vector que representa otras fuentes externas de calor
$\mathbf{q}$	Vector que representa al flujo de calor por conducción (difusión)
$R$	Constante particular del gas
$R_u$	Constante universal de los gases.
$Sc_k$	Número de Schmidt de la especie $k$
$Sc_t$	Número de Schmidt turbulento
$T$	Temperatura
$T_0$	Temperatura de referencia
$T_A$	Temperatura de activación
$T_c$	Temperatura de empalme tablas JANAF
$T_H$	Temperatura límite superior tablas JANAF
$T_L$	Temperatura límite inferior tablas JANAF
$T_s$	Temperatura de Sutherland
$t$	Tiempo
$\mathbf{U}$	Velocidad de transporte
$V_p$	Volumen de la celda
$\mathbf{V}_k$	Velocidad de difusión de la especie $k$ .
$W$	Peso molecular
$W_k$	Peso molecular de la especie $k$
$\bar{W}$	Peso molecular medio
$X_k$	Fracción molar de la especie $k$
$Y_k$	Fracción de masa de la especie $k$

### Alfabeto griego

$\alpha$	Difusividad térmica
$\alpha_t$	Difusividad térmica turbulenta
$\alpha_{\text{eff}}$	Difusividad térmica efectiva
$\Delta h_{f,k}^\circ$	Entalpía de formación o química de la especie $k$
$\Delta t$	Paso de tiempo fluidodinámico
$\Delta \tau$	Paso de tiempo químico
$\delta$	Factor de estiramiento
$\varepsilon$	Disipación de la energía cinética turbulenta
$\kappa$	Volumen reactivo de la celda
$\lambda$	Conductividad térmica

$\bar{\lambda}$	Conductividad térmica media de la mezcla
$\mu$	Viscosidad molecular
$\mu_{\text{eff}}$	Viscosidad efectiva
$\mu_t$	Viscosidad turbulenta
$\nu'_{ji}$	Coefficientes estequiométricos de los reactantes
$\nu''_{ji}$	Coefficientes estequiométricos de los productos
$\rho$	Densidad
$\rho_k$	Concentración másica de la especie k
$\underline{\underline{\sigma}}$	Tensor de tensiones
$\tau_c$	Tiempo químico
$\tau_{\text{mix}}$	Tiempo de mezcla
$\tau_{\text{res}}$	Tiempo de residencia
$\tau^t$	Tensiones de Reynolds
$\underline{\underline{\tau}}$	Tensor de tensiones viscosas.
$\phi$	Relación de equivalencia.
$\psi$	Compresibilidad
$\Psi$	Cantidad genérica
$\dot{\omega}_k$	Velocidad de reacción de la especie k
$\dot{\omega}_T$	Calor liberado por la combustión

### Superíndices

*	Paso de predicción algoritmo PISO
**	Paso de corrección algoritmo PISO
$m$	Base molar
°	Condiciones estándar
-	Promedio de Reynolds
"	Fluctuación
$\sim$	Promedio de Favre
T	Transpuesta

### Subíndices

$N$	Número de especies
k	Propiedad de la especie k

### Operadores

[ ]	Concentración
:	Doble contracción
$\text{dev}(), ()^{\text{dev}}$	Parte desviadora
$\mathbf{H}(\mathbf{U})$	Operador discreto que representa las contribuciones debidas al transporte puro y a los términos fuentes de la ecuaciones de momento
Tr	Traza.

## Introducción

Un proceso de combustión difusiva, laminar o turbulenta, se produce cuando el combustible y el oxidante ingresan a la zona de reacción de manera separada. En este capítulo se presentan las

ecuaciones de gobierno fluidodinámicas en su forma genérica y se describen las hipótesis introducidas para que en un contexto provisto por openFoam™ dichas ecuaciones sean aplicables en la simulación numérica de procesos difusivos turbulentos. También se incluyen aspectos relevantes de cinética química necesarios para explicar la obtención de las velocidades de reacción asociadas con la producción y consumo de las especies involucradas y con la generación de calor resultante del proceso reactivo. Se considera que las ecuaciones de Navier-Stokes para flujos compresibles permanecen válidas con flujos químicamente activos y que los cambios en la densidad provienen, principalmente de los grandes cambios de temperatura inducidos por las reacciones exotérmicas. Para introducir la turbulencia dentro de las ecuaciones de Navier-Stokes se recurre al promedio ponderado másico propuesto por Favre [1]. Se enfatiza el tratamiento que se da a las ecuaciones de conservación de la energía y de las especies, ya que la ecuación global de conservación de la masa y las de momento permanecen idénticas a las de un flujo sin reacciones químicas.

Al abordar problemas fluidodinámicos que involucran reacciones químicas, está implícito un aumento de las dificultades inherentes a la resolución de las ecuaciones de Navier-Stokes no reactivas. A estas dificultades debe añadirse el aumento en complejidad propio de la interacción turbulencia-reacciones químicas. Se sabe que resolver el flujo turbulento incluyendo todas las escalas espaciales y temporales que lo caracterizan es, desde el punto de vista computacional, un problema muy demandante en recursos informáticos. Si a tal demanda se le suma la multiplicidad de escalas asociadas con el proceso químico, el aumento requerido de tales recursos sería tal que la simulación es prácticamente irrealizable. Para reducir los inconvenientes mencionados, se introducen en las ecuaciones de conservación modelos de turbulencia tipo RANS los cuales posibilitan la evaluación de términos no cerrados necesarios para cuantificar el efecto de la turbulencia en el proceso de mezcla.

La difusión inducida por los movimientos caóticos presentes en el flujo turbulento, define el transporte de masa, momento o energía. Este proceso difusivo puede tener una escala temporal más rápida que la difusión molecular, por lo tanto al estudiar la combustión difusiva turbulenta hay que tener en cuenta los efectos de la turbulencia no solamente en el proceso de mezcla, sino también en la química del sistema. Esta interacción turbulencia-química es tenida en cuenta introduciendo el modelo conocido como PaSR (*Partially Stirred Reactor*). Este modelo divide la celda computacional en dos zonas, una reactiva y otra que no lo es. La determinación de la fracción volumétrica activa requiere la definición de un tiempo químico característico, lo cual implica un proceso químico con velocidades finitas. Cabe añadir que también es necesario contar con un modelo termofísico mediante el cual se evalúan las propiedades de la mezcla en función del cambio en la temperatura de cada celda del dominio computacional.

A continuación se presentan diferentes simulaciones del *benchmark* conocido como llama D (*flame D*) de Sandia Labs<sup>1</sup>. Este caso de prueba cuenta con una amplia gama de datos experimentales que lo hacen ideal para cuantificar la capacidad del código numérico en problemas que involucran acoplamiento fluidodinámico-químico en régimen sub-sónico. El problema se aborda utilizando modelos cinéticos con diferentes niveles de aproximación, considerando entonces desde el modelo de una reacción global de Bui-Phan [2], el de dos pasos de Westbrook y Dryer [3], el de Westbrook y Dryer modificado [4] y el de reacciones de Jones y Lindstedt *Jones1988*. Cabe mencionar que los resultados aquí presentados reflejan lo presentado en [5] y posteriormente extendido y publicado en [6].

---

<sup>1</sup><http://www.sandia.gov/>

### 3.1. Promedios de Favre

Cualquier cantidad de interés en un flujo turbulento puede ser expresada como la suma de su valor medio  $\tilde{\psi}$  y su fluctuación  $\psi''$  [1, 7–11]:

$$\psi = \tilde{\psi} + \psi'' \quad (3.1)$$

Si la compresibilidad del fluido es importante, es conveniente multiplicar la Ec. 3.1 por la densidad:

$$\rho\psi = \rho\tilde{\psi} + \rho\psi'' \quad (3.2)$$

Promediando la Ec. 3.2, se obtiene:

$$\overline{\rho\psi} = \overline{\rho\tilde{\psi}} + \overline{\rho\psi''} \quad (3.3)$$

Si se tiene en cuenta la definición del promedio ponderado según la masa propuesto por Favre [8, 12]:

$$\tilde{\psi} = \frac{\overline{\rho\psi}}{\overline{\rho}} \quad (3.4)$$

De la Ec. 3.3 se obtiene finalmente:

$$\overline{\rho\psi''} = 0 \quad (3.5)$$

La ventaja de utilizar los promedios de Favre, es que con este tipo de promedio se evita que aparezcan términos que involucren correlaciones entre las fluctuaciones de la densidad, lo que simplifica el tratamiento de las ecuaciones [10]. En general se promedian según Favre todas las cantidades de interés, a excepción de la presión, densidad y el flujo de calor [12]. Es importante notar que los promedios, cualquiera sea su clase, satisfacen las siguientes reglas generales<sup>2</sup> [11–14]:

1.  $\overline{\overline{\phi}} = \overline{\phi}$
2.  $\overline{\phi\psi} = \overline{\phi} \overline{\psi}$
3.  $\overline{\phi + \psi} = \overline{\phi} + \overline{\psi}$
4.  $\overline{\phi\psi} = \overline{\psi} \overline{\phi} + \overline{\phi'\psi'}$
5.  $\overline{\frac{\partial\phi}{\partial s}} = \frac{\partial\overline{\phi}}{\partial s}$
6.  $\overline{\nabla \cdot (\mathbf{a})} = \nabla \cdot (\overline{\mathbf{a}})$
7.  $\overline{\nabla \cdot (\phi\mathbf{a})} = \nabla \cdot (\overline{\phi\mathbf{a}})$   
 $= \nabla \cdot (\overline{\phi}\overline{\mathbf{a}}) + \nabla \cdot (\overline{\phi'\mathbf{a}'})$
9.  $\overline{\nabla \cdot (\nabla(\phi))} = \nabla \cdot (\nabla(\overline{\phi}))$

$$(3.6)$$

Con carácter ilustrativo se presenta a continuación el procedimiento para promediar según Favre a la ecuación genérica descrita en la Sección.2.4. Remplazando las variables por su respectivo valor medio y la correspondiente fluctuación, se obtiene<sup>3</sup>:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \rho (\tilde{\psi} + \psi'') \right) + \nabla \cdot \left( \rho (\tilde{\mathbf{U}} + \mathbf{U}'') (\tilde{\psi} + \psi'') \right) - \nabla \cdot \left( \rho D \nabla (\tilde{\psi} + \psi'') \right) = \overline{S} + S' \quad (3.7)$$

<sup>2</sup>Las reglas mostradas aplican independientemente de si se consideran promedios de Reynolds ( $\overline{\quad}$ ) o promedios de Favre ( $\tilde{\quad}$ ). Nótese que el promedio según Reynolds de las fluctuaciones es nulo ( $\overline{a'} = 0$ ), por el contrario utilizando promedios de Favre esta condición no se cumple.

<sup>3</sup>Por simplicidad se asume que el coeficiente de difusión  $D$  es independiente de la posición y el tiempo.

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho \tilde{\psi}) + \frac{\partial}{\partial t} (\rho \psi'') + \nabla \cdot (\rho \tilde{U} \tilde{\psi} + \rho U'' \tilde{\psi} + \rho U'' \psi'' + \rho \tilde{U} \psi'') \\ = \nabla \cdot (\rho D \nabla (\underline{\tilde{\psi}} + \underline{\psi''})) + \bar{S} + S' \end{aligned} \quad (3.8)$$

Promediando la Ec. 3.8 utilizando las reglas previamente descritas en la Ec. 3.6 se consigue:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\overline{\rho \tilde{\psi}}) + \frac{\partial}{\partial t} (\overline{\rho \psi''}) + \nabla \cdot (\overline{\rho \tilde{U} \tilde{\psi}} + \overline{\rho U'' \tilde{\psi}} + \overline{\rho U'' \psi''} + \overline{\rho \tilde{U} \psi''}) \\ = \nabla \cdot (\overline{\rho D \nabla \underline{\tilde{\psi}}} + \overline{\rho D \nabla \underline{\psi''}}) + \bar{S} + \bar{S}' \end{aligned} \quad (3.9)$$

Es claro que el segundo término del miembro izquierdo se hace cero, igual sucede con el segundo término y el cuarto del lado derecho, con lo que se obtiene:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\overline{\rho \tilde{\psi}}) + \nabla \cdot (\overline{\rho \tilde{U} \tilde{\psi}} + \overline{\rho U'' \tilde{\psi}} + \overline{\rho U'' \psi''} + \overline{\rho \tilde{U} \psi''}) \\ = \nabla \cdot (\overline{\rho D \nabla \underline{\tilde{\psi}}}) + \bar{S} \end{aligned} \quad (3.10)$$

El primer término afectado por el operador divergencia del miembro del lado izquierdo, puede ser escrito en la forma:

$$\begin{aligned} \overline{\rho \tilde{U} \tilde{\psi}} &= \overline{(\rho \tilde{U}) \tilde{\psi}} \\ &= (\bar{\rho} \tilde{U}) \tilde{\psi} \end{aligned} \quad (3.11)$$

Recordando que el valor medio del producto de un valor promediado por una constante es igual al producto de sus promedios (regla 2) y que el promedio de una fluctuación ponderada por la masa (Ec. 3.5) es nulo, es posible escribir el segundo término bajo el operador divergencia de la siguiente forma:

$$\overline{\rho U'' \tilde{\psi}} = \overline{(\rho U'')} \tilde{\psi} = 0 \quad (3.12)$$

Efectuando un análisis similar es posible verificar que el cuarto término afectado por el operador divergencia también es nulo. En lo que concierne al tercer término afectado por la divergencia, éste resulta:

$$\overline{\rho U'' \psi''} = \overline{\rho U''} \psi'' \quad (3.13)$$

Nótese que si en este caso a la cantidad genérica  $\psi$  se le asigna la velocidad, este término representará a las **tensiones de Reynolds** en la ecuación de momento. Finalmente la ecuación para una cantidad genérica  $\psi$  promediada según Favre, resulta:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\overline{\rho \tilde{\psi}}) + \nabla \cdot (\overline{\rho \tilde{U} \tilde{\psi}}) = \nabla \cdot (D \overline{\rho \nabla \underline{\tilde{\psi}}} - \overline{\rho U'' \psi''}) + \bar{S} \quad (3.14)$$

Esta forma genérica es la que adoptan todas las ecuaciones de gobierno a considerar, por lo tanto, resulta apropiado ilustrar el procedimiento de promediado de una ecuación genérica.

### 3.2. Ecuaciones de transporte para un flujo con reacciones químicas

En esta sección se presentan las ecuaciones de transporte turbulento promediadas según Favre que serán consideradas en este capítulo, también se detallan simplificaciones que se hacen a las mismas y las hipótesis que las fundamentan.

### 3.2.1. Ecuación de las especies en términos de la fracción de masa

Cuando se pretende simular un flujo con reacciones químicas deben agregarse a las ecuaciones de Navier-Stokes tradicionales ecuaciones que tengan en cuenta el transporte de masa de cada una de las diferentes especies involucradas en el proceso a estudiar. Con este propósito se define la fracción de masa por la relación

$$Y_k = \rho_k \rho^{-1} \quad (3.15)$$

donde  $\rho$  es la densidad de la mezcla y  $\rho_k$  la concentración másica de la especie  $k$ . Considérese un proceso de combustión donde el conjunto de reacciones químicas que lo describe involucra  $N$  especies y a cada una de estas especies se le asocia una velocidad de difusión  $\mathbf{V}_k$ . La ecuación de conservación para la fracción de masa  $Y_k$  resulta de efectuar un balance de flujos, donde se tiene en cuenta el flujo debido a las distintas velocidades de difusión que pueden presentar las especies, el transporte por convección y la producción/consumo resultante de las reacciones químicas, entonces, es posible escribir la siguiente ecuación de conservación para cada una de las especies<sup>4</sup> [9, 15–17]:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho Y_k) + \nabla \cdot (\rho (\mathbf{U} + \mathbf{V}_k) Y_k) = \dot{\omega}_k \quad (3.16)$$

donde  $\dot{\omega}_k$  es la velocidad de reacción de la especie  $k$ , así se añaden  $N$  ecuaciones al sistema de EDPs original (Navier-Stokes) que deberá ser resuelto. Cabe notar que

$$\sum_{k=1}^N Y_k = 1 \quad (3.17)$$

por lo tanto, resolviendo  $N - 1$  de estas ecuaciones escalares la fracción de masa de la especie restante se puede determinar a partir de:

$$Y_N = 1 - \sum_{k=1}^{N-1} Y_k \quad (3.18)$$

Generalmente, determinar las diferentes velocidades de difusión para cada una de las especies implica resolver un sistema adicional de ecuaciones [7, 9, 18], lo cual genera un considerable aumento en el costo computacional. En consecuencia y acorde con uno de los objetivos de este trabajo, describir los aspectos necesarios para una simulación adecuada del fenómeno de combustión difusiva con openFoam<sup>TM</sup>, se hace uso de la primera ley de Fick para modelar estos términos [7, 19]. La primera ley de Fick asume que el transporte debido a las velocidades de difusión de las diferentes especies es proporcional a sus gradientes. Entonces

$$\mathbf{V}_k Y_k = -\rho D_k \nabla Y_k \quad (3.19)$$

siendo  $D_k$  el coeficiente de difusión molecular de la especie  $k$ . Haciendo uso de la Ec. 3.19, la Ec. 3.16 se puede escribir

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho Y_k) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} Y_k) - \nabla \cdot (\rho D_k \nabla Y_k) = \dot{\omega}_k \quad (3.20)$$

Introduciendo valores medios y fluctuaciones en la ecuación Ec. 3.20, suponiendo un coeficiente de difusión no fluctuante e igual para todas las especie y promediando según lo descrito en la Sección.3.1, es posible obtener [7, 9, 20]:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{Y}_k) + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{U}} \tilde{Y}_k) + \nabla \cdot (\bar{\rho} \widetilde{\mathbf{U}'' Y_k''} - D_k \bar{\rho} \nabla \tilde{Y}_k) = \bar{\omega}_k \quad (3.21)$$

<sup>4</sup>Nótese que debido a que se considera un campo de flujo turbulento ciertos efectos como el *Soret*, no se han tenido en cuenta.

En la Ec. 3.21 aparecen dos términos que deben ser modelados, estos son, el término asociado al transporte de las especies por efectos de la turbulencia  $\overline{\rho \mathbf{U}'' Y_k''}$  y el término asociado a la velocidad media de reacción de cada una de las especies  $\overline{\omega_k}$ .

Si el transporte debido a la difusión molecular de las especies es equiparable a la velocidad de transporte debida a los efectos viscosos, es posible asumir un número de Schmidt unitario para todas las especies [18]. Entonces, el término que describe el flujo difusivo de las especies ponderado por la masa en la Ec. 3.21, se puede modelar

$$\overline{\rho D_k \nabla \tilde{Y}_k} = \overline{\mu \nabla \tilde{Y}_k} \quad (3.22)$$

Para modelar el término que describe el transporte turbulento de las especies también se emplea la hipótesis del gradiente, por lo tanto, la difusión turbulenta de las especies se escribe [7, 9, 18, 21]:

$$\overline{\rho \mathbf{U}'' Y_k''} = -\frac{\overline{\mu_t}}{Sc_t} \nabla \tilde{Y}_k \quad (3.23)$$

donde  $Sc_t$  es el número de Schmidt turbulento, que también puede tomar valor unitario [19]. Finalmente la ecuación de transporte de las especies promediada según Favre se puede escribir como:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\overline{\rho \tilde{Y}_k}) + \nabla \cdot (\overline{\rho \tilde{\mathbf{U}} \tilde{Y}_k}) - \nabla \cdot (\mu_{\text{eff}} \nabla \tilde{Y}_k) = \overline{\omega_k} \quad (3.24)$$

donde  $\mu_{\text{eff}}$  es la **viscosidad efectiva** determinada como la suma algebraica de las viscosidades turbulenta y molecular.

Hasta este punto se ha descrito cómo tratar los términos relacionados al transporte difusivo, laminar y turbulento de las especies, sin embargo, no se ha mencionado nada respecto del término que proporciona las velocidades de reacción, ni tampoco cómo determinar la **viscosidad turbulenta**  $\mu_t$ , esto se hará en una sección posterior donde se introducen el modelado de turbulencia y de interacción química-turbulencia (ver Sección.3.3 y Sección.3.6).

### 3.2.2. Ecuación de la energía

La ecuación de la energía puede adoptar diferentes formas dependiendo de la variable energética que se utilice. Dicha variable energética, puede ser la energía total, la energía específica, la entalpía, la entalpía sensible e incluso la temperatura [7]. No obstante, aquí se considerará a la ecuación de la energía en términos de la **entalpía sensible**, debido que al utilizar esta variable aparece de forma explícita el término que tiene en cuenta la contribución energética por la liberación de calor producto de las reacciones exotérmicas asociadas al proceso de combustión, y además evita la aparición de un término adicional relacionado con la diferencia de entalpías de las especies que componen la mezcla [7]. La ecuación de la energía en términos de la entalpía sensible resulta<sup>5</sup> [7, 9, 18, 22]

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho h_s) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} h_s) = \\ \dot{\omega}_T + \frac{Dp}{Dt} - \nabla \cdot \mathbf{q} + \mathbf{Q} - \nabla \cdot \left( \rho \sum_{k=1} h_{s,k} \tilde{Y}_k \mathbf{V}_k \right) + \rho \sum_{k=1} \tilde{Y}_k \mathbf{f}_{k,j} \mathbf{V}_{k,j} + \underline{\underline{\tau}} : \nabla \mathbf{U} \end{aligned} \quad (3.25)$$

<sup>5</sup>Aquí no se tiene en cuenta el efecto *Dufour* el cual representa el transporte de energía debido a los gradientes de concentración de las especies (este efecto se puede considerar el opuesto al efecto *Soret* en la ecuación de las especies) [7, 9].

donde  $\dot{\omega}_T$  es el calor generado por la combustión,  $\mathbf{q}$  el flujo de calor por conducción y  $\mathbf{Q}$  representa otras fuentes de calor como pueden ser el flujo de calor por radiación, la energía liberada por una fuente de ignición, o cualquier otra fuente de calor externa. El siguiente término representa el flujo neto de energía debido a la difusión de las especies, el término que sigue es la potencia producida por las fuerzas volumétricas sobre la especie  $k$  y finalmente, el término  $\underline{\tau} : \nabla \mathbf{U}$ , es un término fuente asociado a la disipación viscosa molecular.

Para modelar el término asociado al flujo de calor por conducción se utiliza la ley de Fourier:

$$\mathbf{q} = -\lambda \nabla T \quad (3.26)$$

donde  $\lambda$  es el coeficiente de conductividad térmica. Dado que se considera un proceso de auto-ignición, no se tiene en cuenta ningún aporte de calor desde alguna fuente externa. Por simplicidad no se considera el transporte de calor por radiación, lo cual para la simulación de la combustión de una llama difusiva totalmente en fase gaseosa no produciría gran impacto [20, 23, 24]. En lo que respecta al transporte de energía por difusión pura de las especies, éste se desprecia dado que su aporte comparado con el del calor liberado por la combustión es mínimo [7]. Si se tiene en cuenta únicamente la influencia de la gravedad en todas las especies, el término relacionado a la potencia producida por las fuerzas de campo es por definición nulo<sup>6</sup> ( $\rho \sum_{k=1}^N Y_k \mathbf{f}_{k,j} \mathbf{V}_{k,i} = \rho \mathbf{f}_j \sum_{k=1}^N Y_k \mathbf{V}_{k,j} = 0$ ).

El proceso de combustión aquí considerado sucede a baja velocidad, por lo tanto, los efectos compresibles provienen de los fuertes cambios en la temperatura debidos a la liberación de calor producto de la combustión, y no por los cambios de densidad asociados a los fenómenos de compresibilidad en flujos a alta velocidad. En consecuencia, el término asociado al flujo de calor por disipación viscosa  $\underline{\tau} : \nabla \mathbf{U}$  se hace despreciable [20, 22, 25]. Atendiendo a todas las simplificaciones expuestas y antes de introducir la forma de determinar el calor liberado por la combustión, se procede a promediar la ecuación de transporte escrita en términos de la entalpía sensible:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{h}_s) + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{U}} \tilde{h}_s) = \bar{\omega}_T + \frac{\overline{Dp}}{Dt} + \nabla \cdot (\lambda \nabla \tilde{T} - \overline{\rho \mathbf{U}'' h_s''}) \quad (3.27)$$

Resulta conveniente escribir la difusión térmica en términos de la entalpía sensible, esto se hace considerando la definición del número de Prandtl<sup>7</sup> que relaciona la difusión viscosa con la difusión térmica:

$$Pr = \frac{\mu C_p}{\lambda} \quad (3.28)$$

la relación entre la difusividad térmica, la densidad y el calor específico

$$\alpha = \frac{\lambda}{\rho C_p} \quad (3.29)$$

y la definición de la entalpía sensible<sup>8</sup>

$$\nabla h_s = C_p \nabla T \quad (3.30)$$

<sup>6</sup>La velocidad ( $U_i$ ) de la especie  $i$  con respecto a un sistema inercial, se puede expresar como la suma de la velocidad de difusión de dicha especie (relativa al propio movimiento de la mezcla de gases) más la velocidad de la mezcla relativa al sistema inercial ( $U_i = U + V_i$ ), a su vez, la velocidad de la mezcla se puede determinar como un promedio de la velocidad (ponderada por la masa) de cada una de las especies  $V = \sum Y_k U_i$ , por lo tanto, multiplicando por la fracción de masa a ( $U_i = U + V_i$ ) y reemplazando  $V = \sum Y_k U_i$  es posible demostrar que  $\sum Y_k V_i = 0$ .

<sup>7</sup>En este trabajo se asume  $Pr = 0.7$  valor que se encuentra dentro del intervalo  $0.7 \leq Pr \leq 0.9$  el cual se considera apropiado para la mayoría de flujos que involucran reacciones químicas [7, 26].

<sup>8</sup>Nótese que  $C_p$  se considera contante localmente en  $\Delta t$ , no obstante, se tiene en cuenta la variación del  $C_p$  con  $T$  por medio de los polinomios de las tablas JANAF

Así, manipulando de forma apropiada las Ec. 3.28, Ec. 3.29 y Ec. 3.30 es posible escribir el flujo laminar de calor de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}\lambda \nabla \tilde{T} &= \frac{\lambda}{C_p} \nabla h_s \\ &= \alpha \nabla h_s\end{aligned}\quad (3.31)$$

Al igual que en el caso de la ecuación de las especies queda por cerrar el término asociado al transporte turbulento de calor  $\overline{\rho \mathbf{U}'' h_s''}$ . Utilizando nuevamente la hipótesis del gradiente (ver Ec. 3.23), dicho término resulta:

$$\overline{\rho \mathbf{U}'' h_s''} = -\alpha_t \nabla h_s \quad (3.32)$$

donde  $\alpha_t$  es la difusividad térmica turbulenta, la cual a su vez se está dada por

$$\alpha_t = \frac{\mu_t}{P_{rt}} \quad (3.33)$$

Aparecen de nuevo parámetros asociados al modelo de turbulencia, en este caso la viscosidad y el número Prandtl turbulentos<sup>9</sup>. Finalmente, la ecuación de la entalpía sensible se puede escribir:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\tilde{\rho} \tilde{h}_s) + \nabla \cdot (\tilde{\rho} \tilde{\mathbf{U}} \tilde{h}_s) = \tilde{\dot{\omega}}_T + \frac{\overline{Dp}}{Dt} + \nabla \cdot (\alpha_{\text{eff}} \nabla h_s) \quad (3.34)$$

donde  $\alpha_{\text{eff}}$  es la difusividad térmica efectiva que es la suma algebraica de la difusividad molecular y la turbulenta  $\alpha_{\text{eff}} = \alpha + \alpha_t$ .

El promedio del término transitorio de la presión  $\overline{Dp}/Dt$  se calcula de acuerdo a la definición de la una derivada substancial debidamente promediada

$$\frac{\overline{Dp}}{Dt} = \frac{\partial \bar{p}}{\partial t} + \tilde{\mathbf{U}} \cdot \nabla \bar{p} \quad (3.35)$$

Al igual que para el caso de la ecuación de las especies, el cómputo del calor liberado por la combustión implica ciertas correcciones con el fin de tener en cuenta la influencia de la turbulencia en el mismo, la evaluación de este término se expone en la sección que introduce el modelo de interacción química-turbulencia (Sección.3.6).

Cuando el número de Mach es bajo ( $M < 0.3$ ), la densidad tiende a ser independiente de la presión y la ecuación de estado no puede ser utilizada para calcular la temperatura, no obstante, si la entalpía sensible ha sido determinada, ésta puede utilizarse para el cálculo de la temperatura por medio del procedimiento que se describe a continuación.

Se sabe que:

$$\frac{dh_s}{dT} = \frac{dF(T)}{dT} = F'(T) = C_p(T) \quad (3.36)$$

Expandiendo a  $F(T)$  a partir de una temperatura próxima  $T_0$ , se tiene

$$F(T) = F(T_0) + F'(T_0)(T - T_0) \quad (3.37)$$

Luego  $T$  se consigue:

$$T = T_0 + \frac{F(T) - F(T_0)}{F'(T_0)} = T_0 + \frac{F(T) - F(T_0)}{C_p(T_0)} \quad (3.38)$$

<sup>9</sup>Se emplea la analogía de Reynolds, la cual expresa que la relación entre el flujo de momento y el flujo de calor es aproximadamente constante con respecto a la dirección radial del flujo, y por lo tanto se puede asumir  $P_{rt} = 1$ [12].

$F(T)$  corresponde al valor de la variable energética en la presente iteración,  $F(T_0)$  al valor inicial o de la iteración anterior y  $F'(T_0) = C_p(T)$  al valor de la derivada de la variable energética correspondiente a  $T_0$ . De esta manera, se fija un número de iteraciones de forma tal que se satisfaga una condición de convergencia preestablecida, por ejemplo, en el caso de openFoam™ un número de iteraciones [27]. Este procedimiento se implementa en la clase `thermo.H` la cual implementa funciones miembros apropiadas que se sobrecargan en tiempo de corrida dependiendo del modelo que se utilice, es decir, se selecciona el procedimiento apropiado dependiendo de la variable energética utilizada.

### 3.2.3. Ecuación de la conservación de la masa y del momento

Puesto que tanto la ecuación de conservación global de la masa como la de momento, formalmente no experimentan modificaciones por la presencia de reacciones químicas, no es necesario dedicar secciones independientes a cada una de ellas como se hizo con las ecuaciones de conservación de las especies y de la energía. No obstante, se describen algunos aspectos relevantes que competen a la ecuación de momento.

Si existen diferentes fuerzas de campo que afecten a las especies que constituyen la mezcla, la ecuación de momento adopta la forma:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \mathbf{U}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \mathbf{U}) = -\nabla \cdot \mathbf{p} + \nabla \cdot \underline{\underline{\boldsymbol{\tau}}} + \rho \sum_{k=1} Y_k \mathbf{f}_{k,j} \quad (3.39)$$

Sin embargo, de acuerdo con lo expuesto en la Sección.3.2.1, si la única fuerza de campo que afecta a todas las especies es la gravedad, el tercer término del segundo miembro se simplifica y la Ec. 3.39 se reduce a

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \mathbf{U}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \mathbf{U}) = -\nabla p + \nabla \cdot \underline{\underline{\boldsymbol{\tau}}} + \rho \mathbf{g} \quad (3.40)$$

El tensor de tensiones viscosas ( $\underline{\underline{\boldsymbol{\tau}}}$ ), aplicable a un fluido newtoniano sin tener en cuenta la viscosidad volumétrica<sup>10</sup> está dado por[7, 9]:

$$\underline{\underline{\boldsymbol{\tau}}} = 2\mu \left( \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{U} + (\nabla \mathbf{U})^T) - \frac{1}{3} \nabla \cdot \mathbf{U} \mathcal{I} \right) \quad (3.41)$$

Luego de aplicar los promedios de Favre a la Ec. 3.40 se obtiene:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho} \tilde{\mathbf{U}}) + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{U}} \tilde{\mathbf{U}}) = -\nabla \bar{p} + \nabla \cdot \left( \underline{\underline{\boldsymbol{\tau}}} - \widetilde{\bar{\rho} \mathbf{U}'' \mathbf{U}''} \right) + \bar{\rho} \mathbf{g} \quad (3.42)$$

Se observa, que aparece el término  $\widetilde{\bar{\rho} \mathbf{U}'' \mathbf{U}''}$  el cual como se menciona en la sección donde se introdujeron los promedios de Favre (Sección.3.1), se conoce como **tensiones de Reynolds** o de **Favre** en el contexto de flujos compresibles[28] (de ahora en adelante se usará  $\underline{\underline{\boldsymbol{\tau}}}^t$  como nomenclatura para dichas tensiones). Para modelar estas tensiones, se tiene en cuenta la hipótesis de Bussinesq [7, 12, 21]. Dicha hipótesis propone que las tensiones de Reynolds (o de Favre) son proporcionales a los gradientes medios de velocidad e introduce como constante de proporcionalidad a la viscosidad turbulenta  $\mu_t$  [21]:

$$\underline{\underline{\boldsymbol{\tau}}}^t = -\mu_t \left( \nabla \tilde{\mathbf{U}} + (\nabla \tilde{\mathbf{U}})^T - \frac{2}{3} \nabla \cdot \tilde{\mathbf{U}} \mathcal{I} \right) + \frac{2}{3} \bar{\rho} \tilde{k} \mathcal{I} \quad (3.43)$$

<sup>10</sup>También conocido como segundo coeficiente de viscosidad, *bulk viscosity coefficient*)

Para evaluar  $\mu_t$  se empleará el modelo de turbulencia  $k - \varepsilon$ , el cual requiere resolver dos ecuaciones adicionales, una para el transporte de energía cinética turbulenta  $k$  y otra para la disipación  $\varepsilon$  de dicha energía. Detalles correspondientes al modelo  $k - \varepsilon$  serán presentados más adelante.

Promediando la Ec. 3.41 e introduciendo la expresión resultante junto con la Ec. 3.43 en la Ec. 3.42, la ecuación de momento promediada se transforma en:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{U}}) + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{U}} \tilde{\mathbf{U}}) + G(\tilde{\mathbf{U}}) = -\nabla \bar{p} + \bar{\rho} \mathbf{g} \quad (3.44)$$

donde el operador  $G(\tilde{\mathbf{U}})$  está dado por:

$$G(\tilde{\mathbf{U}}) = \nabla \cdot (\mu_{\text{eff}} \nabla \tilde{\mathbf{U}}) - \nabla \cdot \left[ \mu_{\text{eff}} \left\langle \left( \nabla \tilde{\mathbf{U}} \right)^T - \frac{2}{3} \mathcal{I} \text{Tr} \left\{ \left( \nabla \tilde{\mathbf{U}} \right)^T \right\} \right\rangle \right] \quad (3.45)$$

El operador  $G$  tiene en cuenta los aportes moleculares y turbulentos (tensiones de Reynolds) por medio de la viscosidad efectiva  $\mu_{\text{eff}}$ .

Como se mencionó al principio de esta sección, la ecuación de la conservación de la masa global no sufre ninguna modificación ante la presencia de reacciones químicas, dicha ecuación luego de ser promediada según Favre resulta:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{U}}) = 0 \quad (3.46)$$

### 3.2.4. Ecuación de estado

Se considera que la mezcla reactiva está compuesta por  $N$  diferentes especies en estado gaseoso, las cuales se comportan según la ley de los gases perfectos. De esta forma la ecuación de estado para la especie  $k$  resulta:

$$p_k = \rho_k \frac{R_u}{W_k} T \quad (3.47)$$

Para una mezcla de  $N$  gases la presión total es la suma de las presiones parciales:

$$p = \sum_{k=1}^N p_k \quad (3.48)$$

La concentración másica de la especie  $k$  puede ser escrita en función de la densidad de la mezcla y la fracción de masa como:

$$\rho_k = \rho Y_k \quad (3.49)$$

Al igual que en el caso de la presión, la densidad también se puede determinar como la suma de las concentraciones másicas parciales

$$\rho = \sum_{k=1}^N \rho_k \quad (3.50)$$

De esta forma es posible escribir la ecuación de estado para la mezcla:

$$\begin{aligned} p &= \rho \frac{R_u}{\bar{W}} T \\ &= \frac{\rho}{\psi} \end{aligned} \quad (3.51)$$

donde  $\bar{W}$  es el peso molecular medio de la mezcla, el cual puede ser definido en base molar o másica según convenga [9]:

$$\bar{W} = \sum_{k=1}^N X_k W_k$$

$$\bar{W} = \left( \sum_{k=1}^N \frac{Y_k}{W_k} \right)^{-1}$$

Es de hacer notar que  $\bar{W}$  no hace referencia al valor del peso molecular promediado según Reynolds, sino al promedio ponderado por las fracciones de masas o molares definido previamente. Además, la definición del peso molecular medio es independiente del promediado aplicado a las fracciones que lo definen, esto se debe a que en general se considera que los pesos moleculares de las especies son constantes.

### 3.3. Modelo de turbulencia

Con el fin de calcular los términos relacionados con el transporte turbulento de las especies, energía y las tensiones de Reynolds, y de esta forma cerrar las ecuaciones de conservación definidas en la sección anterior, se empleará un modelo tipo RANS (*Reynolds Averaged Navier-Stokes*) en el cual la viscosidad turbulenta se relaciona con la energía cinética turbulenta  $k$  y su disipación  $\varepsilon$  a partir de [7, 21]:

$$\mu_t = C_\mu \bar{\rho} \frac{\tilde{k}^2}{\tilde{\varepsilon}} \quad (3.52)$$

El modelo  $k - \varepsilon$  modificado para el caso compresible, requiere al igual que su contraparte incompresible la solución de dos ecuaciones de transporte adicionales, una para el transporte de la energía cinética turbulenta y otra para su disipación [29–31]:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{k}) + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{U} \tilde{k}) - \nabla \cdot \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \nabla \tilde{k} \right] = P_k - \bar{\rho} \tilde{\varepsilon} \quad (3.53a)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{\varepsilon}) + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{U} \tilde{\varepsilon}) - \nabla \cdot \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \tilde{\varepsilon} \right] = \frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{k}} (C_{\varepsilon 1} G - C_{\varepsilon 2} \bar{\rho} \tilde{\varepsilon}) - \left( \frac{2}{3} C_{\varepsilon 1} + C_{\varepsilon 3} \right) \bar{\rho} \tilde{\varepsilon} \nabla \cdot \tilde{U} \quad (3.53b)$$

donde  $P_k$  es la tasa o velocidad de producción por unidad de volumen de energía cinética turbulenta debida a los gradientes de velocidad presentes en el campo de flujo, y se evalúa de acuerdo a:

$$P_k = 2\mu_t D^{\text{dev}} \nabla \tilde{U} - \frac{2}{3} \bar{\rho} \tilde{k} \nabla \cdot \tilde{U} \quad (3.54)$$

siendo  $D^{\text{dev}}$  la parte desviadora del tensor velocidad de deformación  $\underline{\underline{D}}$ . El coeficiente adicional  $C_{\varepsilon 3}$  no está incluido en la formulación original propuesta por Launder y Sharma [29], esta modificación fue propuesta por Nordin y Kärholm [30, 31] con el objetivo de tener en cuenta los efectos de la compresibilidad. Las constantes que intervienen en las ecuaciones del modelo adoptan los siguientes valores [32]:

$$C_{\varepsilon 1} = 1.44 \quad C_{\varepsilon 2} = 1.92 \quad C_{\varepsilon 3} = -0.33 \quad \sigma_k = 1.0 \quad \sigma_\varepsilon = 1.3 \quad C_\mu = 0.09$$

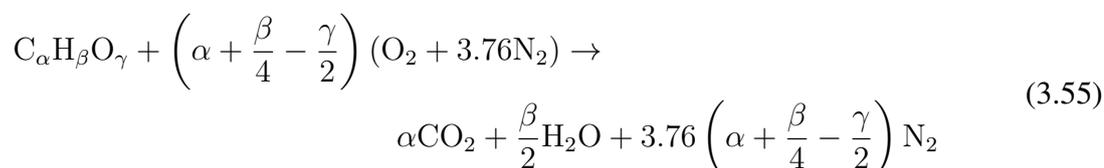
### 3.4. Cinética química para la combustión de hidrocarburos

La compleja cinética química de la combustión de hidrocarburos requiere la consideración de un gran número de especies y reacciones elementales para ser descrita en forma apropiada. Así, en el caso de la combustión metano-aire se requieren alrededor de 53 especies y 800 reacciones elementales [15], y el número de reacciones a considerar crece conforme lo hacen el número de átomos de carbono en el combustible. Por lo tanto, es de esperar que a medida que el nivel de aproximación requerido sea más exigente el costo computacional de la simulación también lo será. En consecuencia, se han propuesto soluciones para esta problemática que consideran desde una reacción global, lo que se conoce como modelo de **reacción global de un paso**, o usar conjuntos limitados de las reacciones globales y/o elementales más significativas.

Como se menciona en el Cap. 2, las ecuaciones de transporte de las especies se encuentran acopladas y solía ser práctica convencional resolver el sistema completamente acoplado tratando de forma implícita a los términos fuentes involucrados. Sin embargo, nuevamente esto es prohibitivo cuando se considera un gran número de especies, en consecuencia, aparecen enfoques que proponen resolver el sistema de forma desacoplada determinando de forma local la velocidad de reacción asociada a cada especie. Para esto se utiliza un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias (ODEs) que describen la producción y consumo de cada especie, utilizando luego dichos datos para determinar los términos fuentes de las ecuaciones de las especies y de la energía.

#### 3.4.1. Modelo de reacción global de un paso

La ecuación global de reacción para cualquier hidrocarburo con aire, considerando una relación estequiométrica se puede escribir como <sup>11</sup> [15]:



Puesto que se centra la atención en la reacción metano-aire, la expresión anterior toma la forma particular:



Para determinar la velocidad de reacción global (GRR) de la reacción presentada en la Ec. 3.64 se utiliza la ley de acción de las masas [9, 15, 26], la cual establece que la velocidad de reacción es proporcional a la concentración de los reactantes, con lo cual se tiene:

$$GRR = k_A [CH_4]^a [O_2]^b \quad (3.57)$$

Aquí  $k_A$  es la constante de velocidad o tasa de reacción [9, 15, 33] y expresa la dependencia no lineal de la reacción con la temperatura, dicho coeficiente se define como:

$$\begin{aligned} k_A &= AT^n \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) \\ &= AT^n \exp\left(-\frac{T_a}{T}\right) \end{aligned} \quad (3.58)$$

<sup>11</sup>Nótese que en este caso se considera que la reacción experimentada por los reactantes es irreversible, es decir que sólo se considera la reacción de avance, la cual representa el proceso químico experimentado por los reactantes que da lugar a la formación de los productos.

donde  $A$  se denomina **factor pre-exponencial** o **factor de frecuencia**,  $n$  **exponente de la temperatura**,  $E_a$  **energía de activación** y  $T_a$  **temperatura de activación** ( $T_a$  se define como el cociente de la energía de activación con la constante universal de los gases).

El factor pre-exponencial expresa la frecuencia con la cual colisionan entre sí las moléculas que componen a las especies que reaccionan, el exponente  $n$  en muchas aplicaciones adopta valor nulo, sin embargo, con energías de activación muy bajas o temperaturas del medio muy altas, la dependencia exponencial mostrada por la ley de Arrhenius tiende a ser constante, y por lo tanto la dependencia de la temperatura únicamente es expresada a través de éste exponente. Para la reacción global aquí considerada, dicho exponente es nulo, ya que los datos con los que se cuentan así lo consideran.

La energía de activación se puede interpretar como la barrera energética que se debe alcanzar para romper los enlaces químicos entre las moléculas reactantes a fin de permitir la formación de nuevas especies. Para las simulaciones a desarrollar se espera un intervalo de temperaturas ( $277\text{ K} \leq T \leq 3000\text{ K}$ ), por lo tanto, dada la magnitud de la energía de activación para la reacción global, se observa que el aporte exponencial en la fórmula de Arrhenius para éste intervalo aún no tiende a un valor constante (Fig. 3.1), y por lo tanto considerar  $n = 0$  es razonable. [2, 10, 25]. Es de hacer notar que en el caso las reacciones globales, los parámetros de Arrhenius y los ex-

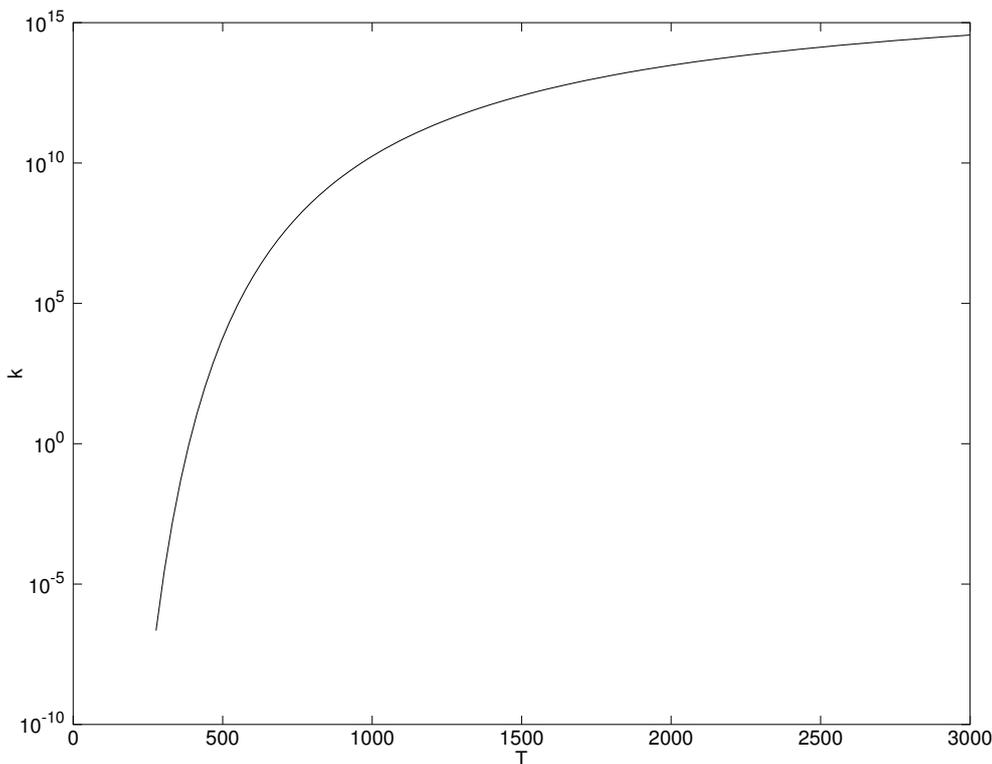


Fig. 3.1: Variación de  $k_A(T)$  en el intervalo  $277\text{ K} \leq T \leq 3000\text{ K}$

ponentes  $a$  y  $b$  son determinados por medio de experimentos en reactores de flujo [9]. Por otro lado, si se considerasen reacciones elementales los exponentes  $a$  y  $b$  corresponderían entonces a los coeficientes estequiométricos de la ecuación de reacción (Ec. 3.64). En la cinética química las unidades tradicionalmente utilizadas para la energía de activación y el factor pre-exponencial son  $\text{mol}$ ,  $\text{cm}^3$ ,  $\text{s}$  y  $\text{K}$ , pero puesto que aquí se utilizan para determinar los términos fuentes en las ecuaciones de las especies y el calor liberado por la combustión, las unidades preferidas son  $\text{kmol}$ ,  $\text{m}^3$ ,  $\text{s}$  y  $\text{K}$ .

De acuerdo a lo expuesto hasta el momento las velocidades de consumo de los reactantes, se

pueden expresar como:

$$\frac{d[\text{CH}_4]}{dt} = -\text{GRR} \quad (3.59a)$$

$$\frac{d[\text{O}_2]}{dt} = -2\text{GRR} \quad (3.59b)$$

Análogamente las velocidades de formación de los productos, resultan:

$$\frac{d[\text{CO}_2]}{dt} = \text{GRR} \quad (3.60a)$$

$$\frac{d[\text{H}_2\text{O}]}{dt} = 2\text{GRR} \quad (3.60b)$$

Se observa que para determinar las velocidades de reacción se requiere resolver en este caso cuatro ecuaciones diferenciales ordinarias desacopladas del tipo *stiff*<sup>12</sup>, lo cual es así porque intervienen sólo cuatro especies y una única reacción, lo que hace que las expresiones que definen estén definidas por un único término.

### 3.4.2. Términos fuentes en sistemas con múltiples reacciones químicas

En la práctica, el proceso de combustión de hidrocarburos involucra la solución numérica de grandes sistemas de ecuaciones de reacciones químicas, en las que se tienen en cuenta reacciones tanto de avance como inversas o de retroceso. Por lo tanto suponiendo el proceso químico experimentado en un flujo dado por la interacción de  $M$  reacciones químicas elementales y  $N$  especies, el conjunto de reacciones puede expresarse:

$$\sum_{j=1}^N \nu'_{ji} C_j \xrightarrow{k_i^f} \sum_{j=1}^N \nu''_{ji} C_j \quad (3.61)$$

$$\sum_{j=1}^N \nu'_{ji} C_j \xleftarrow{k_i^b} \sum_{j=1}^N \nu''_{ji} C_j \quad (3.62)$$

donde  $\nu'_{ji}$  y  $\nu''_{ji}$  son respectivamente los coeficientes estequiométricos de los reactantes y los productos;  $k_i^f$  y  $k_i^b$  las constantes de reacción para las reacciones directas e inversas.  $C_j$  representa el número de moles de la especie  $j$  por unidad de volumen de mezcla (concentración molar). De aquí, que el sistema se pueda representar con una matriz de los coeficientes estequiométricos de  $N \times M$ , en la cual las filas representan a las especies y las columnas a las reacciones involucradas. La velocidad de reacción de la especie  $k$  por la reacción  $i$  resulta:

$$\dot{\omega}_{k,i} = \dot{C}_{k,i} = \left( \frac{dC_k}{dt} \right)_i = (\nu''_{ki} - \nu'_{ki}) \left[ k_i^f \prod_{j=1}^N (C_j)^{\nu'_{kj}} - k_i^b \prod_{j=1}^N (C_j)^{\nu''_{kj}} \right] \quad (3.63)$$

<sup>12</sup>Una ODE *stiff* o rígida, es aquella que presenta escalas de variación distintas en la variable independiente. Esto hace que los algoritmos numéricos convencionales se hagan inestables, por lo tanto, se requieren métodos especiales para tratarlas. En lo que respecta a la cinética química, la rigidez tiene su origen en la dependencia en la temperatura de las velocidades de reacción.

para  $i = 1, 2, \dots, M$ . La Ec. 3.63 se formula para cada especie y reacción incluida en el modelo químico, lo que resulta en un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias *stiff*, las cuales deben ser resueltas utilizando un método que garantice estabilidad numérica.

Como se mencionó antes, para modelar la combustión metano-aire se requieren alrededor de 53 especies y 800 reacciones elementales<sup>13</sup>, en consecuencia sería necesario solucionar sistemas de 53 ecuaciones diferenciales ordinarias (ODEs) en cada celda de la malla y por cada paso temporal  $53 \times N_c$  ( $N_c$ : cantidad de celdas en la grilla). Con todas las reacciones elementales y sus correspondientes *rates*, se construyen los términos que definen las ODEs que una vez solucionadas, proveen los términos fuentes de las ecuaciones de las especies. También son necesarias para determinar el calor generado por la combustión. No obstante, las ODEs que han sido generadas son *stiffs* y por tales circunstancias, siempre se trata de reducir su número a los efectos de disminuir el costo computacional, lo cual conlleva a la utilización de modelos cinéticos simplificados como los descritos en la Sección.3.5

De lo expuesto, se concluye que para evaluar las velocidades de reacción de las especies se requiere resolver un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias de tipo *stiff*, donde para una reacción global y cuatro especies se llega al caso particular de un conjunto de 4 ecuaciones desacopladas (Sección.3.4.1). No obstante, para resolver dicho sistema ya es necesario contar con algoritmos de solución apropiados. Dentro de la versión de openFoam<sup>TM</sup> utilizada aquí se encuentran implementados actualmente los siguientes algoritmos:

- Método Runge-Kutta (RK)
- Método Kaps-Rentrop (KRR4)
- Método semi-implícito de Bulirsh-Stoer generalizado de Bader y Deuflhard (SIBS)

Para llevar a cabo esta tarea, aquí se utiliza el método SIBS debido a que proporciona una mejor relación precisión-costo computacional [34]. El método SIBS, tal cual fue comentado en la Sección.2.6.1, se basa en la extrapolación de Richardson de la solución aproximada. Dicha extrapolación de la función a integrar ( $y$ ), asume que a medida que el intervalo original (en este caso el paso de tiempo ( $\Delta t$ )) se subdivide en un número creciente de sub-pasos, la solución converge a un valor final  $y(\Delta t)$ , lo que implica decir que a medida que la subdivisión del intervalo temporal se incrementa, la calidad de la aproximación obtenida mejorará [34].

### 3.5. Modelos de Reacción para la combustión metano-aire

A continuación se presenta un resumen de las ecuaciones de reacción y sus parámetros asociados para cada modelo de los empleados aquí para la combustión metano-aire.

---

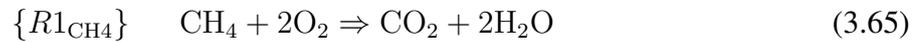
<sup>13</sup>Los coeficiente estequiométricos asociados a un modelo cinético pueden ser definidos en una matriz estequiométrica [ $\Psi$ ], la cual tendrá tantas filas como especies y columnas como reacciones, es decir, su tamaño sera  $N \times M$ , la matriz estequiométrica resulta de utilidad a los fines de ensamblar el sistema de  $N$  ODEs a nivel computacional.

### 3.5.1. Modelo de Bui-Phan

El modelo de Bui-Pan utiliza la reacción global dada por:



Debido a que el nitrógeno es inerte, la anterior ecuación de reacción se reduce a:



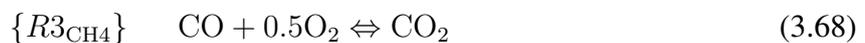
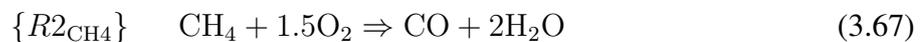
En este caso la velocidad de reacción adopta la forma:

$$\begin{aligned} GRR &= AT^n \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) [\text{CH}_4]^a [\text{O}_2]^b \\ &AT^n \exp\left(-\frac{T_a}{T}\right) [\text{CH}_4]^a [\text{O}_2]^b \end{aligned} \quad (3.66)$$

Así, las velocidades o tasas de producción/consumo de las cuatro especies involucradas están dadas por las ecuaciones Ec. 3.59a Ec. 3.59b, Ec. 3.60a y Ec. 3.60b.

### 3.5.2. Modelo de dos pasos de Westbrook y Dryer (WD)

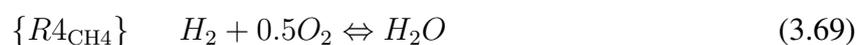
El modelo de Westbrook y Dryer propone las reacciones [3]:



El modelo de dos pasos de Westbrook y Dryer, utiliza un paso irreversible de oxidación del metano ( $\{R2_{\text{CH}_4}\}$ ) y busca incluir, al menos de forma parcial, la naturaleza secuencial de la combustión de hidrocarburos mediante la inclusión de un nuevo paso de oxidación reversible del monóxido de carbono ( $\{R3_{\text{CH}_4}\}$ ). Los valores de los parámetros para la ecuación de Arrhenius se toman de los datos originales proporcionados por Westbrook y Dryer para ( $\{R2_{\text{CH}_4}\}$ )[3], mientras que para ( $\{R3_{\text{CH}_4}\}$ ) se hace uso de los parámetros modificados por Andersen con lo que se espera garantizar una buena aproximación a los valores de equilibrio del CO y CO<sub>2</sub> [35] (ver Tab. 3.2).

### 3.5.3. Modelo de dos pasos de Westbrook y Dryer Modificado (WDM)

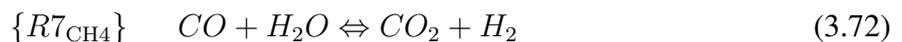
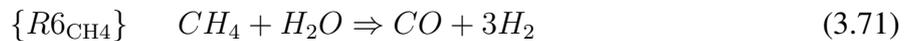
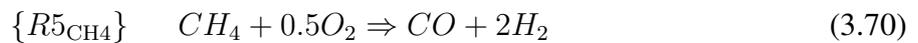
La concentración inicial de CO<sub>2</sub> condiciona el proceso de oxidación del monóxido de carbono, a su vez el agua actúa como un tercer cuerpo que también tiene influencia en dicho proceso de oxidación. Wang propone entonces incluir un paso de oxidación para el hidrógeno [4]. De esta forma al modelo de Westbrook and Dryer se le añade una nueva reacción reversible [36, 37]:



Los parámetros para el paso de avance se toman de [36, 37] mientras que para el paso de retroceso se adoptan los modificados por Wang [4] (ver Tab. 3.2).

### 3.5.4. Modelo de cuatro pasos de Jones and Lindstedt (JL)

El modelo de Jones and Lindstedt utiliza las reacciones [38]:



El modelo de Jones y Lindstedt fue desarrollado para llamas no pre-mezcladas. La reacción ( $\{R5_{CH_4}\}$ ) es dominante en mezclas pobres, mientras que ( $\{R6_{CH_4}\}$ ) muestra un papel preponderante en mezclas ricas. Los parámetros de avance para la oxidación del monóxido de carbono y del hidrógeno (reacciones ( $\{R7_{CH_4}\}$ ) y ( $\{R4_{CH_4}\}$ )) fueron propuestos por Jones [38] y Marinov [36, 37] respectivamente. Para las reacciones de retroceso se utilizan los datos calculados por [4] utilizando ajustes polinómicos de datos experimentales [4]. Los datos para calcular las velocidades de reacción y las sus formas particulares para cada modelo se muestran en la Tab. 3.2

Reacción	A	$n$	$T_a$	Tasa (Rate)	ref.
$R1_{CH_4}$	$5 \times 10^{11}$	0	14950	$[CH_4][O_2]$	[2]
$R2_{CH_4}$	$5.03 \times 10^{11}$	0	24056	$[CH_4]^{0.7}[O_2]^{0.8}$	[3]
$R3f_{CH_4}$	$2.24 \times 10^6$	0	5032	$[CO][O_2]^{0.25}[H_2O]^{0.5}$	[35]
$R3b_{CH_4}$	$1.14 \times 10^{13}$	-0.97	39452	$[CO_2][O_2]^{-0.25}[H_2O]^{0.5}$	[35]
$R4f_{CH_4}$	$5.69 \times 10^{11}$	0	17609	$[H_2][O_2]^{0.5}$	[36, 37]
$R4b_{CH_4}$	$2.51 \times 10^{14}$	0	47859	$[H_2O]$	[4]
$RAf(JL)_{CH_4}$	$7.91 \times 10^{10}$	0	17609	$[H_2][O_2]^{0.5}$	[36, 37]
$RAb(JL)_{CH_4}$	$3.48 \times 10^{13}$	0	47907	$[H_2O]$	[4]
$R5f_{CH_4}$	$4.4 \times 10^{11}$	0	15095.7	$[CH_4]^{0.5}[O_2]^{1.25}$	[38]
$R6f_{CH_4}$	$3 \times 10^8$	0	15095.7	$[CH_4][H_2O]$	[38]
$R7f_{CH_4}$	$2.75 \times 10^9$	0	10063.8	$[CO][H_2O]$	[38]
$R7b_{CH_4}$	$6.74 \times 10^{10}$	0	13688	$[CO_2][H_2]$	[4]

Tabla 3.2: Datos de Arrhenius para los diferentes modelos de reacción metano-aire

## 3.6. Interacción química-turbulencia: el modelo PaSR

Desde el punto de vista de recursos computacionales, resolver por completo la estructura turbulenta de una llama difusiva, es un proyecto, al menos por ahora inviable [30]. Por lo tanto se introducen modelos para la turbulencia (Sección.3.3), para las reacciones químicas involucradas (Sección.3.4) y también para sus interacciones. En los procesos químicos sería necesario considerar tamaños de celda varios órdenes de magnitud menores a los que hoy en día son normalmente

utilizados en una simulación, esto se asocia con las pequeñas escalas en la compleja estructura de la llama.

Un proceso de combustión turbulenta se ve influenciado tanto por los efectos de la química en la turbulencia, como de la turbulencia en los procesos químicos. En particular la estructura de la turbulencia se ve modificada por la alta aceleración del flujo a través del frente de llama, mantenida por la fuerte liberación de energía debida al proceso de combustión y por los cambios en la viscosidad vinculados con los correspondientes cambios de temperatura. Por otra parte, los procesos químicos y por ende la estructura de la llama, se ven afectados por la turbulencia en cuanto actúan sobre los procesos de mezcla entre las diferentes especies involucradas [18]. Para modelar la interacción química-turbulencia se utilizará el modelo *Partially Stirred Reactor* (PaSR) [39].

El modelo PaSR considera que una llama real es mucho más delgada que cualquier celda computacional, de acuerdo a esto, suponer que el volumen de reactantes contenidos en una celda reaccionan homogéneamente estaría alejado de la realidad. En consecuencia se adopta un modelo que supone que la concentración de reactantes contenida en la celda computacional reacciona de manera parcial.

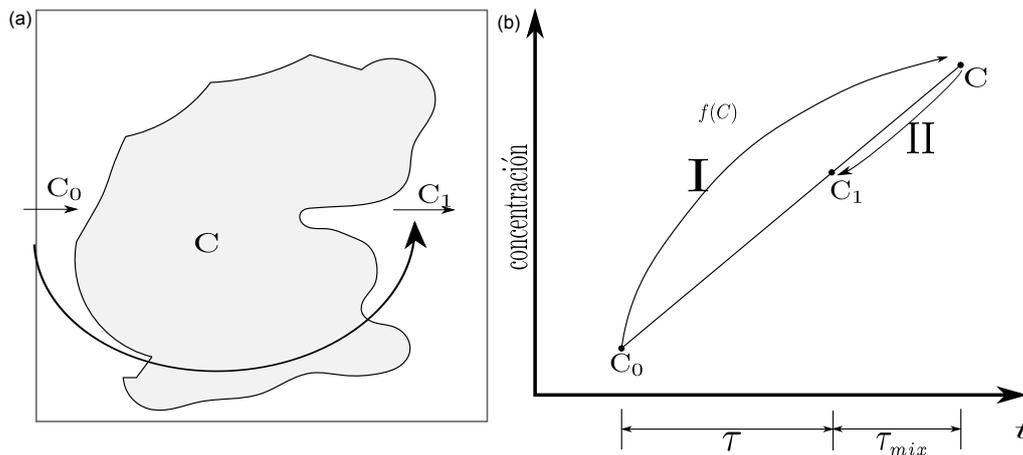


Fig. 3.2: Concepto del modelo PaSR

Considérese la Fig. 3.2, la cual es útil para introducir el concepto del modelo PaSR. El modelo considera que la celda computacional puede ser dividida en dos zonas, una zona reactiva y otra que no lo es. La zona reactiva es tratada como un reactor perfecto (PSR) cuya composición es homogénea, con lo que se evita considerar cualquier tipo de fluctuación en el cómputo de los términos fuente relacionados con las tasas químicas [30]. Con este modelo se caracteriza información generada a escala de la sub-grilla reactiva con la escala de la grilla computacional, siempre que pueda responderse a las preguntas: ¿ Cuán grande es la fracción de mezcla que reacciona y qué gobierna su composición ?.

Antes de iniciar el análisis, es pertinente definir las siguientes cantidades para cada una de las especies:

$C_0$  : Concentración media en la entrada de la celda. Puede ser considerada como la concentración inicial promedio en la celda.

$C_1$  : Concentración media a la salida de la celda (reactor). Se puede considerar como tal a la concentración media en la celda cuando se completa el proceso de reacción.

$C$  : Concentración desconocida a un nivel sub-grilla. Corresponde a la fracción de la celda que se comporta como un reactor perfecto.

Mientras la concentración cambia de  $C_0$  a  $C_1$ , la velocidad de cambio de la concentración de una especie  $k$ , en un tiempo  $\tau$  puede ser escrita como:

$$\frac{dC^k}{dt} = \frac{C_1^k - C_0^k}{\tau} \quad (3.74)$$

donde  $\tau = \Delta t + \tau_c$ ,  $\tau_c$  es el tiempo químico y  $\Delta t$  el paso de tiempo computacional. Como se ilustra en la Fig. 3.2, los cambios en la concentración ocurren según los procesos I y II que suceden en paralelo y expresan lo siguiente:

- I: La concentración cambia de  $C_0$  a  $C$  a medida que la reacción tiene lugar.
- II: Debido a la turbulencia, la concentración reactiva  $C$  se mezcla con la no reactiva  $C_0$ , dando lugar a la concentración media  $C_1$ .

Suponiendo que las funciones  $f(C^k)$  que describen el proceso de  $C$  a  $C_0$  y desde  $C$  a  $C_1$ , son las mismas para todas las especies y que las pendientes de la parte reactiva y de mezcla son idénticas, entonces se puede escribir

$$\frac{dC}{dt} = \frac{C_1^k - C_0^k}{\tau} \quad (3.75)$$

$$\frac{dC}{dt} = \frac{C^k - C_1^k}{\tau_{mix}} \quad (3.76)$$

De las Ec. 3.75 y Ec. 3.76 se obtiene:

$$\frac{C_1^k - C_0^k}{\tau} = \frac{C^k - C_1^k}{\tau_{mix}} \quad (3.77)$$

y reorganizando la Ec. 3.77 es posible escribir:

$$C_1^k = \kappa C^k + (1 - \kappa) C_0^k \quad (3.78)$$

designándose con  $\kappa$  a:

$$\kappa = \frac{\tau}{\tau + \tau_{mix}} \quad (3.79)$$

donde  $\kappa$  se conoce como **volumen reactivo de la celda** y cuantifica la interacción de los fenómenos turbulentos y los procesos químicos.

El tiempo químico es inversamente proporcional a la velocidad de reacción, es decir:

$$\tau_c \sim \dot{\omega}^{-1} \quad (3.80)$$

Atendiendo a que  $\dot{\omega}_k = \dot{\omega}_k(C, T)$ , el tiempo químico<sup>14</sup> de la especie  $k$  se define como la inversa de la derivada con respecto a la concentración de la velocidad de reacción de dicha especie [39]

$$\frac{1}{\tau_{c,k}} = -\frac{\partial \dot{\omega}_k(C_k)}{\partial C_k} \quad (3.81)$$

<sup>14</sup>En la literatura concerniente a la combustión se habla de tiempo químico y de escala temporal química como términos equivalentes.

Utilizando la Ec. 3.77 y la Ec. 3.81 es posible escribir:

$$\dot{\omega}_k(C) = \dot{\omega}_k(C_1) - \frac{C - C_1}{\tau_c} \quad (3.82)$$

Combinando las ecuaciones Ec. 3.78 y Ec. 3.82 se tiene:

$$\dot{\omega}_k(C_1) = (C_1 - C_0) \left( \frac{1}{\tau} - \frac{1 - \kappa}{\kappa \tau_c} \right) \quad (3.83)$$

Luego de reorganizar la Ec. 3.83, el cambio de concentración resulta:

$$\dot{\omega}_k(C) = \kappa \dot{\omega}_k(C_1) \quad (3.84)$$

con  $\kappa$  dado por:

$$\kappa = \frac{\tau_{res} + \tau_c}{\tau_{res} + \tau_c + \tau_{mix}} \quad (3.85)$$

done  $\tau_{res}$  es el tiempo de residencia, el cual hace referencia al tiempo que permanecen el oxidante y el combustible en el reactor (celda), éste es igual en magnitud al paso de tiempo computacional  $\Delta t$ .  $\tau_c$  es el tiempo químico y se define teniendo en cuenta las escalas temporales características de las reacciones que intervienen, físicamente corresponde al tiempo necesario para que las reacciones entre las especies se completen.  $\tau_{mix}$  es el tiempo de mezcla, está relacionado con el proceso de mezcla entre especies y para determinarlo existen distintos enfoques, todos ellos relacionados con las diferentes escalas temporales asociadas a la turbulencia [31].

El tiempo químico debe ser seleccionado entre las velocidades de reacción que mejor representen los cambios del sistema propuesto, aquí las velocidades de reacción del combustible y el oxidante serán empleadas para tal propósito [39]:

$$\tau_c^{-1} = \max \left\{ -\frac{\dot{\omega}_{fuel}}{\rho_{fuel}}, -\frac{\dot{\omega}_{O_2}}{\rho_{O_2}} \right\} \quad (3.86)$$

En cuanto al tiempo de mezcla, debido a que se considera que el proceso de combustión sucede en un ambiente con un elevado nivel de turbulencia, se puede pensar que los mecanismos preponderantes en este proceso provienen principalmente de la influencia ejercida por la difusión turbulenta. De acuerdo con esto, utilizando la información proveniente del modelo de turbulencia es posible establecer una relación entre sus variables para (ver Sección.3.3) determinar  $\tau_{mix}$  de la siguiente manera [30]:

$$\tau_{mix} = C_{mix} \sqrt{\frac{\mu_{eff}}{\rho \varepsilon}}$$

donde  $C_{mix}$  es el coeficiente de mezcla. Nordin [30] mostró que valores apropiados para el coeficiente de mezcla se encuentran dentro del rango  $0.001 \leq C_{mix} \leq 0.3$ , y en [40] se muestra por medio de experimentos numéricos que la influencia de  $C_{mix}$  es mínima en los resultados, por lo tanto, aquí se toma  $C_{mix} = 0.1$ .

En lo que respecta al tiempo químico y a la definición del volumen reactivo de la celda, cabe notar que  $\lim_{\tau_c \rightarrow \infty} \kappa = 1$ , lo que indica que no ocurren reacciones químicas y, en consecuencia, la composición de los reactantes permanece congelada (*frozen*) según proporciones definidas por la mezcla sin actividad química. Si el tiempo químico  $\tau_c \rightarrow 0$ , las reacciones son extremadamente rápidas y se alcanza el estado de equilibrio químico entre reactantes y productos. Cuando existe equilibrio químico  $\kappa < 1$ , y su valor es función de la relación  $\tau_c/\tau_{res}$

$$\tau_c = 0 \rightarrow \kappa = \frac{1}{1 + \frac{\tau_{mix}}{\tau_{res}}} \quad (3.87)$$

Si se tiene en cuenta un proceso químico en el que sólo interviene una reacción global, el término fuente de la ecuación de conservación para la especie  $k$  (Ec. 3.24) puede ser escrito

$$\bar{\dot{\omega}}_k = \kappa W_k \dot{C}_k \quad (3.88)$$

El calor liberado por la combustión ( $\bar{\dot{\omega}}_T$ ) en la ecuación de la energía (Ec. 3.34) puede ser determinado por

$$\bar{\dot{\omega}}_T = \sum_{k=1}^N \Delta h_{f,k}^{\circ} \bar{\dot{\omega}}_k \quad (3.89)$$

donde  $\Delta h_{f,k}^{\circ}$  es el calor de formación de la especie  $k$ . Téngase en cuenta que por consistencia con las unidades de la ecuación de la energía  $\bar{\dot{\omega}}_T$  debe expresarse en  $J m^{-3} s^{-1}$ .

### 3.7. Modelo termofísico

En las ecuaciones de gobierno se encuentran involucradas las siguientes propiedades termofísicas del fluido de trabajo:  $C_p$ ,  $\mu$ ,  $\lambda$  y  $\alpha$ . Dichas propiedades deben ser actualizadas en función del cambio en la temperatura. Para llevar a cabo este procedimiento, aquí se utilizan las tablas JANAF para el calor específico, la fórmula de Eucken modificada para la conductividad y la ley de Sutherland para la viscosidad [41–43]. De acuerdo a la ley de Sutherland el coeficiente de viscosidad dinámica molecular varía en función de la temperatura según:

$$\mu = \frac{A_s \sqrt{T}}{1 + T_s T^{-1}} \quad (3.90)$$

donde  $T$  es la temperatura,  $T_s$  es la temperatura de Sutherland y  $A_s$  la constante de Sutherland. Por otro lado,  $C_p$  puede ser actualizado en función de la temperatura utilizando las tablas JANAF<sup>15</sup>:

$$C_{p,k}^{m,\circ} = R_u (a_{0k} + a_{1k}T + a_{2k}T^2 + a_{3k}T^3 + a_{4k}T^4) \quad (3.91)$$

donde  $R_u = 8314.15 J/molK$  es la constante universal de los gases, y  $a_{ik}$  para  $i = 0, 2 \dots 6$  son los coeficientes de ajuste del polinomio, los cuales se basan en correlaciones empíricas. El cómputo del calor específico a presión constante en base molar  $C_{p,k}^{m,\circ}$  se realiza dentro del *software* con la subclase `Janaf.H`. El calor específico a presión constante de la mezcla se determina teniendo en cuenta los aportes de cada una de las especies, así

$$C_p = \sum_{k=1}^N C_{p,k}^m W_k^{-1} Y_k = R_u \sum_{k=1}^N W_k^{-1} Y_k \left\{ \sum_{r=0}^4 a_{r,k} T^r \right\} \quad (3.92)$$

El calor específico a volumen constante a su vez se calcula de la siguiente forma:

$$C_v = C_p - \frac{R_u}{\bar{W}} \quad (3.93)$$

donde el segundo término del miembro derecho es la contante de los gases para la mezcla y el denominador de dicho término es el peso molecular medio ( $\bar{W}$ ). La transformación de base molar a base másica se realiza utilizando la subclase `specieThermo.H` de `openFoam`<sup>TM</sup>.

<sup>15</sup>Los superíndices  $^{\circ}$  y  $^m$  hacen referencia respectivamente, a que se consideran condiciones de presión estándar  $p = 101.325 \text{ kPa}$  y se utiliza base molar.

La conductividad térmica  $\lambda$  se determina utilizando la fórmula de Eucken modificada [43]:

$$\lambda = \mu C_v \left( 1.32 + \frac{1.77R}{C_v} \right) \quad (3.94)$$

La difusividad térmica  $\alpha$  resulta dada a partir de:

$$\alpha = \frac{\lambda}{C_p} \quad (3.95)$$

El cómputo del coeficiente de viscosidad, la conductividad y difusividad térmica se realiza utilizando la subclase `sutherland.H`. Por otro lado, la compresibilidad  $\psi$  es necesaria para resolver la ecuación de presión derivada al utilizar el algoritmo PISO, esta propiedad queda determinada de acuerdo a:

$$\psi = (RT)^{-1} \quad (3.96)$$

Análogamente, utilizando la ecuación de estado (Sección.5.3.4) la densidad resulta:

$$\rho = \psi p \quad (3.97)$$

Los cálculos introducidos en las Ec. 3.94-Ec. 3.97 se realizan utilizando la subclase `perfectGas.H`.

### 3.8. Implementación numérica

En esta sección se describe de manera sucinta cómo con herramientas provistas por la librería `openFoamTM`, se puede construir un ejecutable aplicable a la simulación de una combustión difusiva turbulenta con un proceso químico controlado por reacciones con velocidades finitas. El transporte fluidodinámico es tratado empleando el algoritmo de acoplamiento presión-velocidad conocido como PISO en su versión aplicable a flujo compresible.

En este caso las ecuaciones formuladas para cada variable dependiente son resueltas de manera segregada, para luego aplicar iteraciones correctivas hasta lograr la convergencia deseada. Esta técnica es aceptable mientras no exista un fuerte acoplamiento entre componentes [44].

Para determinar la energía turbulenta  $k$  y su disipación  $\epsilon$ , se resuelven las respectivas ecuaciones de transporte descritas en la Sección.3.3. Los términos fuentes en la ecuación de las especies y la energía generados por las velocidades de reacción se determinan según lo expuesto en la Sección.3.6.

Teniendo en cuenta el entorno de programación que brinda `openFoamTM` las ecuaciones de conservación (masa, especies, momento, presión y energía) pueden ser escritas como: `rhoEqn.H`, `YEqn.H`, `UEqn.H`, `pEqn.H` y `hSEqn.H`, donde cada uno de estos archivos de cabecera contienen la correspondiente implementación numérica de cada una de ellas. De forma similar, la parte del código que resuelve la parte química y determina los términos fuentes para las ecuaciones de las especies, la energía y además tiene en cuenta la interacción química-turbulencia se implementa en `chemistry.H`. Los campos de las variables involucradas en la simulación  $(Y_k, \bar{p}, \tilde{\mathbf{U}}, \tilde{h}_s, \tilde{\rho}, \tilde{T}, \kappa, \psi)$  son inicializados mediante el archivo de cabecera `createfields.H`, el cual también se encarga de cargar los modelos de turbulencia, termofísico y químico en tiempo de ejecución. A continuación y a modo de ejemplo se incluye la implementación en el ejecutable de la ecuación de la energía en términos de la entalpía sensible.

```

1 {
2 fvScalarMatrix hsEqn (
3     fvm::ddt(rho, hs) + mvConvection->fvmDiv(phi, hs)
4     - fvm::laplacian(turbulence->alphaEff(), hs)
5     == DpDt + chemistrySh
6     );
7     hsEqn.relax();
8     hsEqn.solve();
9     thermo.correct();
10    Info<< "T gas min/max = " << min(T).value() << ", "
11           << max(T).value() << endl;

```

Código 3.1: Implementación de la ecuación de la entalpía sensible en *reactingFoam*

En la línea (2) del Código 3.1 se declara por medio de la palabra clave `fvScalarField` que la ecuación será representada matricialmente como un campo escalar. A continuación, desde la línea (3) hasta la línea (5) se escribe la ecuación según lo expuesto en la Sección.B.0.9. También en la línea (5) se observa la entrada `chemistrySh`, la cual establece la evaluación de la Ec. 3.88. Finalmente, `DpDt` corresponde a la evaluación de la Ec. 3.35.

En las líneas (7-8), se pueden observar a las funciones miembro `relax()` y `solve()`, las cuales al ser aplicadas sobre el objeto `hsEqn` del tipo `fvScalarMatrix`, aplican respectivamente sub-relajación (de haber sido seleccionada en tiempo de corrida) y resuelven al sistema de ecuaciones. Luego, la función miembro `correct()` se encarga de actualizar las propiedades termodinámicas de acuerdo a lo expuesto en la Sección.3.7 y finalmente en la línea (8) se utilizan las funciones `min()` y `max()` junto con la función `Info()` para proporcionar una salida por pantalla de la temperatura máxima y mínima en el dominio de cómputo para el paso de tiempo actual. También es interesante notar que en la línea (4) aparece el puntero `turbulence`, el cual apunta hacia la función `alphaEff()` que determina el valor de la difusividad térmica efectiva teniendo en cuenta la contribución molecular (Ec. 3.95) y turbulenta (Ec. 3.33).

### 3.9. Caso de prueba: Llama D

En esta sección se describe el caso de prueba que será resuelto con el propósito de probar la funcionalidad de `openFoam™` para tratar con el fenómeno de combustión difusiva, el caso seleccionado se conoce como la llama D de Sandia Labs (*Sandia National Labs., Ca, USA*) y es considerado un *benchmark* en lo que respecta a este tipo de fenómenos.

La llama D es una llama difusiva de metano-aire encendida por un piloto, con un número de Reynolds a la salida de la boquilla de combustible de 22400, presenta un grado muy reducido de extinción local lo que hace que sea muy útil para fines de prueba con modelos que no incluyen un criterio para cuantificar dicho efecto <sup>16</sup> [45]. Una característica interesante de este *benchmark* es la gran cantidad de estudios previos y datos experimentales disponibles [46–49] ([www.sandia.gov/TNF/DataArch/FlameD.html](http://www.sandia.gov/TNF/DataArch/FlameD.html)).

<sup>16</sup>La extinción local tiene lugar cuando localmente quedan remanentes del hidrocarburo que no llegan a reaccionar, lo cual está asociado con fuertes niveles de turbulencia en el flujo.

La llama piloto es resultado de la combustión de una mezcla pobre<sup>17</sup> ( $\phi = 0.77$ ) de metano y aire. En la simulación numérica se asumirá al piloto como una inyección de gases calientes producto de la combustión. La salida del quemador está posicionada 15 cm por encima de la sección de salida de un túnel de viento que proporciona el flujo de aire principal. Las dimensiones del quemador y de la sección del túnel utilizados para los experimentos son:

- Diámetro de la entrada de combustible:  $d_i = 0.0072 \text{ m}$
- Diámetro exterior del anillo piloto:  $d_p = 0.0182 \text{ m}$
- Dimensión lateral de la sección transversal del túnel de viento:  $l = 0.3 \text{ m}$

Debido a que las paredes del quemador son muy delgadas, en la confección del dominio de cómputo se considera que dichas paredes no tienen espesor. Las composiciones del aire, combustible y piloto en fracciones de masa son las indicadas en la Tab. 3.3.

	Air	Jet	pilot-BP	pilot-WD	pilot-WDM-JL
N <sub>2</sub>	77	64.73	74.2	73.79	73.72
O <sub>2</sub>	23	19.66	5.4	5.4	5.4
CH <sub>4</sub>	0	15.61	0	0	0
H <sub>2</sub> O	0	0	9.42	9.42	9.42
CO <sub>2</sub>	0	0	10.98	10.98	10.98
CO	0	0	0	0.407	0.407
H <sub>2</sub>	0	0	0	0	0.0129

Tabla 3.3: Composiciones en porcentajes de la fracción de masa de cada especie

Nótese que se modifican la fracción de masa de cada especie a las condiciones de cada uno de los modelos cinéticos considerados (Sección.3.5.1-Sección.3.5.4).

### 3.9.1. Datos para los modelos termofísico, químico y de turbulencia

Para evaluar las velocidades de reacción de las diferentes especies se utiliza la ecuación de Arrhenius (Ec. 3.66) la cual involucra conocer al factor pre-exponencial ( $A$ ), el exponente de la temperatura ( $n$ ), la temperatura de activación ( $T_a$ ) y los exponentes  $a$  y  $b$  para las reacciones de cada modelo, estos datos se presentan en la Tab. 3.2.

También, es necesario proporcionar los valores del coeficiente de Sutherland, la temperatura de Sutherland y los coeficientes  $a_{ik}$  que aproximan a  $C_p$  en función de  $T$  (Ec. 3.91) para cada una de las especies involucradas en el proceso, esta información se introduce en el caso a simular por medio de un archivo de texto denominado `thermo.compressibleGas`

(Lista de entrada 3.2).

```
1 (
2 \* bloque especie k
```

<sup>17</sup> $\phi$  es la relación de equivalencia aire-combustible, dicha relación es pobre cuando se encuentra dentro del intervalo  $0 < \phi < 1$ , lo que indica que existe exceso de aire en la mezcla.

```

3 Namek nk Wk Tl,k TH,k Tc,k
4 a0k a1k a2k a3k a4k a5k a6k a0k a1k a2k a3k a4k a5k a6k
5 As,k Ts,k
6 * \
7
8 O2 1 31.9988 200 5000 1000
9 3.69758 0.00061352 -1.25884e-07 1.77528e-11 -1.13644e-15
10 -1233.93 3.18917 3.21294 0.00112749 -5.75615e-07 1.31388e-09
11 -8.76855e-13 -1005.25 6.03474
12 1.75278331E-6 139
13
14 H2O 1 18.0153 200 5000 1000
15 2.67215 0.00305629 -8.73026e-07 1.201e-10 -6.39162e-15
16 -29899.2 6.86282 3.38684 0.00347498 -6.3547e-06 6.96858e-09
17 -2.50659e-12 -30208.1 2.59023
18 1.67212000E-06 170.672
19
20 CH4 1 16.0428 200 6000 1000
21 1.63543 0.0100844 -3.36924e-06 5.34973e-10 -3.15528e-14
22 -10005.6 9.9937 5.14988 -0.013671 4.91801e-05 -4.84744e-08
23 1.66694e-11 -10246.6 -4.64132
24 1.25136501E-6 222
25
26 CO2 1 44.01 200 5000 1000
27 4.45362 0.00314017 -1.27841e-06 2.394e-10 -1.66903e-14
28 -48967 -0.955396 2.27572 0.00992207 -1.04091e-05 6.86669e-09
29 -2.11728e-12 -48373.1 10.1885
30 1.50342510E-6 197.7
31
32 N2 1 28.0134 200 5000 1000
33 2.92664 0.00148798 -5.68476e-07 1.0097e-10 -6.75335e-15
34 -922.798 5.98053 3.29868 0.00140824 -3.96322e-06 5.64152e-09
35 -2.44486e-12 -1020.9 3.95037
36 1.40097973E-06 107
37
38 CO 1 28.01606 200 3500 1000
39 2.71519 0.00206253 -9.98826e-07 2.30053e-10 -2.03648e-14
40 -14151.9 7.81869 3.57953 -0.000610354 1.01681e-06 9.07006e-10
41 -9.04424e-13 -14344.1 3.50841
42 1.67212e-06 105.2
43
44 H2 1 2.01594 200 3500 1000
45 3.33728 -4.94025e-05 4.99457e-07 -1.79566e-10 2.00255e-14
46 -950.159 -3.20502 2.34433 0.00798052 -1.94782e-05 2.01572e-08
47 -7.37612e-12 -917.935 0.68301
48 1.67212e-06 170.672
49 )

```

Lista de entrada 3.2: Entrada de datos termofísicos.

El tipo de formato de Lista de entrada 3.2, es el bien conocido formato de Chemkin<sup>TM</sup>[50]. Cada bloque corresponde a los datos de cada especie; en la primera línea de cada bloque se declara el nombre de la especie, seguido por la cantidad de moles, peso molecular y el intervalo de temperatura de validez para la interpolación del  $C_p$ , es decir el límite inferior ( $T_L$ ) y el límite superior ( $T_H$ ); a continuación se listan siete coeficientes de ajuste  $a_{ki}$  para  $T_L \leq T \leq T_c$  y luego los siete coeficientes correspondientes al intervalo  $T_c \leq T \leq T_H$  (aquí  $T_c$  es la temperatura de empalme para ambas interpolaciones); finalmente se incluye el valor del coeficiente y la temperatura de Sutherland  $A_s$  y  $T_s$ .

La información correspondiente a la reacción global (Ec. 3.64) se introduce en un archivo de texto `reactions`, en el cual se declaran las especies, el tipo de reacción, la ecuación de la reacción, temperatura de activación, coeficiente de la temperatura y factor pre-exponencial (Lista de entrada 2.3)

```

1 (
2 species (O2 H2O CH4 CO2 N2);
3 reactions (
4     irreversibleArrheniusReaction
5     CH4 + 2O2 = CO2 + 2H2O
6     (5.2e16 0 14906)
7 );
8 )

```

Lista de entrada 3.3: Entrada de los datos de las reacciones para *reactingFoam*

El modelo químico tal como fue mencionado en las Sección.3.4.1 y Sección.3.4.2 requiere solucionar un sistema de *stiff* ODEs para obtener las velocidades de reacción asociadas a la producción y consumo de cada una de las especies.

Aquí se utiliza el método SIBS [34] para integrar las ODEs del modelo químico, y se debe proporcionar el paso de integración temporal inicial (a denominarse de ahora en más  $\Delta\tau$ ). Se adopta como paso de tiempo inicial  $\Delta\tau = 1 \times 10^{-7}$ . En general se debe satisfacer que  $\Delta\tau < \Delta t$  siendo  $\Delta t$  el paso de tiempo utilizado para la evolución del sistema fluidodinámico. Dentro de la clase `ODEChemistryModel` de `openFoamTM` se implementa un procedimiento que, en función de la escala temporal química, ajusta el paso de tiempo en el algoritmo de integración SIBS garantizando la selección de un paso de tiempo apropiado y evitando el uso de pasos muy cortos que conllevarían costos computacionales innecesarios.

El modelo de turbulencia se selecciona utilizando un archivo de texto denominado `turbulence-Properties` el cual contiene la información referente al modelo de turbulencia a utilizar. El modelo se selecciona utilizando la palabra clave `simulationType` seguida por la palabra que identifica el tipo de modelo dentro de los provistos por `openFoamTM` (dicha palabra para el caso de los modelos RANS es `RASModel`). Puesto que dentro de la familia de modelos RANS existen distintas variantes, se debe indicar explícitamente el modelo seleccionado, esto se lleva a cabo mediante el archivo `RASproperties`, dentro del cual se indica, además del modelo, los coeficientes de cierre y si se requiere o no que el *solver* genere una salida para las variables asociadas a la turbulencia. Este archivo de entrada se puede observar en la Lista de entrada 3.4.

```

1 RASModel kEpsilon;
2 printCoeffs on;
3 turbulence on;
4 laminarCoeffs {

```

```

5 }
6 kEpsilonCoeffs {
7   Cmu          0.09;
8   C1           1.44;
9   C2           1.92;
10  C3           -0.33;
11 }

```

Lista de entrada 3.4: Entrada de los datos para el modelo de turbulencia  $k - \varepsilon$

Cabe mencionar que no siempre es necesario explicitar los coeficientes de cierre del modelo, dado que la clase que define a cada modelo asigna a dichos coeficientes valores por defecto. Sólo se deben indicar cuando se deseen utilizar valores diferentes.

### 3.9.2. Generación de la malla

El dominio computacional se construye teniendo en cuenta las dimensiones del quemador y se extiende  $0.6\text{ m}$  en la dirección axial y  $0.15\text{ m}$  en la radial, para la construcción de la malla se utiliza el mallador nativo de openFoam<sup>TM</sup> *blockMesh*. La malla se elabora con tres bloques que se extienden en la dirección axial y cuya dimensión radial se determina de acuerdo a la zona que representan. El primer bloque corresponde al oxidante, el segundo a la zona de la entrada de combustible y el tercero al piloto. El problema es axisimétrico y en openFoam<sup>TM</sup> puede simularse generando una malla 3D y aplicando condiciones de contorno especiales (tipo *wedge* Sección.2.8).

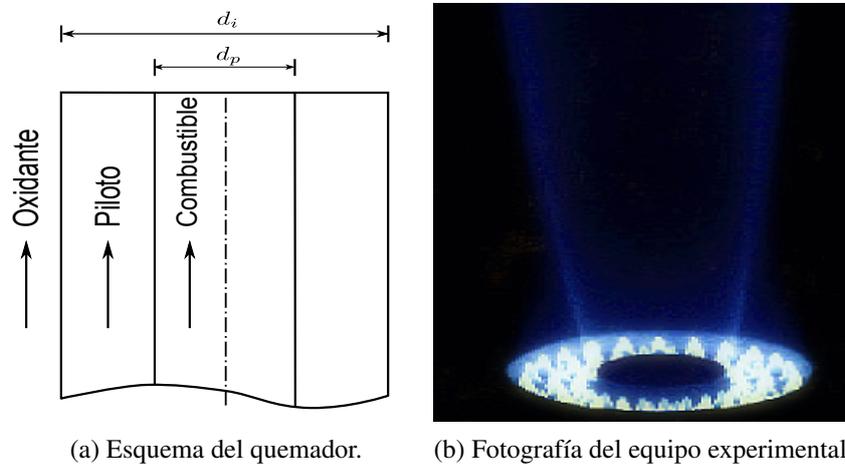


Fig. 3.3: Geometría del quemador utilizado en los experimentos de la llama D de *Sandia Labs*.

En la Fig. 3.3 se pueden observar una fotografía del equipo experimental (Fig. 3.3b) y un esquema que identifica sus dimensiones (Fig. 3.3a). Se construye la malla desde la salida del quemador utilizando tres bloques de celdas hexaédricas según lo esquematizado en la Fig. 3.4, de esta forma el bloque 3 se extiende desde la entrada del combustible sobre todo el dominio computacional, y de la misma forma lo hacen el bloque 1 en el caso del piloto y el 2 para el aire.

La naturaleza del fenómeno físico a capturar indica que se requiere mayor resolución en las zonas cercanas al ingreso del combustible, oxidante y del piloto, por lo tanto se utiliza la función *grading* de *blockMesh* para acumular celdas en zonas cercanas a las entradas y en la zona circundante al eje de simetría. Así, el tamaño de las celdas varía en dirección axial desde un mínimo de

$0.383 \times 10^{-3} m$ , en zonas cercanas a las entradas, hasta un máximo de  $3,83 \times 10^{-3} m$  en la sección de salida. En la dirección radial las celdas varían desde un mínimo de  $0.12 \times 10^{-3} m$ , en las celdas del bloque 2, hasta un máximo de  $1.2 \times 10^{-3} m$  en el límite exterior del dominio computacional. La variación del tamaño de las celdas del dominio computacional y la aplicación de la condición de contorno tipo *wedge*, dan como resultado una malla con 40000 celdas hexaédricas (Fig. 3.5). Por último se comprueba la calidad de la malla por medio de la utilidad *checkMesh*, la cual verifica si la malla cumple con las mínimas condiciones de calidad en lo que se refiere a parámetros como la distorsión (*skewness*), ortogonalidad, determinante<sup>18</sup>, volumen mínimo de las celdas, etcétera ([52]). Al realizar esta operación se determinó que la malla era adecuada para la simulación a efectuar.

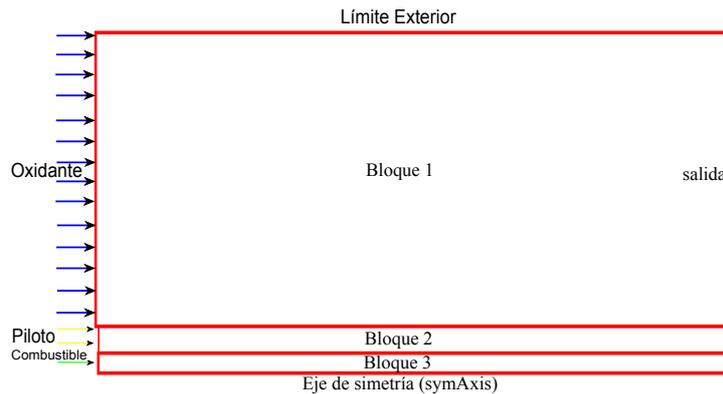
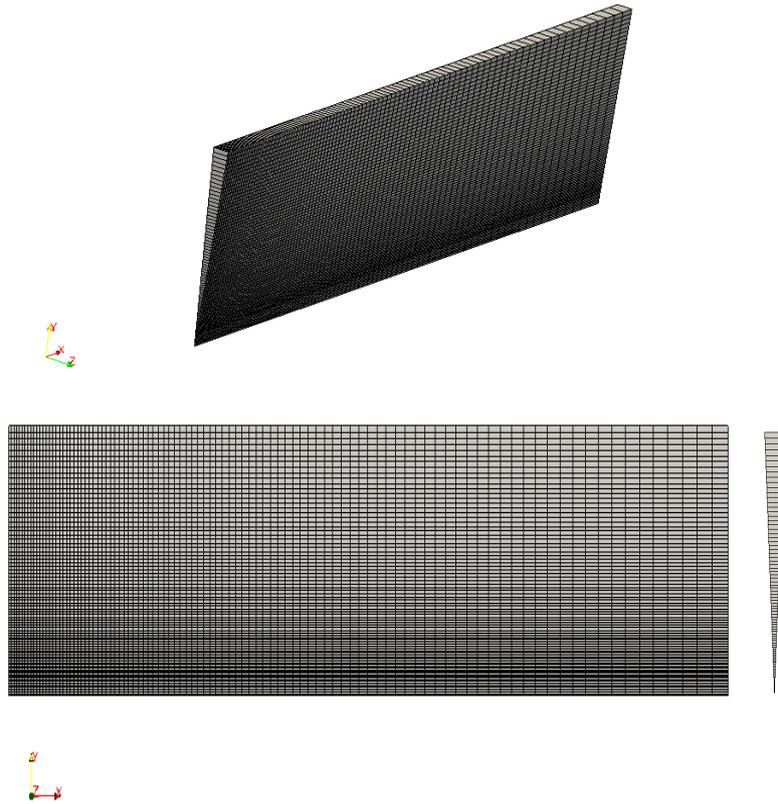


Fig. 3.4: Esquema del mallado por bloques para la llama D de *Sandia Labs*.

<sup>18</sup>En el ámbito de la generación de mallas, el determinante se define como el cociente entre los determinantes mínimo y máximo de la matriz Jacobiana de cada punto que define una celda de la malla [51]

Fig. 3.5: Malla axisimétrica llama D de *Sandia*

### 3.9.3. Condiciones de borde e iniciales

Las condiciones de borde e iniciales para la velocidad, presión y temperatura se imponen de conformidad con lo expuesto en [45]. Las respectivas condiciones para las variables asociadas al modelo de turbulencia (energía cinética turbulenta y su disipación) se calculan en términos de la intensidad de la turbulencia ( $I_t$ ) y la longitud característica ( $L_t$ ), para llevar a cabo esto se utilizan las correlaciones mostradas en la Ec. 3.98 [12]:

$$\begin{aligned} I_t &= 0.16Re^{-1/8} & \varepsilon &= C_\mu^{3/4} k^{3/2} l^{-1} \\ k &= \frac{3}{2} (UI_t)^2 & l &= 0.07L_t \end{aligned} \quad (3.98)$$

Las longitudes características de las entradas del combustible, los gases del piloto y el oxidante (aire), se definen de la siguiente manera: combustible, el diámetro de la boquilla de su ingreso ( $d_i$ ); gases del piloto, la diferencia de diámetros ( $d_p - d_i$ ) (Fig. 3.3a) y para el oxidante la longitud lateral ( $l$ ) de la sección del túnel. Nótese que ( $d_p - d_i$ ) y ( $l$ ) son respectivamente, el diámetro hidráulico del anillo a través del cual ingresan los gases del piloto y el diámetro hidráulico de la sección transversal del túnel.

Utilizando la ley de Sutherland se determina el coeficiente de viscosidad para la temperatura de cada gas en la entrada y con estos datos se calcula el número de Reynolds. Finalmente, se aplican las correlaciones de la Ec. 3.98 para determinar valores iniciales para las ecuaciones de conservación de la energía turbulenta y su disipación. En lo que respecta a las condiciones de borde para la fracción de masa de cada especie  $Y_k$ , estas se fijan de acuerdo a lo mostrado en la Tab. 3.3. Las condiciones de borde aplicadas a los diferentes campos en cada uno de los contornos del

dominio se pueden observar en la Tab. 3.4<sup>19</sup>. De acuerdo a lo mostrado en la Tab. 3.4, en el límite exterior se aplica condición de cero gradiente, esta condición de borde se considera apropiada puesto que en este caso el flujo no está delimitado en ese borde por ningún contorno solido, y se ha verificado numéricamente que cuando el flujo se aproxima a condiciones estacionarias, el límite exterior se comporta como una línea de corriente paralela al eje de simetría del flujo y su velocidad se mantiene cercana al valor de la velocidad de ingreso de la corriente de aire 0.9 m/s. Esto convalida la hipótesis de *free-jet* axisimétrico propuesta.

	$U_x \left[ \frac{m}{s} \right]$	p [Pa]	T [K]	Y [-]	$I_t$ [-]	$l$ [m]
Combustible	49.6	zG	291	fV	0.04553	0.000504
Aire	0.9	zG	294	fV	0.07495	0.021
Piloto	11.4	zG	1880	fV	0.06030	0.000777
Límite Exterior	zG	zG	zG	zG	zG	zG
Salida	zG	100615	zG	zG	zG	zG

Tabla 3.4: Condiciones de borde llama D de *Sandia*

Es imperativo seleccionar de forma apropiada tanto las condiciones de borde como las iniciales para las variables asociadas al modelo de turbulencia, debido a que éstas tienen un fuerte impacto en la estabilidad del proceso de cálculo y la precisión de los resultados. No sobra mencionar que, a pesar de que las correlaciones mostradas anteriormente (Ec. 3.98) fueron determinadas para patrones de flujo que no incluyen fenómenos químicos, éstas han mostrado proporcionar buenos resultados cuando son utilizadas para flujos reactivos, por lo tanto para son utilizadas aquí para inicializar los campos asociados al modelo de turbulencia.

El método numérico a utilizar es inherentemente inestacionario, por lo tanto, es necesario imponer condiciones iniciales. Dichas condiciones iniciales se toman de [45] y son:

$$\left. \begin{aligned} u(0) = 0 \text{ m/s} \quad T(0) = 300 \text{ K} \quad p(0) = 94.536 \text{ Kpa} \\ Y_{N_2}(0) = 0.77 \quad Y_{O_2}(0) = 0.23 \quad Y_k(0) = 0 \end{aligned} \right\} \quad (3.99)$$

Nótese que de todas las especies involucradas, únicamente para el oxígeno y el nitrógeno se imponen condiciones iniciales, esto equivale a suponer que inicialmente el dominio computacional contiene sólo aire, lo cual está acorde con la física del problema. Las condiciones iniciales para  $\varepsilon(0)$  y  $k(0)$  se determinan en función de la intensidad turbulenta ( $I_t$ ) y longitud característica de la turbulencia (*eddy length scale*) ( $l$ ) que fueron mostradas en la Tab. 3.4 para el flujo de aire.

### 3.9.4. Selección de los esquemas de discretización y algoritmos de solución

Los esquemas de discretización, para cada término de las ecuaciones de transporte, y los algoritmos de solución para los sistemas de ecuaciones producto de la discretización se seleccionan de acuerdo a lo expuesto en las Sección.2.4, Sección.2.5, Sección.B.0.10 y Sección.B.0.11 del Cap. 2. Los esquemas de discretización seleccionados son:

- grad(p|U) → gauss linear

<sup>19</sup>En la Tab. 3.4 las abreviaturas fV y zG corresponden respectivamente a la imposición de condiciones de borde del tipo Dirichlet (valor fijo) y Neumann (gradiente nulo).

- `div(phi|hs|Yk|k|epsilon,U) → gauss linearUpwind  
cellLimited gauss linear 1`
- `laplacian → gauss linear`
- `ddt → SLTS phi rho 0.7`
- `interpolationSchemes → linear`

Para discretizar todos los términos de las ecuaciones de transporte que involucran divergencias se seleccionó al esquema *central upwinded*, el cual de acuerdo a lo explicado en la Sección.2.4.4 requiere la evaluación del gradiente. Para evaluar los términos que gradientes se selecciona un esquema que limita el mismo de acuerdo a lo expuesto en la Sección.2.4.7, de esta forma, dados los fuertes efectos convectivos se garantiza estabilidad y además, que la solución se mantenga acotada dentro de rangos físicamente posibles. Los términos que involucran laplacianos se discretizan utilizando el esquema centrado sin aplicar ningún tipo de corrección de ortogonalidad debido a que en la etapa de chequeo de la malla no se determinó fuera necesario.

Aunque se busca la solución estacionaria, se utiliza un *solver* diseñado para obtener soluciones inestacionarias, con el fin de acelerar la convergencia hacia el estado estacionario se utiliza la técnica del paso de tiempo local estabilizado (SLTS), ésta permite avanzar temporalmente con la máxima tasa de avance permitida en cada celda <sup>20</sup>. De esta forma, los pasos de tiempo pueden variar de un punto a otro, con lo que la convergencia de la solución depende únicamente de las zonas que presentan escalas temporales con mayor magnitud [53, 54]. El esquema de avance en el tiempo implementado en openFoam™ junto con la técnica SLTS corresponde ya sea al esquema de Euler implícito o explícito (Sección.2.4.8), lo cual dependerá de si al aplicar el operador de discretización temporal éste se especifica como `fvm::ddt` o `fvc::ddt`.

La selección de los algoritmos de solución para los sistemas de ecuaciones provenientes de la discretización se realiza siguiendo los lineamientos expuestos en las Sección.2.5 y Sección.B.0.11, por lo tanto, para solucionar el sistema asociado a la ecuación de la presión (necesario por la aplicación del algoritmo PISO) se elige el método del gradiente conjugado (PCG) en conjunto con el preconditionador de Cholesky incompleto en función de que la matriz resultante en este caso es simétrica. Por otro lado, para los sistemas de ecuaciones resultado de la discretización de las ecuaciones de momento, especies, entalpía sensible, energía cinética turbulenta y su disipación, se selecciona el método del gradiente biconjugado preconditionado (PBiCG) con el preconditionador del tipo factorización LU incompleta (DILU) debido a que, en general, las matrices resultantes de ecuaciones del tipo convección/difusión no resultan ser simétricas. En ambos casos como criterio de convergencia se fija una tolerancia de  $10^{-6}$ . En lo que respecta al algoritmo de acoplamiento PISO se aplican únicamente dos pasos de corrección.

## 3.10. Resultados

Una vez construida la malla, determinadas las condiciones de borde e iniciales y definidos los archivos de entrada para la selección de los esquemas de discretización, algoritmos de solución, modelos termofísico y de turbulencia, se procede a correr un caso para cada uno de los modelos químicos:

<sup>20</sup>Téngase en cuenta que las ODEs de las reacciones químicas se resuelven de forma independiente y los tiempos fluidodinámicos son mayores que los químicos.

- BuiPhan (BP)
- Westbrook y Dryer (WD)
- Westbrook y Dryer Modificado (WDM)
- Jones and Lindstedt (JL)

Dado los requerimientos computacionales, las simulaciones se desarrollan empleando alguno de los tres *clusters* disponibles (seleccionando el mismo en función de la disponibilidad):

- *Cluster* Mendieta del Centro de Computación de Alto Desempeño (CCAD) de la UNC.
- *Cluster* SeCyT del Centro de Computación de Alto Desempeño (CCAD) de la UNC.
- *Cluster* Piluso del Datacenter del CONICET Rosario.

Para las corridas en paralelo se hace uso de la técnica de descomposición de dominio, utilizando el método de descomposición `simple` [52]. Se utiliza el objeto `adjustTimeStep` de la clase `Time`, el cual proporciona la posibilidad de imponer un número de Courant máximo (en este caso se fija  $Co \leq 0.25$ ), luego en función de éste y dimensiones características de la malla se ajusta dinámicamente el paso de tiempo fluidodinámico.

En la simulación dos tiempos de ejecución deben ser considerados como indicativos del costo computacional: primero, el tiempo computacional medio necesario para resolver las ODEs asociadas a las reacciones químicas, más el tiempo medio requerido para resolver las ecuaciones de transporte; segundo, el tiempo estimado para alcanzar la condición estacionaria.

Para el  $Co$  fijado, en la tabla Tab. 3.5 se registra el tiempo computacional empleando 8 procesadores en el *cluster* respectivo con una malla con  $NC \sim 40000$ .

Modelo Químico	Tiempo de Cómputo
BP (secyt)	11283 s
WD (mendieta)	17625 s
WDM (mendieta)	20698 s
JL (piluso)	36197 s

Tabla 3.5: Tiempos de cómputo combustión  $CH_4$  : Air para cada modelo cinético (BP,WD,WDM,JL)

A continuación se presentan resultados obtenidos para cada una de las simulaciones, se presentan los perfiles de temperatura y especies más relevantes de acuerdo a cada modelo cinético.

En la Fig. 3.7 se muestran distribuciones de temperaturas para cada modelo cinético en  $x = [0.15, 0.30, 0.45]$  para  $t = 0.5 s$  junto con los contornos respectivos, se puede observar que los contornos en la cercanía del eje de simetría indican que la llama se cierra y delimitan la geometría de la misma, de forma análoga, se observa un aumento de temperatura desde el eje de simetría en la dirección radial. En la Tab. 3.6 se muestran las máximas temperaturas para las estaciones establecidas posteriormente, se aprecia que en general para cada valor de  $x$  todos los modelos describen valores comparables y al igual que los perfiles transversales mostrados en Fig. 3.7 describen tendencias muy afines. En particular, en la zona más alejada de la influencia del piloto y de

la inyección de la mezcla, el modelo JL se desvía por casi de 100 K con respecto al valor medio (1627.37 K) registrado por los otros modelos. En la zona próxima al ingreso ( $x = 0.15 m$ ) (al igual que en la región intermedia ( $x = 0.3 m$ )) la mayor desviación corresponde a la calculada con el modelo BP.

Modelo cinético	$\max(T)(x = 0.15 m)$	$\max(T)(x = 0.3 m)$	$\max(T)(x = 0.45 m)$
BP	2213.05 K	2263.67 K	1643.58 K
WD	2121.16 K	2205.99 K	1619.98 K
WDM	2082.86 K	2147.21 K	1618.55 K
JL	2148.15 K	2166.42 K	1719.25 K

Tabla 3.6: Máxima temperatura en  $x = [0.15, 0.3, 0.45] m$  para cada modelo cinético (BP,WD,WDM,JL)

Como fue indicado en la Sección.3.9, se seleccionó la llama D de *Sandia Labs* puesto que cuentan con datos experimentales para comparar con los resultados obtenidos en la simulación. Los datos experimentales (distribuciones de las especies y temperatura) corresponden a mediciones efectuadas utilizando una combinación de las técnicas *Raman Scattering* y *Rayleigh Scattering*<sup>21</sup>. Estas técnicas de medición presentan la ventaja de evitar inconsistencias asociadas con la comparación de resultados promediados según Favre con mediciones realizadas considerando promedios según Reynolds [45]. En consecuencia directa a los datos experimentales disponibles, la llama D de *Sandia* se puede considerar como un caso testigo en lo que respecta a estudiar el impacto de las hipótesis realizadas para cerrar los términos asociados a la difusión turbulenta y al modelado de la cinética química considerado [56]. Nótese que en este caso no se requiere de ninguna zona de recirculación a fin de estabilizar la llama, dicha estabilidad proviene del modelo de reactivo empleado para la oxidación del combustible.

<sup>21</sup>Las técnicas de dispersión de Raman y Rayleigh, aprovechan los fenómenos de la dispersión inelástica y elástica de la luz en partículas para realizar mediciones de las diferentes variables de interés en un medio fluido. En particular, la técnica de la dispersión de de Raman presenta ventajas en la medición del campo de temperatura [55].

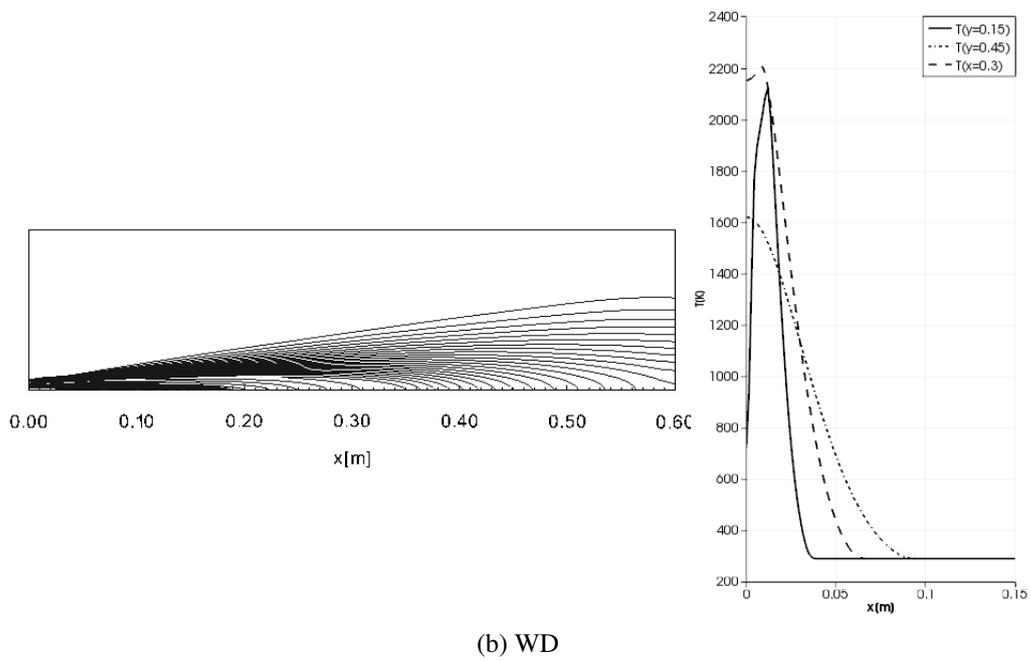
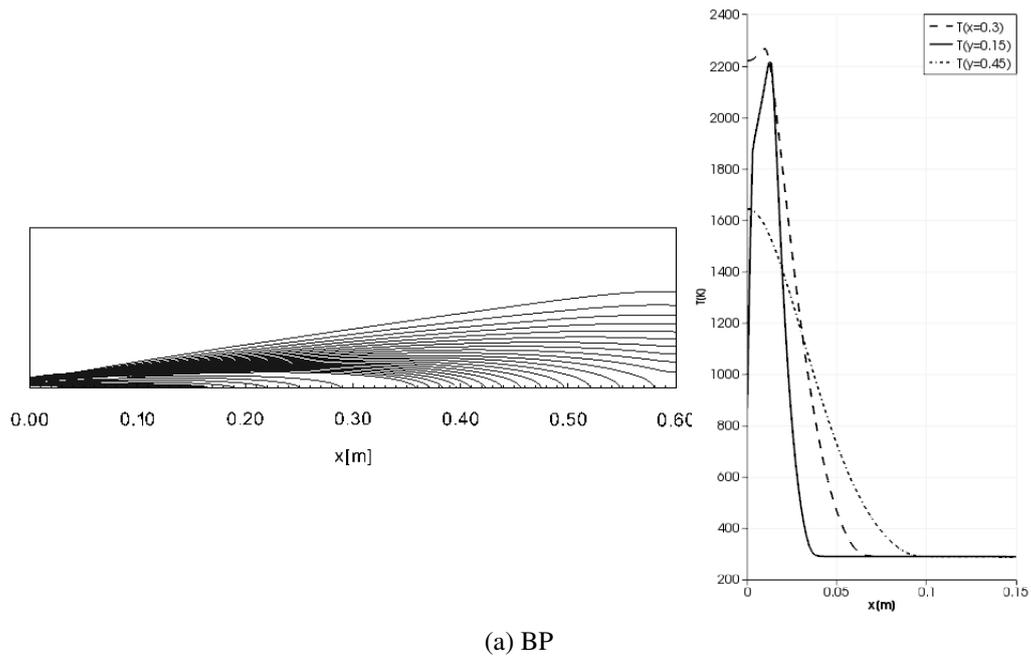
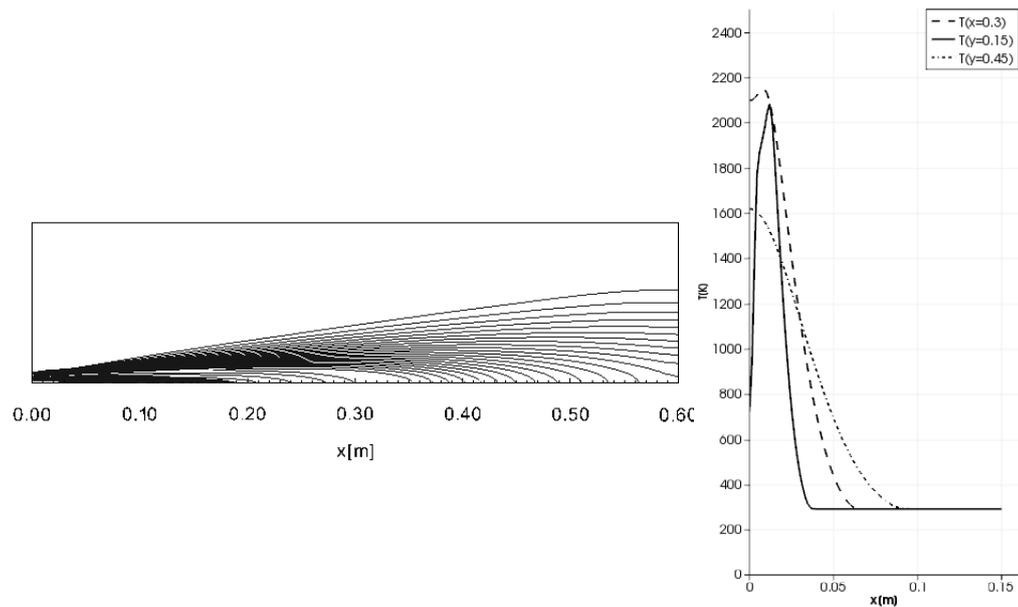
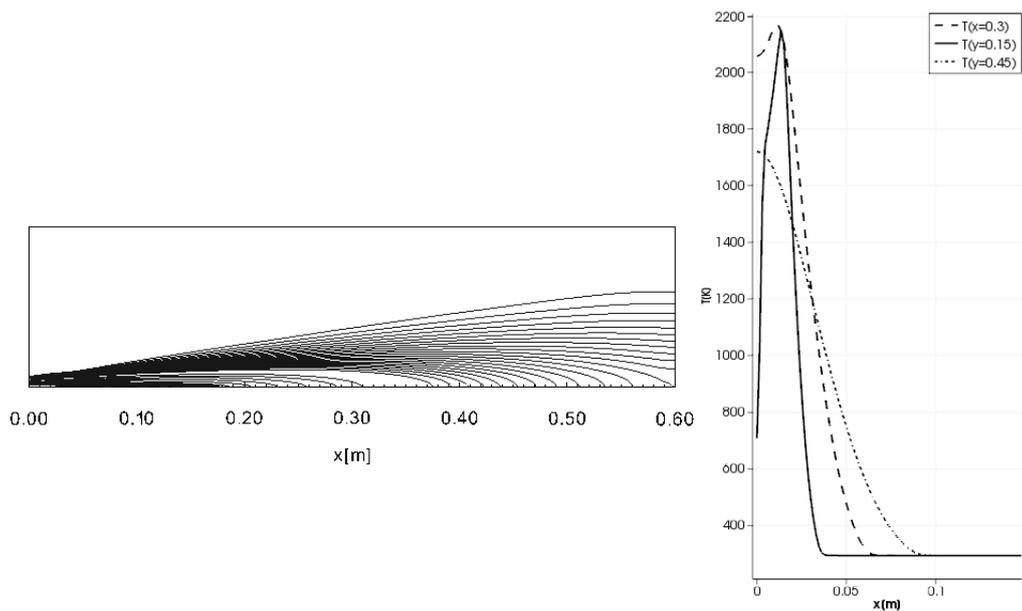


Fig. 3.6: Distribuciones de temperatura sobre el dominio (modelos cinéticos: BP y WD)



(a) WDM



(b) JL

Fig. 3.7: Distribuciones de temperatura sobre el dominio (modelos cinéticos: WDM y JL)

Se observa en la figura Fig. 3.7 como para cada uno de los modelos de reacción utilizados se obtiene una distribución de temperatura similar, no obstante, los modelos JL y WD2 describen una mejor tendencia a los datos experimentales en la zona de mayor actividad química  $10 \leq x/r \leq 50$ . Para  $x/r > 50$  el modelo BP reproduce con mayor fidelidad el comportamiento experimental, en la misma zona la predicción más pobre es la ofrecida por el modelo JL.

En la Fig. 3.8 se comparan las distribuciones de las fracciones másicas de las especies calculadas sobre la línea de simetría en la dirección axial con los respectivos datos experimentales. Se puede observar que los datos obtenidos con la simulación numérica presentan una tendencia correcta, no obstante, cuando se consideran por separado las diferentes especies, las predicciones numéricas muestran significativas diferencias cualitativas, particularmente en la zona donde se

produce la mayor actividad química.

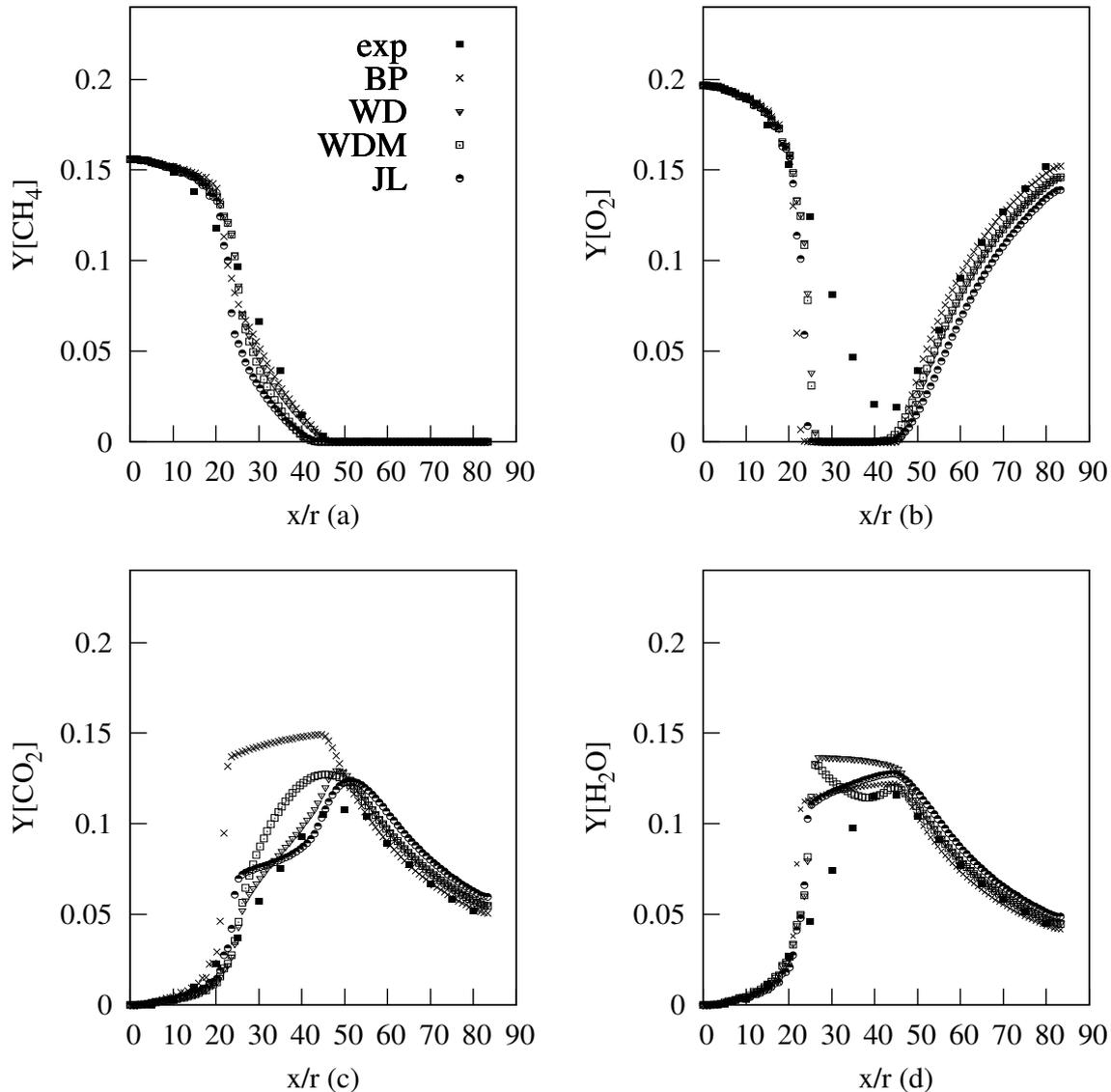


Fig. 3.8: Distribución de las especies sobre el eje de simetría

En la Fig. 3.8.a se observa que cuando  $x/r \approx 45$ , el  $\text{CH}_4$  se ha consumido casi por completo y la temperatura alcanza su valor máximo (ver Fig. 3.10), este valor de  $x/r$  puede interpretarse como el fin de la zona de reacción. Los productos de la combustión ( $\text{CO}_2$  y  $\text{H}_2\text{O}$ ) luego de alcanzar sus máximos valores al final de la zona reactiva, se difunden en la dirección radial del flujo mezclándose con el aire proveniente del túnel de viento y como es de esperar, sus fracciones másicas decaen a medida que la distancia en la dirección axial se incrementa.

La Fig. 3.8.b muestra el comportamiento de la fracción de masa del oxígeno, se observa que en el intervalo  $25 \leq x/r \leq 45$ , el consumo de  $\text{O}_2$  ha sido prácticamente total, mientras que en el intervalo  $0 \leq x/r \leq 25$  describe un proceso simultáneo de suministro y consumo. Cuando  $x/r > 45$ , la formación de oxígeno aumenta en la dirección axial como consecuencia de que el  $\text{O}_2$  proveniente del flujo del túnel de viento se difunde hacia el eje de simetría y se mezcla con los productos de la combustión.

La mejor descripción de la producción de  $\text{CO}_2$  en el intervalo ( $25 \leq x/r \leq 50$ ) es proporcionada por el modelo WD. En cuanto al comportamiento del  $\text{H}_2\text{O}$ , éste guarda correlación con el de  $\text{CO}_2$ , lo cual es de esperar.

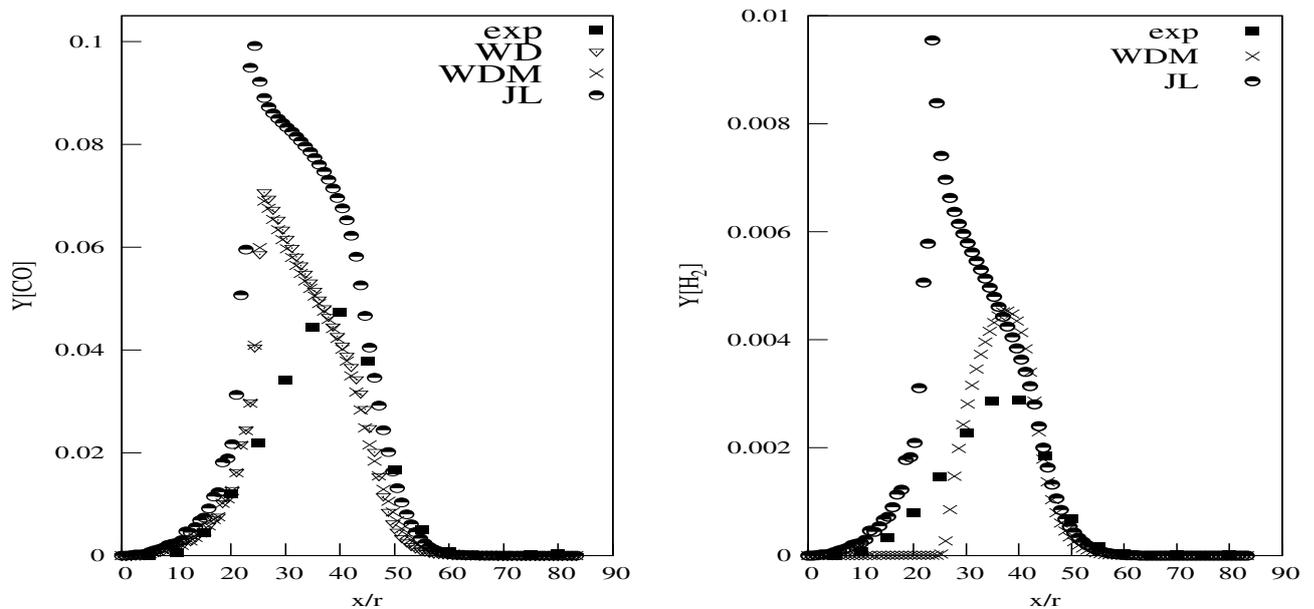


Fig. 3.9: Distribuciones de  $H_2$  y  $CO$  sobre el eje de simetría (modelos WD-WDM y JL).

La Fig. 3.9 muestra las distribuciones de  $H_2$  y  $CO$  obtenidas con los modelos WD-WDM y JL, para ambas especies la mejor aproximación al valor máximo experimental se obtienen con el modelo WDM y las más deficiente con el modelo JL.

En el intervalo ( $20 \leq x/r < 50$ ) puede identificarse como la zona de mayor actividad química, pero también es la región que muestra las mayores discrepancias entre los resultados de las simulaciones y las mediciones experimentales para las fracciones másicas de  $CO_2$ ,  $O_2$  y  $H_2O$ . A la temperatura típica de la combustión de hidrocarburos ( $\sim 2000$ ), significativas cantidades de  $H_2$  y  $CO$  coexisten en equilibrio con cantidades de  $CO_2$  y  $H_2O$ , esto reduce el calor de reacción y por lo tanto la temperatura de la llama.

En la Fig. 3.10 se presentan los resultados numéricos para la distribución de temperatura sobre el eje de simetría junto con los datos experimentales. El pico de temperatura medido es de  $1945\text{ K}$ . Los picos medidos junto al porcentaje de error con respecto al dato experimental se pueden ver en la Tab. 3.7

Modelo Químico	$\max(T)$	$\%E$
BP	$2282.3\text{ K}$	17.34
WD	$2230.3\text{ K}$	14.66
WDM	$2160.2\text{ K}$	11.40
JL	$2166.8\text{ K}$	11.06

Tabla 3.7: Pico de temperatura en la línea central para cada modelo cinético

De la Tab. 3.7 es claro que la mejor predicción del pico de temperatura en la línea central la ofrece el modelo JL, sin embargo este resultado no es concluyente de las capacidades de dicho modelo dadas las falencias que éste muestra para  $x/r > 50$  (además de las deficientes predicciones del monóxido de carbono y el hidrógeno). Por otro lado, el modelo WDM predice un valor próximo al dado por el JL y además presenta un mejor comportamiento para  $x/r > 50$ . En cuanto a la ubicación del pico de temperatura, todos los modelos, con excepción del BP, lo predicen alrededor de  $x/r \approx 47$ , mientras el dato experimental lo ubica en  $x/r \approx 45$ . En la región contigua al pico de temperatura, se observa una mejor concordancia respecto al decremento de la temperatura

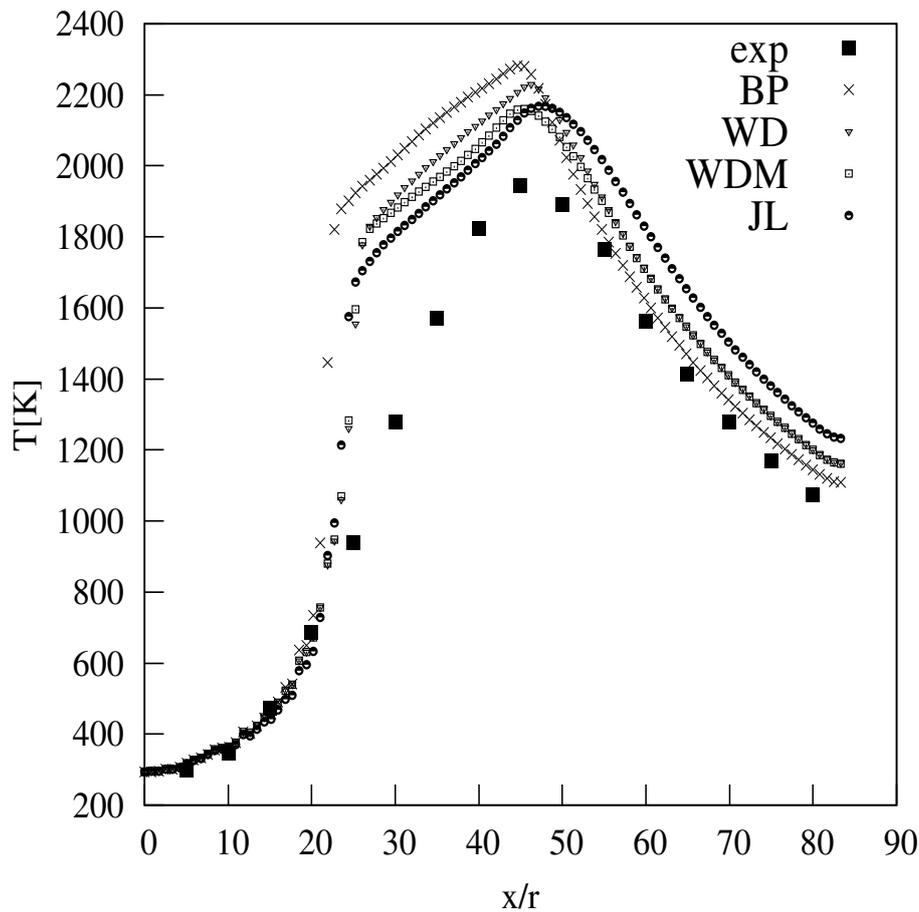


Fig. 3.10: Distribuciones de temperatura sobre el eje de simetría.

en la dirección del flujo, mostrando las mayores falencias el modelo JL seguido por los WD y WDM, siendo el modelo BP el que mejor la describe. Las mayores discrepancias entre predicciones y experimentos corresponden a la zona previamente identificada como la de mayor actividad química.

Las comparaciones efectuadas entre los resultados de las simulaciones y mediciones experimentales, fundamenta la siguiente pregunta: ¿Por qué en la zona en donde se produce la mayor actividad química y la correspondiente liberación de calor se presentan las mayores diferencias?. La respuesta a esta pregunta no es trivial, ya que dichas discrepancias pueden deberse a las hipótesis y consecuentes simplificaciones que se realizan en cada modelo químico, por ejemplo al agregar un paso adicional de oxidación del  $H_2$  al modelo WD, se observa una mejora en la predicción de la formación de agua, pero afecta de forma negativa al comportamiento de la producción de  $CO_2$  (Fig. 3.8.d). Las discrepancias encontradas pueden deberse al modelo químico [56], también se debe considerar a las hipótesis hechas para cerrar las ecuaciones de transporte turbulento [20]. Además según expresan algunos investigadores, pueden ser magnificadas por la carencia de un modelo que tenga en cuenta las pérdidas energéticas por radiación [57]. Para responder estas preguntas se requieren nuevas simulaciones numéricas enfocadas a superar el nivel actual de las aproximaciones realizadas en cada una de las posibles causas citadas, el modelo químico, las hipótesis sobre transporte turbulento y el modelado apropiado del flujo radiativo.

La necesidad de utilizar un modelo químico más detallado se justifica con los resultados de Christ [40] con una reacción global y un conjunto de 53 especies y 325 reacciones elementales (*GRI-model*). No obstante los resultados presentados demuestran las capacidades y versatilidad que ofrece la plataforma numérica ofrecida por openFoam™ para tratar flujos químicamente activos

de manera eficiente y confiable.

Con respecto a la convergencia del cálculo, en la Fig. 3.11 se puede observar las evoluciones de los residuos correspondientes a las fracciones de masa del oxígeno, el agua, la presión y la temperatura para los modelos BP y JL. En dicha figura se observa que se logra satisfacer el criterio de convergencia impuesto previamente en una tolerancia de  $10^{-6}$ .

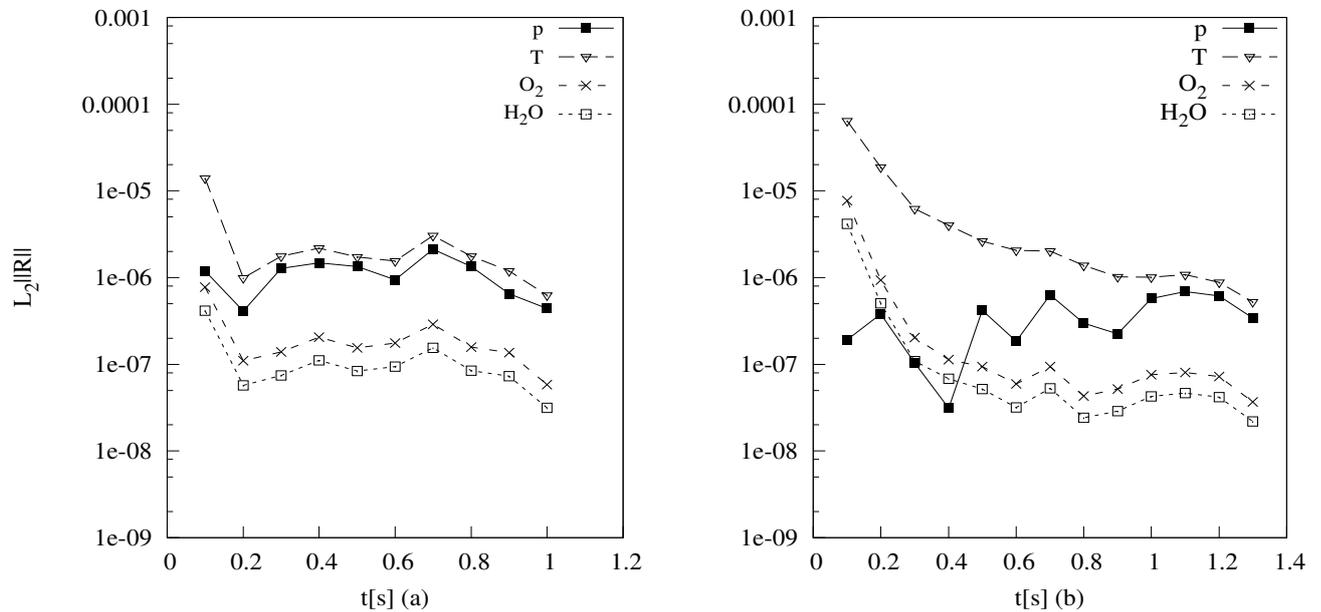


Fig. 3.11: Residuos de  $O_2, H_2O, T$  y  $p$ : (a) modelo de BP (b) modelo de JL

## Referencias capítulo 3

- [1] **A. Favre**, *Statistical equations of turbulent gases, Problems of hydrodynamics and continuum mechanics*, pp. 231–266, 1969.
- [2] **M. N. Bui-Pham**, *Studies in structures of laminar hydrocarbon flames.*, Ph.D. thesis, Ph.D Thesis., UCSD., 1992.
- [3] **C. K. Westbrook** y **F. L. Dryer**, *Simplified reaction mechanisms for the oxidation of hydrocarbon fuels in flames, Combustion science and technology*, vol. 27(1-2):pp. 31–43, 1981.
- [4] **L. Wang**, **L. Zhaohui**, **C. Sheng** y **Z. Chuguang**, *Comparison of Different Global Combustion Mechanisms Under Hot and Diluted Oxidation conditions, Combustion Science and Technology*, vol. 184(2):pp. 259–276, 2012.
- [5] **L. F. Gutiérrez Marcantoni**, **J. Tamagno** y **S. Elaskar**, *Numerical simulation of turbulent diffusive combustion*, in *Actas del IV congreso latinoamericano de Matemáticos*.
- [6] **L. F. Gutiérrez Marcantoni**, **J. Tamagno** y **S. Elaskar**, *Rans simulation of turbulent diffusive combustion using openfoam®*, *Journal of Applied Fluid Mechanics*, vol. 9(3), 2016.
- [7] **T. Poinsot** y **D. Veynante**, *Theoretical and Numerical Combustion*, R. T. Edwards, Inc., 2nd ed., 2005.
- [8] **R. Pletcher**, **J. Tannehill** y **D. Anderson**, *Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer*, Third Edition, Series in Computational and Physical Processes in Mechanics and Thermal Sciences, CRC Press, 2012.

- [9] **K. K. Kuo.**, Principles of Combustion, John Wiley & Sons, Inc., 2nd ed., 2005.
- [10] **R. Cant y E. Mastorakos**, An Introduction to Turbulent Reacting Flows, Imperial College Press, 2008.
- [11] **T. Gatski y J. Bonnet**, Compressibility, Turbulence and High Speed Flow, Elsevier, 2009.
- [12] **D. C. Wilcox**, Turbulence modeling for CFD, 2nd Edition. DCW Industries, Inc. - California, US, 1998.
- [13] **P. Kundu, I. Cohen y D. Dowling**, Fluid Mechanics with Multimedia Dvd, Academic Press, Academic Press, 2011.
- [14] **H. Versteeg y W. Malalasekera**, An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method, Pearson Education Limited, 2007.
- [15] **S. McAllister, J. Y. Chen. y A. C. F. Pello**, Fundamental of Combustion Processes, Mechanical Engineering Series - Springer Science+Business Media, LLC 2011, 2011.
- [16] **D. P. Mishra**, Fundamentals of Combustion, Prentice-Hall of India, 1st ed., 2008.
- [17] **F. A. Williams**, Combustion Theory, Benjamin/Cummings Merlo Park, California, 1985.
- [18] **C. K. Law**, Combustion physics, Cambridge University Press, 2006.
- [19] **R. Bird, W. Stewart y E. Lightfoot**, Transport Phenomena, Wiley International edition, John Wiley & Sons, 2006.
- [20] **N. Peters.**, Turbulent Combustion, Cambridge University Press, 2000.
- [21] **S. Pope**, Turbulent flows, Cambridge University Press, 2000.
- [22] **J. Anderson**, Hypersonic and High-Temperature Gas Dynamics, AIAA Education Series, American Institute of Aeronautics and Astronautics, 2006.
- [23] **E. Oran y J. Boris**, Numerical Simulation of Reactive Flow, Cambridge University Press, 2nd ed., 2001.
- [24] **D. Poitou, M. El Hafi y B. Cuenot**, *Analysis of radiation modeling for turbulent combustion: development of a methodology to couple turbulent combustion and radiative heat transfer in les*, *Journal of Heat Transfer*, vol. 133(6):p. 062701, 2011.
- [25] **R. Kee, M. Coltrin y P. Glarborg**, Chemically Reacting Flow: Theory and Practice, John Wiley & Sons, 2003.
- [26] **I. Glassman y R. Yetter**, Combustion, Academic Press, Academic Press, 2008.
- [27] **OpenFOAM**, 2015, URL [www.openfoam.com](http://www.openfoam.com), source Code.
- [28] **J. Blazek**, Computational fluid dynamics: principles and applications, Elsevier Science, 3rd ed., 2015.
- [29] **B. E. Launder y B. I. Sharma**, *Application of the energy-dissipation model of turbulence to the calculation of flow near a spinning disk*, *Lett Heat Mass Tran*, vol. VI:pp. 131–138, 1974.
- [30] **N. P. A. Nordin**, Complex Chemistry Modeling of Diesel Spray Combustion, Ph.D. thesis, Chalmers University of Technology, 2001.

- [31] **F. P. Kärrholm**, Numerical Modelling of Diesel Spray Injection, Turbulence Interaction and Combustion, Ph.D. thesis, Chalmers University of Technology, 2008.
- [32] **O. Marzouk** y **E. Huckaby**, *Simulation of a swirling gas-particle flow using different  $k$ -epsilon models and particle-parcel relationships*, *Engineering Letters*, vol. 18(1), 2010.
- [33] **J. Warnatz**, **U. Maas** y **R. Dibble**, *Combustion: physical and chemical fundamentals, modeling and simulation, experiments, pollutant formation*, Springer Verlag, New York, 2006.
- [34] **G. Bader** y **P. Deuffhard**, *A semi-implicit mid-point rule for stiff systems of ordinary differential equations*, *Number: Math*, vol. 41:pp. 373–398, 1983.
- [35] **J. Andersen**, **C. Rasmussen**, **T. Giselsson** y **P. Glarborg**, *Global combustion mechanisms for use in CFD modeling under oxy-fuel conditions*, *Energy & Fuels*, vol. 23(3):pp. 1379–1389, 2009.
- [36] **N. M. Marinov**, **C. K. Westbrook** y **W. Pitz**, *Detailed and global chemical kinetics model for hydrogen*, *Transport phenomena in combustion*, vol. 1:p. 118, 1995.
- [37] **M. N. Marinov**, **C. K. Westbrook** y **W. J. Pitz**, *Detailed and global chemical kinetics model for hydrogen*, *Transport phenomena in combustion*, vol. 1:p. 118, 1996.
- [38] **W. Jones** y **R. Lindstedt**, *Global reaction schemes for hydrocarbon combustion*, *Combustion and Flame*, vol. 73(3):pp. 233–249, 1988.
- [39] **J. Chomiak** y **A. Karlsson**, *Flame liftoff in diesel sprays*, *26th Symposium (International) on Combustion*, pp. 2557–2564, 1996.
- [40] **D. Christ**, *Simulating the combustion of gaseous fuels*, 2011.
- [41] **W. Sutherland**, *The viscosity of gases and molecular force*, *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, vol. 36(223):pp. 507–531, 1893.
- [42] **D. R. Stull** y **H. Prophet**, *JANAF Thermochemical Tables*, US National Bureau of Standards, 1971.
- [43] **B. Poling**, **J. Prausnitz** y **J. P. O'connel**, *The properties of gases and liquids*, vol. 5, McGraw-Hill New York, 2001.
- [44] **H. Weller**, **G. Tabor**, **H. Jasak** y **C. Fureby**, *A tensorial approach to computational continuum mechanics using object orientated techniques*, *Comp. in Phys.*, vol. 12(6):pp. 620–630, 1998.
- [45] **R. Barlow** y **J. Frank**, *Piloted  $CH_4$ /air flames c, d, e, and f*, Tech. rep., Sandia National Laboratories, 2007.
- [46] **R. Barlow**, **J. Frank**, **a. Karpetsis** y **J. Chen**, *Piloted methane/air jet flames: Transport effects and aspects of scalar structure*, *Combustion and Flame*, vol. 143(4):pp. 433–449, 2005.
- [47] **R. Barlow** y **J. Frank**, *Piloted  $CH_4$ /Air flames C, D, E, and F*, Sandia National Laboratories, 2007.
- [48] **K. Kuo** y **R. Acharya**, *Fundamentals of Turbulent and Multi-Phase Combustion*, Wiley, 2012.

- [49] **R. S. Barlow, H. C. Ozarovsky, A. N. Karpetis y R. P. Lindstedt**, *Piloted jet flames of CH<sub>4</sub>/H<sub>2</sub>/air: Experiments on localized extinction in the near field at high Reynolds numbers*, *Combustion and Flame*, vol. 156(11):pp. 2117–2128, 2009.
- [50] **R. Kee, F. Rupley y J. Miller**, *The chemkin thermodynamic data base*, Tech. rep., Sandia National Labs., Livermore, CA (USA), 1990.
- [51] **P. Frey y P.-L. George**, *Mesh generation*, vol. 32, John Wiley & Sons, 2010.
- [52] *OpenFOAM - The Open Source CFD Toolbox - User's Guide*, OpenCFD Ltd, 2015.
- [53] **F. Coquel, Q. Nguyen, M. Postel y Q. Tran**, *Local time stepping applied to implicit-explicit methods for hyperbolic systems*, *Multiscale Modeling & Simulation*, vol. 8(2):pp. 540–570, 2010.
- [54] **M. Yusoff, F. Bakhtar y J. Kajang-Puchong**, *A two-dimensional time-accurate euler solver for turbo machinery applications*, *Journal-Institution of Engineers, Malaysia*, vol. 5(3), 1998.
- [55] **C. Tropea, A. Yarin y J. Foss**, *Springer handbook of experimental fluid mechanics*, vol. 1, Springer, 2007.
- [56] **O. A. Marzouk y E. D. Huckaby**, *A comparative study of eight finite-rate chemistry kinetics for CO/h<sub>2</sub> combustion*, *Engineering Applications of Computational Fluid Mechanics*, vol. Vol. 4(No. 3):pp. 331–356, 2010.
- [57] **B. Lilleberg, D. Christ, I. S. Ertesvag, K. E. Rian y R. Kneer**, *Numerical simulation with an extinction database for use with the eddy dissipation concept for turbulent combustion*, 2011.

# Capítulo 4

## Aplicaciones al flujo supersónico

### Introducción

En el Cap. 3 se abordó el problema de la combustión difusiva turbulenta a baja velocidad. Allí se mostró que las librerías ofrecidas por openFoam™ cuentan con las herramientas para implementar de manera eficiente *solvers* que acoplan los efectos químicos con el proceso fluido-dinámico. La idea básica de los métodos basados en presión, es combinar la ecuación de continuidad junto con las de momento para derivar una ecuación para la presión [1, 2] y emplear distintas ecuaciones<sup>1</sup> para desarrollar etapas de predicción-corrección. Estos algoritmos desarrollados en primera instancia para aplicaciones en flujos incompresibles, han sido extendidos a flujos compresibles [1, 3]. Sin embargo, dichos métodos tienden por sí solos a proporcionar una pobre resolución de las discontinuidades presentes en el campo de flujo [4] e inevitablemente se ha recaído en combinar esquemas desarrollados para métodos basados en densidad generando técnicas híbridas [3, 5, 6]. Por otra parte, la técnica PISO para ser aplicable en un arreglo de malla colocada requiere de la interpolación Rhie-Chow (ver Sección.2.7.1) en el cómputo de la presión, no obstante, al aplicar dicho algoritmo a flujos con altas velocidades a medida que  $M \gg 1$  y ante la presencia de fuertes gradientes de presión ésta corrección tiende a fallar [5]. En vista de lo anterior, en lo que sigue se exploran técnicas basadas en densidad implementadas utilizando diferentes estructuras de datos disponibles en openFoam™, con la finalidad de evaluar su comportamiento para tratar problemas típicos de la aerodinámica supersónica.

Los métodos basados en densidad se basan en considerar que la ecuación de continuidad contiene la derivada temporal de la densidad, debido a que la densidad es una variable independiente, ésta se puede utilizar para calcular la presión a través de la ecuación de estado y el acoplamiento entre la evolución temporal de la densidad y la presión es tenido en cuenta en las ecuaciones de momento [7]. Tradicionalmente los métodos basados en densidad son preferidos al abordar flujos con altas velocidades, ya que estos capturan con mayor precisión las diferentes ondas presentes en el campo de flujo. [7–10].

A continuación se presentan una breve introducción al patrón de flujo, sus características más importantes y las ecuaciones de gobierno en forma genérica. También se describe la forma que adoptan estas ecuaciones para su empleo en cada uno de los *solvers* utilizados, las técnicas aplicadas, su implementación numérica y la organización de cada uno de los casos de prueba junto con

---

<sup>1</sup>Debido a que en cada etapa se utilizan distintas expresiones de corrección, el método resulta ser no iterativo

las respectivas soluciones obtenidas.

Se desprecian los efectos de la viscosidad y transferencia de calor, en consecuencia se resuelven las ecuaciones de Euler. Para la validación de los *solvers* se eligen casos de prueba que cuenten con soluciones analíticas y/o datos experimentales. Los casos que se consideran son: flujo sobre un cuerpo romo (2D y axisimétrico), un perfil doble cuña y una toma de aire.

## Nomenclatura

### Abreviaturas

AUSM	<i>Advection upstream splitting method</i>
CFL	Condición de Courant–Friedrichs–Lewy
EDPs	Ecuaciones en derivadas parciales
FDS	<i>Flux difference splitting (fluctuation splitting)</i>
FVS	<i>Flux vector splitting</i>
HLLC	Harten, van Leer
HLLC	Harten, van Leer, <i>contact</i>
MinMod	Función limitadora MinMod de Roe
KT	Esquema de Kurganov–Tadmor
KNP	Esquema de Kurganov–Noelle–Petrova
PISO	<i>Pressure implicit with splitting of operators</i>
vanLeer	Función limitadora de van Leer
vanAlbada	Función limitadora de van Albada
zG	Gradiente Nulo

### Alfabeto latino

$a$	Velocidad del sonido
$C_p$	Calor específico a presión constante
$C_O$	Número de Courant
$C_v$	Calor específico a volumen constante
$c_p$	Coefficiente de presión
$\underline{\underline{D}}$	Tensor de deformaciones
$\overline{E}$	Energía total
$e$	Energía interna
$e_s$	Energía sensible
$f$	Flujo numérico
$\mathbf{F}$	Vector de flujos numéricos
$F_p$	Flujos de presión
$F_{pc}$	Flujos convectivo puro
$H$	Entalpía total
$h_s$	Entalpía sensible.
$l$	<i>Left value</i>
$\mathbf{L}$	Autovectores izquierdos
$M$	Número de Mach
$\mathbf{n}$	Vector normal
$p$	Presión.
$p^*$	Presión de inicio algoritmo PISO
$\mathbf{q}$	Vector que representa el flujo de calor por conducción (difusión)

$r$	<i>Right value</i>
$R$	Constante particular del gas
$\mathbf{R}$	Autovectores derechos
$R_u$	Constante universal de los gases
$T$	Temperatura
$T_0$	Temperatura de referencia
$t$	Tiempo
$\mathbf{u}$	Vector de variables conservativas
$\mathbf{U}$	Velocidad de transporte
$v$	Volumen específico
$V_c$	Velocidad contravariante
$V_p$	Volumen de la celda
$\mathbf{W}$	Vector de variables características
$W$	Peso molecular

### Alfabeto griego

$\alpha_i$	Intensidad de la $i$ -ésima onda
$\alpha$	Ángulo de ataque
$\alpha_{\text{eff}}$	Difusividad térmica efectiva
$\beta(r)$	Función limitadora
$\gamma$	Relación de calores específicos
$\Delta s$	Cambio de entropía
$\Delta t$	Paso de tiempo fluidodinámico
$\delta$	Factor de estiramiento
$\delta_{ij}$	Delta de Kronecker
$\lambda_i$	Autovalor $i$
$\Lambda$	Matriz de autovalores
$\theta_s$	Ángulo de la onda de choque
$\theta_w$	Ángulo de la cuña
$\rho$	Densidad
$\underline{\underline{\tau}}$	Tensor de tensiones viscosas.
$\psi$	Compresibilidad

### Superíndices

*	Paso de predicción algoritmo PISO
**	Paso de corrección algoritmo PISO
◦	Condiciones estándar
-	Promedio de Reynolds
"	Fluctuación
~	Promedio de Favre
T	Transpuesta
$n$	Valor en el paso de tiempo actual
$D$	Componentes de la diagonal
$N$	Componentes fuera de la diagonal

### Subíndices

$f$	Valor evaluado en la cara
+	Flujo en la dirección positiva

–	Flujo en la dirección negativa
<b>Operadores</b>	
$\text{dev}(), ()^{\text{dev}}$	Parte desviadora
:	Doble contracción
$G'(e)$	Operador discreto que representa los flujos convectivos y difusivos de energía
$\sim$	Promedio de Roe
[ ]	Matriz
Tr	Traza
$\Delta, (), i$	Operador divergencia discreto
	Norma
$\mathcal{RP}$	Solución al problema de Riemann
$S_{ij,i}$	Operador discreto que representa los flujos convectivos y difusivos de momento

## 4.1. Propiedades del régimen supersónico

El flujo compresible se puede definir como aquel en el cual la densidad del fluido no permanece constante. Sin embargo, dicha definición involucra un trasfondo más elaborado en función de la naturaleza de dichos cambios de densidad.

Cuando fue abordado el problema de la combustión difusiva (Cap. 3), se trató el flujo de un fluido el cual experimentaba cambios de densidad como consecuencia de los fuertes gradientes de temperatura asociados a la liberación de energía producto de reacciones exotérmicas [11].

En flujos con altas velocidades los cambios en la densidad están relacionados con el estado propio del fluido y los gradientes de presión que este experimenta. Por ejemplo, un líquido puede experimentar altas velocidades sin presentar cambios significativos en su densidad, en contraste, cuando un gas experimenta altas velocidades los gradientes de presión generan cambios significativos en la densidad del fluido [12].

Dado que los cambios en presión comprimen o expanden el gas, es de esperar que dichos efectos alteren su temperatura. Esto se debe al acoplamiento que existe entre velocidad y presión expresado en las ecuaciones de momento [13].

Sea un gas perfecto en el cual la velocidad molecular media y la energía interna sean función únicamente de la temperatura. Supóngase que dicho gas está en reposo y es perturbado por un pulso de presión; este pulso introduce una perturbación u onda de tipo acústico, es decir, se propaga con la velocidad del sonido  $\left(a = \frac{\partial p}{\partial \rho} = \sqrt{\gamma RT}\right)$ . Si el gas está en movimiento, la perturbación continúa moviéndose con velocidad acústica relativa al gas en movimiento y por lo tanto, se puede plantear una relación entre la velocidad global ( $U$ ) con que se mueve el fluido y la de la onda acústica, que se conoce como número de Mach ( $M$ ). Por otro lado, si se considera la ecuación de momento y se determinan los órdenes de magnitud de sus diferentes términos, se observa que si se retienen los de mayor orden (el término asociado la inercia del fluido y el gradiente de presión), es decir,  $U\nabla(U)$  y  $\rho^{-1}\nabla p$ . Considérese entonces un patrón de flujo con longitud característica  $l_0$ , velocidad  $u_0$ , densidad  $\rho_0$ , volumen específico  $v_0$  y velocidad del sonido  $c_0$ . Los órdenes de magnitud de los

términos retenidos son respectivamente  $U \nabla \cdot (\mathbf{U}) \sim u_0^2 l_0^{-1}$  y  $\rho^{-1} \nabla p \sim \Delta p (\rho_0 l_0)^{-1}$ , donde  $\Delta p$  es la diferencia de presión, considerando las expresiones anteriores es posible concluir que:

$$\Delta p \sim \rho_0 u_0^2 \quad (4.1)$$

A su vez, la velocidad del sonido se relaciona con los cambios en presión y velocidad a través de:

$$a_0^2 \sim \frac{\Delta p}{\Delta \rho} \quad (4.2)$$

Utilizando las Ec. 4.1 y Ec. 4.2 se obtiene:

$$\frac{\Delta \rho}{\rho_0} \sim \frac{u_0^2}{a_0^2} \quad (4.3)$$

A partir de la definición del número de Mach ( $M = u a^{-1}$ ):

$$-\frac{\Delta v}{v_0} \sim \frac{\Delta \rho}{\rho_0} \sim M_0^2 \quad (4.4)$$

donde el primer término de Ec. 4.4 representa el cambio proporcional de un elemento de fluido debido a los efectos compresibles. Este importante resultado indica que los cambios en volumen experimentados por un elemento fluido son proporcionales al cuadrado del número de Mach del flujo, de esta forma, el número de Mach resulta ser un número adimensional de gran importancia en lo que respecta al estudio de flujos con altas velocidades.

Se considera un flujo con alta velocidad cuando  $M > 1$ , dentro de los flujos con altas velocidades se distinguen diferentes regímenes (supersónico e hipersónico) aquí sólo se considerará el régimen supersónico. Un flujo se dice es supersónico cuando el número de Mach está comprendido entre  $1 < M < 5$ <sup>2</sup>. Si  $M > 5$  se dice que el flujo es hipersónico. En un flujo hipersónico las hipótesis de gas perfecto pueden ser no aplicables y se deben tener en cuenta efectos adicionales [14].

Las ecuaciones de Euler admiten tres tipos de discontinuidades: choque, discontinuidad de contacto y línea de deslizamiento<sup>3</sup>, ésta última exclusiva de flujos bidimensionales y tridimensionales. A partir de las ecuaciones de conservación de masa, momento y energía es posible definir las condiciones de Rankine-Hugoniot, las cuales se resumen a continuación [8, 10, 15, 16]:

$$\rho_1 (u_1 - u_w) = \rho_2 (u_2 - u_w) \quad (4.5a)$$

$$\rho_1 u_1 (u_1 - u_w) + p_1 = \rho_2 u_2 (u_2 - u_w) + p_2 \quad (4.5b)$$

$$\rho_1 E_1 (u_1 - u_w) + p_1 u_1 = \rho_2 E_2 (u_2 - u_w) + p_2 u_2 \quad (4.5c)$$

<sup>2</sup>En algunas fuentes bibliográficas se considera que un flujo es supersónico si se encuentra dentro del rango  $1.2 < M < 5$ , debido a que para  $1 < M < 1.2$  dentro del campo de flujo pueden existir regiones aún en transición, en las cuales coexisten velocidades subsónicas y supersónicas. Sin embargo aquí se considera al flujo genuinamente supersónico para el rango citado.

<sup>3</sup>También denominada en la bibliografía inglesa como *vortex sheet*, *slip line*, *contact surface*

donde  $u_w$  es la velocidad de la onda,  $u_1$  y  $u_2$  son las velocidades a la izquierda y a la derecha de la onda respectivamente. Dependiendo de la geometría o de los cambios en presión, dentro del régimen supersónico pueden aparecer los siguientes tipos de ondas, donde las discontinuas (choques y discontinuidad de contacto) son contempladas por las condiciones de Rankine-Hugoniot (Ec. 4.5a, Ec. 4.5b y Ec. 4.5c):

- **Discontinuidad de contacto**<sup>4</sup>

Las discontinuidades de contacto pueden ser normales o paralelas a la dirección del flujo. Si son normales se verifica que la presión y la velocidad son continuas a través de las mismas (situación típica de problemas 1D) lo cual se satisface con las condiciones expresadas por Ec. 4.5a y Ec. 4.5b respectivamente:

$$u_1 = u_2$$

$$p_1 = p_2$$

Los cambios en la densidad y temperatura producen un salto de entropía. Si las discontinuidades son paralelas a la dirección local del flujo, la presión es continua a través de las mismas pero la velocidad no lo es, este tipo de discontinuidad de contacto se denomina **superficie de deslizamiento**. Nuevamente los cambios en densidad y temperatura definen el correspondiente salto de entropía.

- **Ondas de choque rectas**

Se pueden definir como regiones del campo de flujo en las que existen gradientes tan intensos que producen súbitos cambios en las propiedades del gas. Estas ondas son normales a la dirección del flujo y a través de las mismas la velocidad del flujo decrece y la presión, densidad y temperatura aumentan. A través de la onda se verifica un aumento de entropía ( $\Delta s > 0$ ).

Este tipo de ondas también se verifican a través de las condiciones de Rankine-Hugoniot, tal como fue mencionado existe una discontinuidad en velocidad ( $u_1 \neq u_2$ ), por lo que en el caso unidimensional existen dos posibilidades: un choque que se desplaza hacia la izquierda ( $u_1 > u_w$ ), para el cual la onda se mueve hacia la izquierda con respecto a un marco de referencia que se mueve a  $u_1$  y por otro lado, cuando ( $u_1 < u_w$ ) el frente se moverá hacia la derecha. Para cada configuración aparece una familia de soluciones, para la configuración ( $u_1 > u_w$ ) quedará definida en función de la relación de presiones a través del choque ( $p_2/p_1$ ) para  $u_1$  y  $a_1$  dadas. De forma similar aparece otra familia para ( $u_1 < u_w$ ).

- **Ondas de choque oblicuas o cónicas**

Cuando la fuente perturbadora se mueve con velocidad superior a la del sonido del medio, se genera una onda de choque envolvente de las ondas sucesivas producidas por la fuente. Dicha envolvente puede ser cónica si la perturbación es 3D u oblicua si es 2D. Obviamente estas envolventes delimitan la zona de influencia al fijar los límites hasta donde llegan las perturbaciones. Este tipo de ondas también son conocidas como discontinuidades y a través de las mismas la velocidad del flujo disminuye mientras la presión, densidad, temperatura y entropía aumentan. Las ondas o choques oblicuos, en particular, pueden ser débiles o fuertes. Que sean fuertes o débiles depende, al menos parcialmente, de las condiciones de contorno como la presión. Si la presión corriente abajo es suficientemente alta el choque será fuerte. No obstante, cuando un choque oblicuo fuerte se aproxima a una superficie sólida éste experimenta una transición hacia un choque normal.

---

<sup>4</sup>También conocida como onda de entropía

- **Abanicos de expansión** A diferencia de los choques, en los cuales las sucesivas ondas de Mach convergen, en la expansión sucede lo opuesto, las sucesivas ondas divergen [12]. Los abanicos de expansión están formados por la sucesión de dichas ondas y corresponden a una zona continua en el campo de flujo, a través de la cual la velocidad aumenta de forma continua, mientras que la presión, densidad y temperatura disminuyen. El abanico de expansión es un proceso isentrópico, por lo que las propiedades de estancamiento son conservadas [13].

Cabe mencionar que los choques y expansiones se asocian a campos característicos genuinamente no lineales y lo que determina que tenga lugar una expansión es la divergencia de las características. Por otro lado, si las ondas de *Mach* convergen tendrá lugar un choque. Las discontinuidades de contacto corresponden a campos linealmente degenerados sobre los cuales las características son paralelas<sup>5</sup>. Las ondas y discontinuidades descritas aparecen como soluciones típicas de las ecuaciones de Euler y por ende aquí se hace una breve referencia para dar contexto a las soluciones de los problemas que serán abordados. Para descripciones más detalladas se sugieren las referencias [10, 12, 15, 17–20]

## 4.2. Ecuaciones de transporte y modelo termofísico

En esta sección se presentan las ecuaciones de transporte a ser solucionadas. Nótese que la ecuación de la energía se escribe en términos de la energía interna y la energía total.

1. Ecuación de continuidad o conservación de la masa

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U}) = 0 \quad (4.7)$$

2. Ecuación de conservación del momento (sin considerar fuerzas de campo)

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \mathbf{U}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \mathbf{U}) = -\nabla p + \nabla \cdot \underline{\underline{\boldsymbol{\tau}}} \quad (4.8)$$

donde  $\rho$  es la densidad,  $\mathbf{U}$  la velocidad del fluido,  $p$  la presión y  $\underline{\underline{\boldsymbol{\tau}}}$  el tensor de tensiones viscosas. Dicho tensor de tensiones utilizando la hipótesis de Boussinesq puede ser escrito como

$$\underline{\underline{\boldsymbol{\tau}}} = 2\mu \text{dev}(\underline{\underline{\mathbf{D}}}) \quad (4.9)$$

En Ec. 4.9,  $\mu$  es el coeficiente de viscosidad dinámica,  $\underline{\underline{\mathbf{D}}} = \frac{1}{2}[\nabla \mathbf{U} + (\nabla \mathbf{U})^T]$  es el tensor velocidad de deformaciones y  $\text{dev}(\underline{\underline{\mathbf{D}}}) = \underline{\underline{\mathbf{D}}} - \frac{1}{3} \text{Tr}(\underline{\underline{\mathbf{D}}}) \mathcal{I}$  es la parte desviadora de dicho tensor con  $\mathcal{I}$  el tensor unitario.

3. Ecuación de la energía en términos de la energía total ( $E$ ) y sensible ( $e_s$ ).

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho E) + \nabla \cdot [\mathbf{U}(\rho E)] + \nabla \cdot \mathbf{q} + \nabla \cdot [(p\mathcal{I} - \underline{\underline{\boldsymbol{\tau}}})\mathbf{U}] = 0 \quad (4.10)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho e_s) + \nabla \cdot [\mathbf{U}(\rho e_s)] + \nabla \cdot \mathbf{q} + (p\mathcal{I} - \underline{\underline{\boldsymbol{\tau}}}) \nabla \cdot \mathbf{U} = 0 \quad (4.11)$$

<sup>5</sup>El campo característico asociado a  $\lambda_i$  será genuinamente no lineal si:  $\nabla(\lambda_i \cdot) \mathbf{R}_i \neq 0$  y linealmente degenerado si  $\nabla(\lambda_i \cdot) \mathbf{R}_i = 0$

En la Ec. 4.10 y Ec. 4.11 la energía sensible y total están dadas por:

$$e_s = h_s - \frac{p}{\rho} = \int_{T_0}^T C_v dT - RT_0/W \quad (4.12)$$

$$E = e_s + \frac{1}{2} \mathbf{U} \cdot \mathbf{U} \quad (4.13)$$

donde  $h_s$  es la entalpía sensible ( $h_s = \int_{T_0}^T C_p dT$ ).

De acuerdo a lo anterior, la energía sensible resulta relacionada con el flujo de energía total de la siguiente forma:

$$e_s = \left[ \frac{(\rho E)}{\rho} - \frac{1}{2} \mathbf{U} \cdot \mathbf{U} \right] \quad (4.14)$$

En cuanto al modelo termofísico, se supone que el gas es aire el cual se asume como una mezcla congelada (*frozen mixture*) que se comporta como un gas calórico perfecto. Por lo tanto  $C_v$ ,  $C_p$  y  $\gamma$  adoptan los siguientes valores:

$$C_p = 1004.5 \frac{J}{Kg K} \quad (4.15)$$

$$C_v = 717.5 \frac{J}{Kg K} \quad (4.16)$$

$$\gamma = \frac{7}{5} \quad (4.17)$$

Para determinar la temperatura se utiliza nuevamente el proceso iterativo descrito al final de la Sección.3.2.2, en este caso con  $F(t) = e_s$  y  $\frac{dF}{dT} = C_v$ .

Por último, la presión queda definida según la ecuación de estado de los gases perfectos

$$p = \rho \frac{R_u}{W} T = \rho R T = \frac{\rho}{\psi} \quad (4.18)$$

Es de hacer notar que `sonicFoam` cuenta con la opción de simular campos de flujo turbulentos y al igual que en el Cap. 3, se utilizan los promedios de Favre para formular las ecuaciones promediadas.

- Conservación de la masa

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{U}}) = 0 \quad (4.19)$$

- Conservación del momento

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{U}}) + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{U}} \tilde{\mathbf{U}}) + G(\tilde{\mathbf{U}}) = -\nabla \bar{p} \quad (4.20)$$

el operador  $G$  es idéntico al descrito en la Sección.3.2.3.

- Ecuación de la energía sensible

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{e}_s) + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{U}} \tilde{e}_s) + \nabla \cdot (\alpha_{\text{eff}} \nabla \cdot \tilde{e}_s) + \bar{p} \nabla \cdot \tilde{\mathbf{U}} = 0 \quad (4.21)$$

aquí también se emplea la difusividad efectiva la cual se introdujo en la Sección.3.2.2.

Nótese que en la ecuación de la energía sensible se han ignorado los términos asociados con el calentamiento debido a efectos viscosos moleculares.

## 4.3. Técnicas de solución numérica

Las simulaciones a realizar se desarrollan utilizando diferentes técnicas numéricas aplicables al régimen supersónico implementadas utilizando las estructuras de datos y herramientas ofrecidas por openFoam™.

Las técnicas a utilizar corresponden a una implementación de la extensión del método PISO para flujo compresible (solver `sonicFoam`) [1], el *solver* `rhoCentralFoam` el cual es una adaptación de los esquemas centrados de Kurganov y Tadmor en mallas poliédricas no estructuradas [21–24] y los *solvers* de la librería `dbnsFoam` la cual utiliza diferentes técnicas para la construcción de los flujos numéricos, ya sea empleando *solvers* de Riemann o esquemas del tipo *flux vector splitting* como el esquema *Advection Upstream Splitting Method* AUSM [25–27].

El objetivo de esta sección es proporcionar una introducción a dichas técnicas y su correspondiente implementación en el ámbito de openFoam™, para finalmente evaluar de las herramientas disponibles, cuál resulta más conveniente para la construcción de un *solver* capaz de simular procesos detonantes.

### 4.3.1. Forma conservativa de las ecuaciones de gobierno

Históricamente la forma diferencial ha sido preferida sobre la integral únicamente porque la primera resulta ser más compacta [10]. La forma integral y la diferencial pueden ser intercambiadas mediante el teorema de la divergencia, sin embargo, para los fines de esta sección se utiliza la formulación diferencial.

Las ecuaciones de gobierno introducidas en la Sección.4.2 se dice que se encuentran expresadas en forma conservativa, si se verifica que están escritas en la forma:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{F}_c = \mathbf{s} \quad (4.22)$$

donde  $\mathbf{u}$  es el vector de variables conservativas,  $\mathbf{F}_c$  el vector de flujos convectivos<sup>6</sup> y  $\mathbf{s}$  el vector de términos fuentes. Para las ecuaciones de Euler no reactivas, el vector de variables conservativas y el vector de flujos resultan:

<sup>6</sup>Nótese que aquí se incluye en la definición de los flujos convectivos a la presión, no obstante esta no es parte formal de dichos flujos

$$\mathbf{u} = [\rho \rho U_1 \rho U_2 \rho U_3 \rho E]^T \quad (4.23)$$

$$\mathbf{F}_c = \begin{bmatrix} \rho V_c \\ \rho U_1 V_c + n_1 p \\ \rho U_2 V_c + n_2 p \\ \rho U_3 V_c + n_3 p \\ \rho H V_c \end{bmatrix} \quad (4.24)$$

donde  $U_i$  representan los componentes del vector velocidad  $\mathbf{U}$ ,  $H = E + \rho^{-1}p$  la entalpía total,  $p$  la presión y  $V_c$  la velocidad contravariante, dada por:

$$V_c = \mathbf{U} \cdot \hat{\mathbf{n}} \quad (4.25)$$

donde a su vez  $\hat{\mathbf{n}} = (n_1, n_2, n_3)^T$  es el vector normal a la superficie del volumen de control.

### 4.3.2. Métodos conservativos, el teorema de Lax-Wendroff y la condición de Entropía

Los métodos numéricos utilizados para resolver problemas que involucran campos de flujo en los cuales hay discontinuidades deben contar con características específicas que garanticen el tratamiento apropiado de las mismas. Desde el punto de vista de la formulación matemática, los métodos que no utilizan variables conservativas fallan en las proximidades de los choques, incluso llegando a no converger [8].

Por su parte el teorema de **Lax-Wendroff** establece que un método conservativo si converge, convergerá a la solución débil del problema [28]<sup>7</sup>. El teorema de Lax-Wendroff resulta útil debido a que garantiza que se puede tener confianza en la solución obtenida, si la misma para una grilla lo suficientemente fina describe apropiadamente a las discontinuidades y además resulta razonable, de esta forma, se puede decir que la solución conseguida es una buena aproximación a alguna solución débil del problema bajo estudio [30].

Al definir las condiciones de Rankine-Hugoniot no se tiene en cuenta información alguna de las características, así, una solución como un choque expansivo es admisible. No obstante, a través de un choque se espera que las características converjan y no emanen, sin embargo, un choque expansivo resulta ser una solución débil admisible desde el punto de vista matemático pero carente de significado físico [30]. Por lo tanto, se hacen necesarias condiciones adicionales para de alguna forma garantizar que la solución computada resulte ser válida físicamente, estas condiciones se conocen como **condiciones de admisibilidad** o **condiciones de entropía**. La segunda ley de la termodinámica impone que la entropía de las soluciones obtenidas no debe decaer con el tiempo [30], por lo tanto, a través de un choque la entropía debe aumentar y en consecuencia un choque expansivo es inadmisibile. La anterior discusión pretende dejar claro que el teorema de Lax-Wendroff, si bien garantiza la convergencia a una solución débil, no indica que la misma sea válida desde el punto de vista físico, entonces es necesario que la solución obtenida también respete la condición de entropía.

<sup>7</sup>La solución débil (también conocida como solución generalizada) se puede definir de forma sucinta como aquella función  $u$  que satisface a la EDP pero que admite discontinuidades y, por lo tanto, algunas derivadas de la EDP pueden ser sólo satisfechas parcialmente, para una discusión más profunda de este tópico se recomienda [29]

Un método numérico conservativo será aquel que se pueda escribir en la forma:

$$\mathbf{u}_i^{n+1} = \mathbf{u}_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} [\mathcal{F}_{i+1/2} - \mathcal{F}_{i-1/2}] \quad (4.26)$$

donde  $\mathcal{F}_{i+1/2} = \mathcal{F}_{i+1/2}(\mathbf{u}_{i-l_L}, \dots, \mathbf{u}_{i-l_R})$  es el **flujo numérico**, el cual resulta ser una apropiada aproximación al flujo convectivo  $F_c^8$  de la Ec. 4.22 y  $l_L/l_R$  son dos enteros que identifican a las celdas de cómputo divididas por la interfaz. La elección particular de un flujo numérico da como resultado un método conservativo particular, por ejemplo, los métodos basados en *Riemann solvers* utilizan dichas herramientas para construir los flujos numéricos [30]. Un requisito fundamental del flujo numérico, es la **consistencia**:

$$\mathcal{F}_{i+1/2}(\mathbf{v}) = f(\mathbf{u}) \quad (4.27)$$

Lo cual quiere decir que si los argumentos del flujo numérico son iguales a  $\mathbf{v}$  entonces cuando  $\mathbf{u} = \mathbf{v}$  se recuperará el flujo físico (ver Cap. 2). Es de resaltar que en general el método adoptará una forma particular en función de cómo se determine el flujo numérico, además de acuerdo a que en Ec. 4.26  $\mathbf{u}_i^{n+1} = \mathbf{Q}(\mathbf{u}_{i-1}^n, \mathbf{u}_i^n, \mathbf{u}_{i+1}^n)$ , en la forma expresada aquí el método resulta ser explícito. A continuación se presenta una breve descripción de los diferentes métodos utilizados en este trabajo, sus principales característica y detalles relevantes.

### 4.3.3. Métodos *upwind*

Cuando se resuelven las ecuaciones del flujo compresible en flujos donde los efectos de la compresibilidad están asociados principalmente con la alta velocidad, la información se propaga mediante las ondas presentes en el campo de flujo [30]. Si se considera que para la construcción de un método numérico se utiliza un *stencil* o molécula computacional, la cual se define en función de puntos sobre la grilla alrededor del de interés, entonces, diseñar esquemas que detecten las direcciones de propagación y definan al esquema ponderando ésta información puede resultar en una evaluación más precisa del flujo numérico. Considérese una onda unidimensional que viaja en dirección positiva, para dicha configuración el dominio de dependencia se encuentra a la izquierda del frente de onda, por el contrario, si la onda viajase en dirección negativa, su dominio de dependencia corresponderá a la zona a la derecha de la onda, es claro entonces que el dominio de dependencia siempre está en la región *upwind*, por lo tanto, los métodos numéricos que emplean *stencils* con más información proveniente de dicha región se denominan **métodos *upwind***. Este tipo de métodos resultan muy convenientes ya que tienen en cuenta trascendentes aspectos físicos y matemáticos en su construcción, y por lo general presentan buenas características de estabilidad numérica [10]. Uno de los esquemas numéricos precursores de este tipo de métodos fue el esquema CIR (Courant-Issacson-Rees), el cual haciendo uso de las ecuaciones de conservación escritas en forma cuasi-lineal (también conocida como forma característica Sección.4.3.4) discretiza a las ecuaciones desacopladas de acuerdo a las velocidades de propagación de cada una de ellas, sin embargo, dicho esquema es no conservativo y por lo tanto no trata de forma correcta a las discontinuidades [31].

Por lo tanto, utilizar métodos en los que se ponderan las direcciones de propagación y además se satisface la conservación resulta ventajoso al momento de resolver problemas en campos de flujo en los cuales existen discontinuidades. En esta sección se exploran brevemente métodos con estas características que son relevantes a los fines de la presente tesis.

<sup>8</sup>En lo que sigue la nomenclatura adoptada no distinguirá entre  $\mathcal{F}$  y  $F$ , es decir, se usará  $F$  sin aclarar si se refiere a un flujo numérico ya que esto quedará claro en función del contexto

#### 4.3.4. Técnicas *flux difference splitting (FDS)* - *fluctuation splitting*

Los métodos del tipo *flux difference splitting* o *fluctuation splitting* son una familia de métodos que aparecen luego del esquema introducido por Godunov [32]. El esquema de Godunov, ampliamente conocido, puede ser descrito tomando como punto de partida a la Ec. 4.26, y proponiendo para la evaluación de los flujos:

$$\mathcal{F}_{i-1/2} = \mathcal{RP}(\mathbf{u}_{i-1}^n, \mathbf{u}_i^n) \quad (4.28a)$$

$$\mathcal{F}_{i+1/2} = \mathcal{RP}(\mathbf{u}_i^n, \mathbf{u}_{i+1}^n) \quad (4.28b)$$

donde  $\mathcal{RP}$  indica la solución del problema de Riemann en la región definida por los argumentos y a partir de dicha solución se determinan los flujos numéricos. El esquema introducido por Godunov, propone la solución exacta al problema de Riemann, lo cual resulta excesivamente costoso cuando se abordan problemas multidimensionales y mallas con considerables cantidades de puntos de cálculo [8, 30].

Estos métodos construyen el flujo numérico a partir del cambio que este experimenta en la interfaz debido a las diferentes ondas presentes en el campo de flujo, esta interpretación en función de las ondas se deriva a partir del análisis de los campos característicos asociados a las ecuaciones de transporte a resolver [25, 33].

Este tipo de enfoque ha sido denominado por algunos autores como algoritmo REA (*Reconstruction-Evolve-Averaging*), debido a que involucra los siguientes pasos:

##### 1. Reconstrucción

Se reconstruye una función polinómica  $\tilde{\mathbf{u}}$  a partir de los valores medios  $\mathbf{u}_i$  sobre los puntos nodales. El método original de Godunov utiliza una función constante definida a trozos [32]

$$\tilde{\mathbf{u}}_i = \mathbf{u}_i \quad \forall x \in \{x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}\} \quad (4.29)$$

donde  $\{x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}\}$  define un celda computacional. Es de trascendental importancia hacer notar que el orden del esquema empeorará o mejorará dependiendo de la reconstrucción utilizada, así, de acuerdo a lo mostrado en la Sección. 2.4.4 basta una reconstrucción lineal para obtener segundo orden.

##### 2. Evolución o avance temporal

En este paso se supone que ya se han determinado los flujos numéricos a partir de los datos reconstruidos. La construcción de los flujos sigue los siguientes lineamientos: dado que el flujo en la interfaz es función de la variable de estado  $\mathbf{u}_{i+\frac{1}{2}}$ , es posible definir el promedio temporal en el intervalo  $\Delta t = t_{n+1} - t_n$

$$F_{i-\frac{1}{2}}^n = (\Delta t)^{-1} \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(\mathbf{u}_{i-\frac{1}{2}}^n) dt \quad (4.30)$$

la función  $\mathbf{u}$  de Ec. 4.30 depende de  $t$  y su forma funcional no es conocida, por lo tanto, para evaluar esta integral se utiliza la función polinómica propuesta en la reconstrucción  $\tilde{\mathbf{u}}_i$ , por ejemplo, si se considera al valor constante a trozos propuesto por Godunov, dado que la solución similar al problema de Riemann centrado en la interfaz es constante a lo largo de las características [30], si se busca la solución a lo largo de  $(x - x_{i-1/2})/t = 0$  se consigue el valor reconstruido en  $n$  para  $i - \frac{1}{2}$ . Si se usa la notación establecida previamente que propone la solución al problema de Riemann

$$f(\tilde{\mathbf{u}}_{i-1/2}) = f(\mathcal{RP}(\mathbf{u}_{i-1}^n, \mathbf{u}_i^n))$$

dado que el valor promedio en la interfaz es constante en el intervalo de tiempo  $\Delta t$ , al evaluar Ec. 4.30 se tiene:

$$F_{i-\frac{1}{2}} = f(\mathcal{RP}(\mathbf{u}_{i-1}^n, \mathbf{u}_i^n)) \quad (4.31)$$

Una vez obtenidos los flujos numéricos se lleva a cabo el avance temporal, obteniendo así  $\tilde{\mathbf{u}}_i^{n+1}$ . Dicho avance se realiza utilizando el esquema conservativo definido por la Ec. 4.26.

### 3. Promediado

En el paso anterior se obtuvo el valor asociado a los datos arrojados a partir de la variación dada por la función de reconstrucción, a partir de dichos datos se computa el valor promedio en centroide de la celda  $\mathbf{u}_i$ , es decir:

$$\mathbf{u}_i^{n+1} = \Delta x^{-1} \int_{x-\frac{1}{2}}^{x+\frac{1}{2}} \tilde{\mathbf{u}}_i^{n+1} dx \quad (4.32)$$

La solución al problema de Riemann en las ecuaciones de Euler involucra un sistema de tres tipos de ondas: ondas de expansión, ondas de choque y discontinuidades de contacto. Los patrones de ondas para un caso que no involucra vacío son [8]:

- E-C-S
- S-C-E
- E-C-E
- S-C-S

donde E se refiere a una expansión, C a una discontinuidad de contacto y S a una onda de choque. Estas ondas están asociadas a los autovalores  $\lambda_i$  de la matriz Jacobiana del sistema, y es de hacer notar que la región incógnita entre los estados derecho e izquierdo (Ver Fig. 4.1), está separada siempre por la onda linealmente degenerada.

Partiendo de la forma conservativa de las ecuaciones de gobierno y en vista que el vector de flujos  $\mathbf{F}_c$  es función de las variables conservativas  $\mathbf{F}_c(\mathbf{u}) = [\mathbf{F}_{c,1}(\mathbf{u}), \mathbf{F}_{c,2}(\mathbf{u}), \mathbf{F}_{c,3}(\mathbf{u})]^T$ , entonces, es posible definir la **matriz Jacobiana**  $[A]$  y entonces escribir el sistema de ecuaciones en la forma **cuasi-lineal o característica** [8]:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + [A] \cdot \nabla \mathbf{u} = \mathbf{s} \quad (4.33)$$

donde  $[A] = [A_{ij}^1, A_{ij}^2, A_{ij}^3]^T$  con

$$A_{ij}^k = \frac{\partial f_{c,k;i}}{\partial u_j} \quad (4.34)$$

En 1981 Roe propone reemplazar el problema original por uno linealizado [25]:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + [\check{A}]_{i+\frac{1}{2}} \cdot \nabla \mathbf{u} = \mathbf{s} \quad (4.35)$$

donde  $[\check{A}]_{i+\frac{1}{2}}$  es algún promedio adecuado de  $[A]$  función de  $\mathbf{u}_i$  y  $\mathbf{u}_{i+1}$ , que además satisface las siguientes condiciones :

1.  $[\check{A}(\mathbf{u}, \mathbf{u})]_{i+\frac{1}{2}} = [A(\mathbf{u})]$
2.  $[\check{A}]_{i+\frac{1}{2}}$  tiene un conjunto de autovalores reales tal que:

$$\check{\lambda}_1 \leq \check{\lambda}_2 \leq \dots \leq \check{\lambda}_m$$

con el correspondiente conjunto de autovectores derechos  $\check{\mathbf{R}}$

$$\check{\mathbf{R}}_1, \check{\mathbf{R}}_2, \dots, \check{\mathbf{R}}_m$$

donde estos autovalores son linealmente independientes.

3.  $\mathbf{F}_{i+1} - \mathbf{F}_i = [\check{A}]_{i+\frac{1}{2}}(\mathbf{u}_{i+1} - \mathbf{u}_i)$

La condición 1 asegura la consistencia, la segunda garantiza que el problema linealizado tendrá solución y la tercera es la condición suficiente para que el esquema sea conservativo, y por lo tanto, que se resuelvan de forma apropiada las discontinuidades presentes en el campo de flujo. Otra interesante propiedad del problema linealizado es que cuando interviene una única onda el *solver* de Riemann aproximado la reconoce de forma exacta [8, 31].

Uno de los *solvers* de Riemann aproximados más populares y eficientes es el introducido por Roe [25] y posteriormente simplificado por Roe y Pike [27], versión que se encuentra implementada en openFoam™ y que será presentada subsecuentemente. A continuación se desarrolla un breve resumen del método introducido por Roe debido a que la forma particular del flujo numérico de este método resulta útil para ilustrar de forma precisa la naturaleza de los métodos del tipo FDS.

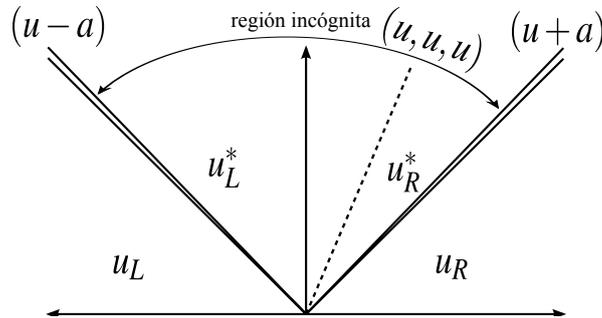


Fig. 4.1: Estructura de la solución al problema de Riemann

Considérese el problema 1D:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + [\check{A}]_{i+\frac{1}{2}} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x} = 0 \quad (4.36)$$

Si la matriz  $[\check{A}]_{i+\frac{1}{2}}$  es diagonalizable, entonces:

$$[\check{A}]_{i+\frac{1}{2}} = [\check{R}][\check{\Lambda}][\check{R}]^{-1} \quad (4.37)$$

donde  $[\check{R}]$  es una matriz cuyas columnas son los autovectores derechos de  $[\check{A}]_{i+\frac{1}{2}}$ <sup>9</sup>. Si se multiplica a la Ec. 4.36 por la matriz de autovectores izquierdos se obtiene:

$$[\check{L}] \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + [\check{L}][\check{A}]_{i+\frac{1}{2}} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x} = 0 \quad (4.38)$$

<sup>9</sup>Nótese que los autovectores izquierdos están dados por  $[\check{L}] = [\check{R}]^{-1}$ .

con lo que considerando  $[\check{L}] [\check{A}] = [\check{\Lambda}] [\check{L}]$ , es posible escribir:

$$[\check{L}] \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + [\check{\Lambda}] [\check{L}] \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x} = 0 \quad (4.39)$$

donde  $[\check{\Lambda}]$  y  $[\check{L}]$  son respectivamente la matriz diagonal de los autovalores de la matriz Jacobiana linealizada  $[\check{A}]$  y la matriz de autovectores izquierdos o la inversa de los derechos. De esta forma el problema original es desacoplado en ecuaciones definidas en términos de las variables características  $\mathbf{W}$  ( $\partial \mathbf{W} = L \partial \mathbf{U}$ ). Para el problema 1D las variables características  $[\check{L}] \mathbf{u}$  tendrán tres componentes:

$$[\check{L}] \mathbf{u}_i = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)^T \quad [\check{L}] \mathbf{u}_{i+1} = (\beta_1, \beta_2, \beta_3)^T \quad (4.40)$$

De forma análoga a lo mostrado en la Fig. 4.1, en términos de las variables características para el caso 1D se observa el sistema de ondas de la Fig. 4.2 con  $(\lambda_1 < 0, \lambda_2, \lambda_3 > 0)$ .

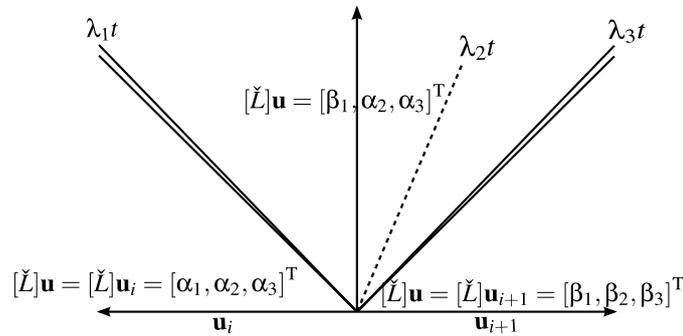


Fig. 4.2: Estructura de la solución al problema de Riemann linealizado

Por lo tanto, a partir de la Ec. 4.40  $\mathbf{u}_{i+\frac{1}{2}}$  resulta:

$$[\check{L}] \mathbf{u}_{i+\frac{1}{2}} = (\beta_1, \alpha_2, \alpha_3)^T \rightarrow \mathbf{u}_{i+\frac{1}{2}} = [\check{R}] (\beta_1, \alpha_2, \alpha_3)^T \quad (4.41)$$

y en consecuencia el flujo puede ser evaluado

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_{i+\frac{1}{2}} &= [\check{A}]_{i+\frac{1}{2}} (\mathbf{u}_{i+\frac{1}{2}} - \mathbf{u}_i) + \mathbf{F}_i \\ &= \mathbf{F}_i + [\check{A}]_{i+\frac{1}{2}} [\check{R}] (\beta_1 - \alpha_1, 0, 0)^T \\ &= \mathbf{F}_i + [\check{R}] [\check{\Lambda}] (\beta_1 - \alpha_1, 0, 0)^T \\ &= \mathbf{F}_i + [\check{R}] [\check{\Lambda}]^{-1} [\check{L}] (\mathbf{u}_{i+1} - \mathbf{u}_i) \\ &= \mathbf{F}_i + [\check{A}]_{i+\frac{1}{2}}^{-} (\mathbf{u}_{i+1} - \mathbf{u}_i) \end{aligned} \quad (4.42)$$

De igual forma es posible definir:

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_{i+\frac{1}{2}} &= \mathbf{F}_{i+1} - [\check{A}]_{i+\frac{1}{2}} (\mathbf{u}_{i+1} - \mathbf{u}_{i+\frac{1}{2}}) \\ &= \mathbf{F}_{i+1} - [\check{A}]_{i+\frac{1}{2}} [\check{R}] (0, \beta_2 - \alpha_2, \beta_3 - \alpha_3)^T \\ &= \mathbf{F}_{i+1} - [\check{R}] [\check{\Lambda}] (0, \beta_2 - \alpha_2, \beta_3 - \alpha_3)^T \\ &= \mathbf{F}_{i+1} + [\check{R}] [\check{\Lambda}]^+ [\check{L}] (\mathbf{u}_{i+1} - \mathbf{u}_i) \\ &= \mathbf{F}_{i+1} + [\check{A}]_{i+\frac{1}{2}}^+ (\mathbf{u}_{i+1} - \mathbf{u}_i) \end{aligned} \quad (4.43)$$

Si se computa la diferencia de flujos  $\mathbf{F}_{i+1} - \mathbf{F}_i$ , se puede observar que las Ec. 4.42 y Ec. 4.43 definen el flujo en la interfaz  $\mathbf{F}_{i+\frac{1}{2}}$  a partir de las contribuciones positiva y negativa de dicha diferencia, debido a esto, las técnicas que definen un flujo en función de su diferencia se conocen en la literatura inglesa como *flux difference splitting* o *fluctuation splitting*.

Se refiere al lector a las referencias [8], [30], [9], [10] y [25] como lecturas recomendadas en lo que respecta a esta familia de técnicas.

A continuación, se presentan los dos *solvers* de Riemann que serán considerados en este trabajo: el de Roe-Pike [27] y el HLLC [34]. Sin embargo, antes de presentar los respectivos *solver* es pertinente hacer un comentario respecto a un subsecuente cambio en la nomenclatura, debido a que en el entorno de openFoam<sup>TM</sup> referirse en términos de índices puede llegar a ser poco conveniente, la nomenclatura se cambiará a  $\mathcal{L}$  y  $\mathcal{R}$  para definir los estados del lado derecho e izquierdo, de forma similar se considera un flujo positivo de  $\mathcal{L} \rightarrow \mathcal{R}$ .

### Roe-Pike Riemann solver

El flujo numérico de Roe se puede escribir en la forma [25]:

$$\mathbf{F}_{i+\frac{1}{2}} = \frac{\mathbf{F}_{i+1} + \mathbf{F}_i}{2} - \frac{1}{2} \left| [\check{A}]_{i+\frac{1}{2}} \right| (\mathbf{u}_{i+1} - \mathbf{u}_i) \quad (4.44)$$

donde

$$\left| [\check{A}]_{i+\frac{1}{2}} \right| = [\check{A}]_{i+\frac{1}{2}}^+ - [\check{A}]_{i+\frac{1}{2}}^- \quad (4.45)$$

En el entorno computacional resulta más conveniente la siguiente forma equivalente a la Ec. 4.44:

$$\mathbf{F}_{i+\frac{1}{2}} = \frac{\mathbf{F}_{i+1} + \mathbf{F}_i}{2} - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^M |\check{\lambda}_i| \check{\mathbf{R}}_i \check{\alpha}_i \quad (4.46)$$

donde  $\alpha_i$  es la intensidad de la onda  $i$  y  $\lambda_i$  y  $\mathbf{R}_i$  el autovalor y autovector derecho asociados a dicha onda. Las intensidades de las ondas dependerán de la forma del *solver* de Riemann que se utilice. En general, la solución a un problema de Riemann que involucre  $M \times M$  ecuaciones de conservación consiste en  $m$  ondas que separan  $m + 1$  estados constantes. A diferencia del método original propuesto por Roe [25], en el cual la evaluación de los autovalores ( $\lambda_i$ ), autovectores ( $\mathbf{R}_i$ ) e intensidades de las ondas ( $\alpha_i$ ) se realiza previa construcción de la matriz Jacobiana linealizada  $[\check{A}]$ , el método alternativo de Roe y Pike evita ensamblar dicha matriz y utiliza promedios entre escalares, que luego pueden ser empleados para determinar ( $\lambda_i$ ), ( $\mathbf{R}_i$ ) y ( $\alpha_i$ ) [27].

Las intensidades de las ondas son

$$\check{\alpha}_1 = (0.5\check{a}^{-2})[\Delta p - \check{\rho}\check{a}\Delta U_1] \quad (4.47a)$$

$$\check{\alpha}_2 = \Delta \rho - \Delta p \check{a}^{-2} \quad (4.47b)$$

$$\check{\alpha}_3 = \check{\rho}\Delta U_2 \quad (4.47c)$$

$$\check{\alpha}_4 = \check{\rho}\Delta U_3 \quad (4.47d)$$

$$\check{\alpha}_5 = (0.5\check{a}^{-2})[\Delta p + \check{\rho}\check{a}\Delta U_1] \quad (4.47e)$$

donde el operador  $\check{\cdot}$  es el **promedio de Roe** y está definido [27]:

$$\{\tilde{\cdot}\} = \frac{\sqrt{\rho_L}\{\cdot\}_L + \sqrt{\rho_R}\{\cdot\}_R}{\sqrt{\rho_L} + \sqrt{\rho_R}} \quad (4.48)$$

El promedio de Roe definido por Ec. 4.48 es válido para las componentes de la velocidad y la entalpía; sin embargo esta última expresión no es aplicable a la densidad, en este caso  $\tilde{\rho}$  resulta:

$$\tilde{\rho} = \sqrt{\rho_L \rho_R} \quad (4.49)$$

Los autovalores asociados a cada onda son:

$$\tilde{\lambda}_1 = \tilde{u} - \tilde{a}; \tilde{\lambda}_{2,3,4} = \tilde{u}; \tilde{\lambda}_5 = \tilde{u} + \tilde{a} \quad (4.50)$$

con sus respectivos autovectores:

$$\tilde{\mathbf{R}}_1 = [1, \tilde{U}_1 - \tilde{a}, \tilde{U}_2, \tilde{U}_3, \tilde{H} - \tilde{U}_1 \tilde{a}]^T \quad (4.51a)$$

$$\tilde{\mathbf{R}}_2 = [1, \tilde{U}_1, \tilde{U}_2, \tilde{U}_3, 0.5 |\tilde{\mathbf{U}}|^2]^T \quad (4.51b)$$

$$\tilde{\mathbf{R}}_3 = [0, 0, 1, 0, \tilde{U}_2]^T \quad (4.51c)$$

$$\tilde{\mathbf{R}}_4 = [0, 0, 0, 1, \tilde{U}_3]^T \quad (4.51d)$$

$$\tilde{\mathbf{R}}_5 = [1, \tilde{U}_1 + \tilde{a}, \tilde{U}_2, \tilde{U}_3, \tilde{H} + \tilde{U}_1 \tilde{a}]^T \quad (4.51e)$$

La velocidad del sonido en el estado promedio de Roe, se calcula de la siguiente manera:

$$\tilde{a} = [(\gamma - 1) (\tilde{H} - 0.5 \tilde{u}^2)]^{1/2} \quad (4.52)$$

Luego de tener las correspondientes intensidades de las ondas, los autovectores y autovalores, el flujo numérico puede ser evaluado a través de la Ec. 4.46.

### El problema de la entropía y el corrector de entropía

En la Fig. 4.3 se ilustra una situación en la que tiene lugar una expansión centrada en el extremo izquierdo, esta expansión es sónica en el punto en el cual el autovalor  $\lambda_1$  cambia de negativo a positivo ( $u = a$ ). Ahora, recordando que una discontinuidad físicamente admisible requiere:

$$S_b \geq S \geq S_a \quad (4.53)$$

donde  $S_b$  y  $S_a$  son las velocidades por detrás y por delante de la onda respectivamente. A partir de la Fig. 4.3 se puede observar que:

$$\lambda(u_L) = S_{HL} = U_L - a_L \rightarrow U_L - a_L < 0 \quad (4.54a)$$

$$\lambda(u_L^*) = S_{TL} = U^* - a_L^* \rightarrow U_L - a_L > 0 \quad (4.54b)$$

La condición Ec. 4.53 implica que las características deben converger hacia la discontinuidad y claramente en el caso aquí descrito sucede lo contrario. Por lo tanto, teniendo en mente que la

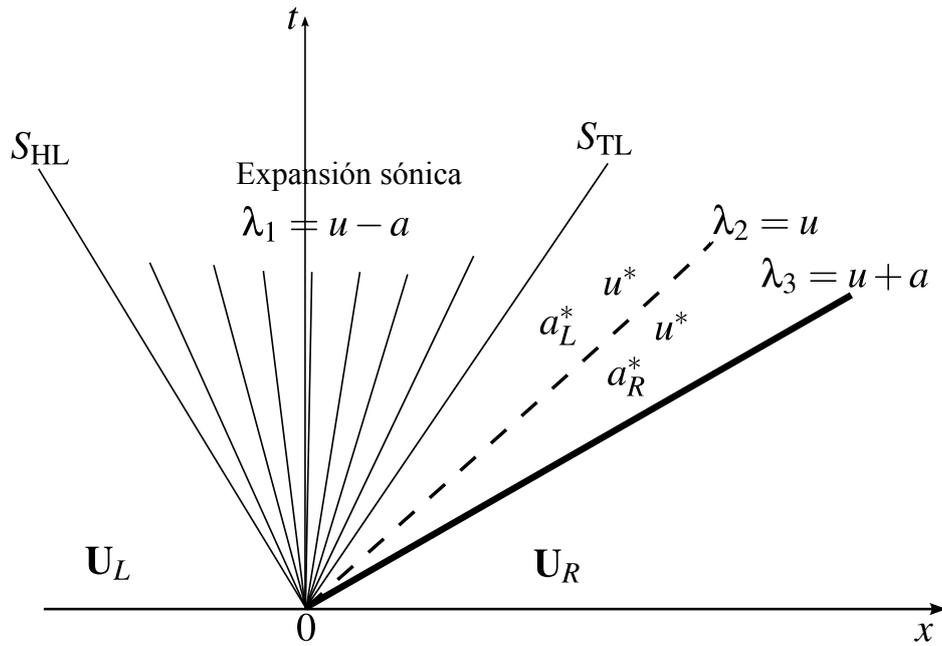


Fig. 4.3: Expansión sónica

solución al problema de Riemann linealizado dada por el *solver* de Roe consiste en saltos discontinuos a través de las ondas, es evidente que dicho procedimiento será efectivo para tratar choques y discontinuidades de contacto, pero dado que las expansiones describen cambios continuos en los parámetros de flujo con una tendencia en los gradientes espaciales a decaer con el tiempo, esta aproximación linealizada por medio de saltos discontinuos no será la más apropiada para tratarlas. [8]. No obstante, en la práctica los casos problemáticos para la aproximación linealizada surgen cuando la expansión es sónica o transónica, lo cual se manifiesta por medio de un comportamiento físicamente incorrecto del campo de entropía, que se conoce como **choque expansivo**.

Para resolver este inconveniente aparecen los denominados **correctores de entropía** (*Entropy Fix*), dentro de los cuales uno de los más conocidos es el propuesto por Harten y Hyman en la década de 1980 [35].

La actual implementación del corrector de entropía de Harten-Hyman en openFoam™ difiere un poco de su forma original presentada en [35], la forma implementada corresponde a la modificación de dicho corrector presentada por Kermani y Plett en 2001, donde proponen una modificación al corrector de Harten-Hyman que expande el rango en el cual se impone la corrección de entropía [36]. Esto de acuerdo con los resultados presentados por dichos autores remueve totalmente el comportamiento no físico en la región de las expansiones sónicas sin afectar otras zonas del dominio de cómputo. La idea básica del corrector de entropía se puede establecer en dos pasos:

1. Localizar la ubicación de la expansión sónica en el dominio de cómputo.
2. Propagar los choques expansivos de dicha región en abanicos de expansión.

El procedimiento de búsqueda se realiza ubicando la región en la cual

$$|\lambda| \rightarrow 0 \vee \epsilon \leq |\lambda| \leq 0 \quad (4.55)$$

donde  $\epsilon$  es una tolerancia definida de forma apropiada. Una vez se ha localizado el autovalor, se propaga la discontinuidad no física sobre el dominio de cómputo dentro de la banda definida por  $\epsilon$ . Esto se lleva a cabo numéricamente desplazando a  $\lambda$  de su origen una distancia determinada. Si  $\check{\lambda}$  es un autovalor obtenido del promedio de Roe, p.ej:

$$\check{\lambda}_1 = \check{u} - \check{c} \quad (4.56)$$

entonces:

$$\check{\lambda}_1^L = \check{u}^L - \check{c}^L \quad (4.57a)$$

$$\check{\lambda}_1^R = \check{u}^R - \check{c}^R \quad (4.57b)$$

El corrector propuesto por Harten-Hyman en su forma original resulta [35]:

$$\begin{cases} \check{\lambda}_{new} = \frac{\check{\lambda}^2 + \epsilon^2}{2\epsilon} & \text{para } \check{\lambda} < \epsilon \\ \epsilon = \max [0, (\check{\lambda} - \check{\lambda}^L), (\check{\lambda}^R - \check{\lambda})] \end{cases} \quad (4.58)$$

La forma modificada de Kermani-Plett [36]

$$\begin{cases} \check{\lambda}_{new} = \frac{\check{\lambda}^2 + \epsilon^2}{2\epsilon} & \text{para } \check{\lambda} < \epsilon \\ \epsilon = 2 \max [0, (\check{\lambda}^R - \check{\lambda}^L)] \end{cases} \quad (4.59)$$

Esta última es la forma del corrector de entropía implementado en `roeFlux.C` de la librería `dbnsFoam`.

### 4.3.5. Solver Harten-Lax-van Leer-Contact (HLLC)

El *solver* de Riemann de Harten-Lax-van Leer (HLL) fue introducido en la década de los 1980 y corresponde a un *solver* de dos ondas, es decir, supone tres estados constantes en los cuales, suponiendo que las velocidades de las ondas están dadas por algún algoritmo adecuado, la aplicación de las leyes de conservación en forma integral proporciona una forma cerrada para determinar el flujo numérico [8, 37].

El *solver* HLL al ser un modelo de dos ondas, es apropiado para sistemas que involucran dos ecuaciones, por lo tanto, al ser aplicado al sistema de Euler se obtiene una resolución imprecisa de las superficies de contacto, las ondas de corte e interfaces entre diferentes materiales [8]. En consecuencia, se han propuesto diferentes mejoras al esquema original, dentro de las cuales están la introducida por Einfeldt en el *solver* HLLM (M por *modified*), la cual propone una aproximación lineal del estado intermedio, la denominada HLLE (E por Einfeldt) que corresponde al modelo HLL con las velocidades de propagación determinadas por el modelo propuesto por Einfeldt [38].

En 1992 Toro propone el *solver* HLLC (C por *contact*), éste es un *solver* de tres ondas completo ya que para las ecuaciones de Euler considera en su estructura aproximada a todos los campos característicos presentes en el problema exacto [8, 34].

El flujo numérico dado por el *solver* HLLC está dado por [34]:

$$\mathbf{F}_{i+\frac{1}{2}} = \begin{cases} \mathbf{F}_L & \text{para } 0 \leq S_L \\ \mathbf{F}_{*L} & \text{para } S_L \leq 0 \leq S_* \\ \mathbf{F}_{*R} & \text{para } S_* \leq 0 \leq S_R \\ \mathbf{F}_R & \text{para } S_L \geq 0 \end{cases} \quad (4.60)$$

donde

$$\mathbf{F}_{*L|R} = [S_M \rho_{L|R}^*, S_*(\rho u)_{L|R}^* + p^* \mathbf{n}, S_*(\rho E)_{L|R}^* + S_* p^*]^T \quad (4.61a)$$

$$\begin{aligned} p^* &= \rho_L (U_{n,L} - S_L)(U_{n,L} - S_*) + p_L \\ &= \rho_R (U_{n,R} - S_L)(U_{n,R} - S_*) + p_R \end{aligned} \quad (4.61b)$$

con  $U_n = \mathbf{U} \cdot \hat{\mathbf{n}}$  y  $S_*$ ,  $S_L$  y  $S_R$  dadas por:

$$S_* = \frac{\rho_R U_{n,R} (S_R - U_{n,R}) - \rho_L U_{n,L} (S_L - U_{n,L}) + p_L - p_R}{\rho_R (S_R - U_{n,R}) - \rho_L (S_L - U_{n,L})} \quad (4.62a)$$

$$S_L = \min [U_{n,L} - a_L, \check{\mathbf{U}} \cdot \hat{\mathbf{n}} - \check{a}] \quad (4.62b)$$

$$S_R = \min [U_{n,R} - a_R, \check{\mathbf{U}} \cdot \hat{\mathbf{n}} + \check{a}] \quad (4.62c)$$

donde  $\check{\mathbf{U}}$  y  $\check{a}$  corresponden a la velocidad del flujo y de propagación de sonido promediadas según Roe.

#### 4.3.6. Técnicas *flux vector splitting* (FVS)

En la sección anterior se introdujo la familia de métodos *flux difference splitting* en los que los flujos numéricos se determinan en función de consideraciones que toman en cuenta la estructura de ondas en la interfaz. Los métodos *flux vector splitting* a pesar de que guardan una intrínseca relación con los FDS, construyen los flujos numéricos a partir de una división de los flujos. Dicha división se realiza básicamente de dos maneras: atendiendo a la dirección de propagación de las ondas o realizando la división en una contribución puramente convectiva y otra de la presión [33]. A la primera variante de los métodos FVS pertenece la descomposición propuesta por de van Leer [39] y a la segunda la familia de esquemas *Advection Upstream Splitting Method* (AUSM) de Liou [26].

Desde su aparición openFoam<sup>TM</sup> no se ha destacado en aplicaciones en el campo del flujo compresible a alta velocidad, y aunque existen eficientes métodos implementados, como el método de los esquemas centrados de Kurganov, antes de 2011 se puede decir que el paquete carecía de un desarrollo formal en lo que respecta a este campo. En 2011 Borm inicia el desarrollo de la librería denominada *Density Based Turbo*, dentro de la cual se implementaron diferentes funciones de flujo del tipo FDS y el flujo AUSM+ ALE<sup>10</sup> para aplicaciones en turbomaquinaria [40]. A partir de la implementación de Borm nace la librería liberada en 2014 denominada dbnsFoam (*Density Based Navier Stokes*), la cual ofrece una estructura de datos particular para el desarrollo de este tipo de esquemas dentro del entorno de openFoam<sup>TM</sup> <sup>11</sup>.

Los esquemas del tipo FVS reconocen que el vector de flujos convectivos  $\mathbf{F}_c$  puede ser escrito:

$$\mathbf{F}_c = \mathbf{F}_c^+ + \mathbf{F}_c^- \quad (4.63)$$

respetando la condición de que los autovalores de las matrices Jacobianas  $[A]^+$  y  $[A]^-$  satisfacen  $\lambda_i^+ \geq 0$  y  $\lambda_i^- \leq 0$ , es posible definir las de la siguiente manera

$$[A]^+ = \frac{\partial \mathbf{F}^+}{\partial \mathbf{u}} \quad (4.64a)$$

<sup>10</sup>Arbitrary-Lagrangian-Eulerian

<sup>11</sup>Para información referente a los esquemas de la familia AUSM y resultados obtenidos en implementaciones con openFoam<sup>TM</sup> se recomiendan las referencias [6, 40–42].

$$[A]^- = \frac{\partial \mathbf{F}^-}{\partial \mathbf{u}} \quad (4.64b)$$

Así, el sistema conservativo dado por Ec. 4.35 se puede escribir:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{F}_c &= \mathbf{s} \\ \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{F}_c^+ + \nabla \cdot \mathbf{F}_c^- &= \mathbf{s} \end{aligned} \quad (4.65)$$

Siguiendo el mismo principio de dividir los flujos, la matriz Jacobiana  $[A]$  puede ser escrita como

$$[A] = [A]^+ + [A]^- \quad (4.66)$$

Es de hacer notar que la división de la matriz Jacobiana satisface los mismos requerimientos que los autovalores, es decir  $[A]^+ \geq 0$  y  $[A]^- \leq 0$ , de esta forma teniendo en cuenta que el vector de flujos es una función homogénea de primer orden<sup>12</sup>, el flujo en la dirección positiva puede ser expresado de acuerdo con

$$\begin{aligned} \mathbf{F}^\pm &= [A]^\pm \mathbf{u} \\ &= [L]^{-1} [\Lambda]^\pm [L] \mathbf{u} \end{aligned} \quad (4.67)$$

Steger y Warming en 1981 encontraron que a partir de la división del vector de flujos es posible definir una división en la velocidad de las ondas *wave speed splitting* (WSP), estos notaron que para cualquier sistema de leyes de conservación con una función de flujo de primer orden, dichos procedimientos de división son equivalentes [43]. Sin embargo, cuando se transforma de WSP hacia FVS el resultado puede no respetar la condiciones requeridas por las matrices Jacobianas y las velocidades de propagación, por lo que, en general es preferible establecer primero la forma FVS para luego discretizar [10].

Resulta interesante hacer la observación que en los métodos del tipo FDS el transporte se debe a las propias ondas mientras que en el contexto de los FVS el transporte se puede interpretar como consecuencia del desplazamiento de partículas [44]. Finalmente y para cerrar esta sección cabe mencionar que los métodos FDS (que en general involucran *solvers* de Riemann) se conocen en la literatura técnica como *Riemann Approach* y los métodos FVS como *Boltzmann Approach*.

### ***Advection Upstream Splitting Method + (AUSM+)***

Los esquemas de la familia AUSM aceptan la división de los flujos convectivos en diferentes contribuciones y proponen hacerla en una debida a la convección pura y otra a la presión [26]:

$$\mathbf{F}_{i+\frac{1}{2}} = \mathbf{F}_{pc} + \mathbf{F}_p \quad (4.68)$$

El primer término del lado derecho corresponde a la convección pura debida a la velocidad  $\mathbf{U}$  y el segundo es gobernado por la velocidad de las ondas acústicas [26]. Como parámetro para determinar la dirección del flujo y evaluar los flujos numéricos se utiliza el número de Mach  $M_{i+\frac{1}{2}}$  y la presión  $p_{i+\frac{1}{2}}$  en la cara de la celda :

$$M_{i+\frac{1}{2}} = \mathcal{M}_{(4,\beta)}^+(M_L) + \mathcal{M}_{(4,\beta)}^-(M_R) \quad (4.69)$$

<sup>12</sup>Se dice que una función es homogénea de primer orden si se verifica que:  $\mathbf{f}(\mathbf{u}) = \frac{d\mathbf{f}}{d\mathbf{u}} \mathbf{u} = [A] \mathbf{u}$

$$p_{i+\frac{1}{2}} = p_{5,\beta}^+(M_L)p_L + p_{5,\beta}^-(M_R)p_R \quad (4.70)$$

donde  $M_{LR}$  es el número de Mach a la izquierda y derecha de la interfaz,  $M_{i+\frac{1}{2}}$  y  $p_{i+\frac{1}{2}}$  el número de Mach y la presión en la interfaz.  $\mathcal{M}_{(4,\beta)}^\pm$  y  $p_{5,\beta}^\pm$  son los números de Mach y presiones asociados a las ondas que viajan desde la derecha y desde la izquierda hacia la cara [45]. Estos parámetros son funciones de  $M_{L,R}$  y quedan determinados de acuerdo con

$$\mathcal{M}_{(4,\beta)}^\pm(M) = \begin{cases} \mathcal{M}_{(1)}^\pm(M) & \wedge |M| \geq 1 \\ \mathcal{M}_{(2)}^\pm(M) [i + 1 \mp 16\beta\mathcal{M}_2^\mp(M)] & \wedge |M| < 1 \end{cases} \quad (4.71a)$$

$$p_{(5,\alpha)}^\pm(M) = \begin{cases} M^{-1}\mathcal{M}_{(1)}^\pm(M) & \wedge |M| \geq 1 \\ \pm\mathcal{M}_{(2)}^\pm(M) [(2 \mp M) - 16\alpha M\mathcal{M}_2^\mp(M)] & \wedge |M| < 1 \end{cases} \quad (4.71b)$$

$$\mathcal{M}_{(2)}^\pm(M) = \begin{cases} \mathcal{M}_{(1)}^\pm(M) & \wedge |M| \geq 1 \\ \pm 0.25(M \pm 1)^2 & \wedge |M| < 1 \end{cases} \quad (4.71c)$$

$$\mathcal{M}_{(1)}^\pm(M) = 0.5(M + |M|) \quad (4.71d)$$

donde  $\alpha = 1/16$  y  $\beta = 1/8$  [45]. Por otra parte, es necesario contar con la velocidad del sonido en la interfaz, la cual se determina a partir de un promedio aritmético:

$$a_{i+\frac{1}{2}} = 0.5(a_R + a_L) \quad (4.72)$$

Finalmente  $M_{LR}$  está dado por:

$$M_{LR} = |\mathbf{U}_{R,L}| a_{i+\frac{1}{2}}^{-1} \quad (4.73)$$

y el flujo convectivo puro resulta:

$$\mathbf{F}_{pc} = 0.5[a_{i+\frac{1}{2}}M_{i+\frac{1}{2}}(\Phi_L + \Phi_R) - a_{i+\frac{1}{2}}|M_{i+\frac{1}{2}}|(\Phi_L - \Phi_R)] \quad (4.74)$$

donde  $\Phi$  es el vector de variables conservativas y finalmente el flujo de presión:

$$\mathbf{F}_p = [0, p, 0]_{\frac{1}{2}}^T \quad (4.75)$$

Luego de considerar las ecuaciones anteriores, el flujo numérico en la interfaz puede ser computado por medio de la Ec. 4.68. El esquema AUSM+ resulta una mejora del esquema AUSM introducido originalmente por Liou y Steffen en 1993. Esta familia de métodos ha sido continuamente mejorados, lo que a dado origen a gran número de variantes [46]. En particular, el esquema AUSM+ con respecto a el AUSM presenta mejoras en los siguientes aspectos:

- Preserva la positividad ( $\rho > 0$ ).
- Mejora la resolución de discontinuidades y choques.
- Simplicidad de implementación.

Para una descripción de la evolución de dichos esquemas se recomienda [46].

### 4.3.7. Algoritmo PISO: *solver* SonicFoam

En esta sección se extiende la descripción del algoritmo PISO dada en la Sección.2.7. La aplicación de este algoritmo hace necesario derivar una ecuación independiente para la presión, lo cual se lleva a cabo empleando las ecuaciones diferenciales de momento y continuidad, sin embargo, si no se asegura que la discretización de cada término en la ecuación derivada para la presión sea consistente con los términos correspondientes en las ecuaciones a partir de las cuales es derivada, puede suceder que la presión y subsecuente campo de velocidad no satisfagan simultáneamente a las ecuaciones de momento y continuidad. Con el objetivo de evitar estas inconsistencias se adopta la práctica de derivar la ecuación para la presión a partir de formas discretas de las ecuaciones de momento y continuidad [1].

A continuación se presentan las ecuaciones de transporte de masa (Ec. 4.7), momento (Ec. 4.8) y energía (Ec. 4.11) en forma discreta utilizando el esquema de Euler implícito:

$$\frac{1}{\Delta t}(\rho^n - \rho^{n-1}) + (\rho u_i)_{,i}^n = 0 \quad (4.76)$$

$$\frac{1}{\Delta t} [(\rho u_j)^n - (\rho u_j)^{n-1}] = -S_{ij,i}^n - (p)_{,j}^n \quad (4.77)$$

$$\frac{1}{\Delta t} [(\rho e_s)^n - (\rho e_s)^{n-1}] + (\rho e_s u_i)_{,i}^n = -(p u_i)_{,i}^n - (\tau_{ij} u_i)_{,j}^n \quad (4.78)$$

aquí  $n - 1$  y  $n$  denotan los pasos de tiempo sucesivos,  $S_{ij,i}$  los flujos discretos convectivos y difusivos de momento y el operador  $(\cdot)_{,i}$  es la representación discreta de  $\nabla \cdot (\cdot)$ . Para mejorar la estabilidad y precisión del método  $S_{ij,i}$  se divide en términos de los componentes de su diagonal ( $D$ ) y aquellos fuera de la misma ( $N$ ), tal como se muestra a continuación [1, 2]:

$$S_{ij,i} = S_{ij,i}^{(D)} + S_{ij,i}^{(N)} = A_{ji}^{(D)} u_i + S_{ij,i}^N \quad (4.79)$$

El método PISO involucra un procedimiento de predicción-corrección no iterativo<sup>13</sup> para lograr satisfacer la ecuación de conservación de la masa corrigiendo simultáneamente el campo de presiones y velocidades. Este procedimiento puede tener como mínimo dos y como máximo cuatro etapas de corrección [1]. Aquí se centra la atención en el procedimiento de dos etapas, el cual se describe a continuación.

#### Esquema de dos etapas

El esquema de dos etapas involucra un paso de predicción tanto para la velocidad (predictor del momento) como para la energía y dos pasos de corrección (primero y segundo corrector de momento y energía).

#### Predictor del momento

Se utilizan las presiones y densidades del paso de tiempo anterior ( $n - 1$ ) y se resuelve la ecuación de momento en forma implícita, con lo que obtiene  $u_i^*$ <sup>14</sup>.

$$\left( \frac{\delta_{ij}}{\Delta t} + \frac{A_{ji}^{(D)}}{\rho^{n-1}} \right) (\rho^{n-1} u_i^*) = -S_{ij,i}^{(N)} - (p^{n-1})_{,j} + \frac{\rho^{n-1} u_i^{n-1}}{\Delta t} \quad (4.80)$$

<sup>13</sup>El procedimiento predicción-corrección resulta ser no iterativo al involucrar distintas ecuaciones en cada etapa.

<sup>14</sup>Aquí  $\delta_{ij}$  corresponde al delta de Kronecker

### Primer corrector de la presión

Se escribe la ecuación de momento en forma explícita

$$\left( \frac{\delta_{ij}}{\Delta t} + \frac{A_{ji}^{(D)}}{\rho^{n-1}} \right) (\rho^* u_i^{**}) = -S_{ij,i}^{*(N)} - p_{,j}^* + \frac{\rho^{n-1} u_i^{n-1}}{\Delta t} \quad (4.81)$$

Luego, restando la Ec. 4.80 de la Ec. 4.81 se puede escribir la ecuación de momento en forma incremental:

$$\rho^* u_i^{**} - \rho^{n-1} u_i^* = - \left( \frac{\delta_{ij}}{\Delta t} + \frac{A_{ji}^{(D)}}{\rho^{n-1}} \right)^{-1} (p^* - p^{n-1})_{,j} \quad (4.82)$$

Se utiliza la ecuación de continuidad en la forma:

$$(\rho^* u_i^{**})_{,i} = -\frac{1}{\Delta t} (\rho^* - \rho^{n-1}) \quad (4.83)$$

Diferenciando la Ec. 4.82 y usando la Ec. 4.83 se obtiene la ecuación para la presión:

$$\left[ \left( \frac{\delta_{ij}}{\Delta t} + \frac{A_{ji}^{(D)}}{\rho^{n-1}} \right)^{-1} (p^* - p^{n-1})_{,j} \right]_{,i} = (\rho^{n-1} u_i^*)_{,i} + \frac{1}{\Delta t} (\rho^* - \rho^{n-1}) \quad (4.84)$$

Al resolver esta ecuación se obtiene  $p^*$ , luego por medio de la ecuación de estado (Ec. 4.18) se determina la densidad:

$$\rho^* = p^* \psi \quad (4.85)$$

A continuación empleando la Ec. 4.83 se corrige la velocidad ( $u_i^{**}$ ) utilizando los campos de presión y densidad obtenidos con la Ec. 4.84 y la Ec. 4.85.

### Predictor de la energía

En este paso la ecuación de la energía (Ec. 4.78) se resuelve de forma implícita

$$\left( \frac{1}{\Delta t} + \frac{B^{(D)}}{\rho^*} \right) (\rho^* e_s^*) = -(\rho e_s u_i)_{,i}^{*(N)} - (p^* u_i^{**})_{,i} + (\tau_{ij} u_i^{**})_{,i} + \frac{\rho^{n-1} e_s^{n-1}}{\Delta t} \quad (4.86)$$

siendo  $B^{(D)}$  la diagonal de la matriz asociada al término convectivo. La temperatura  $T^*$  puede ahora ser evaluada a partir de  $E^*$  y  $u^{**}$ .

### Segundo corrector de la presión y el momento

La ecuación de momento se escribe en la forma:

$$\left( \frac{\delta_{ij}}{\Delta t} + \frac{A_{ji}^{(D)}}{\rho^*} \right) (\rho^{**} u_i^{***}) = -S_{ij,i}^{**(N)} - (p^{**})_{,j} + \frac{\rho^{n-1} u_i^{n-1}}{\Delta t} \quad (4.87)$$

cuya forma incremental es

$$\begin{aligned} \rho^{**} u_i^{***} - \rho^* u_i^{**} = & \\ & \left( \frac{\delta_{ij}}{\Delta t} + \frac{A_{ji}^{(D)}}{\rho^*} \right)^{-1} \left[ -S_{ij,i}^{**(N)} + S_{ij,i}^{*(N)} - \right. \\ & \left. A_{ij} \frac{\rho^* - \rho^{n-1}}{\rho^{n-1}} u_i^{**} - (p^{**} - p^*)_{,j} \right] \end{aligned} \quad (4.88)$$

combinando con la ecuación de continuidad

$$(\rho^{**} u_i^{**})_{,i} = -\frac{1}{\Delta t}(\rho^{**} - \rho^*) \quad (4.89)$$

y con la ecuación de estado escrita ahora de la forma:

$$\rho^{**} = p^{**} \psi^* \quad (4.90)$$

se puede obtener la nueva ecuación para la presión:

$$\begin{aligned} \left[ \left( \frac{\delta_{ij}}{\Delta t} + \frac{A_{ji}^{\{D\}}}{\rho^*} \right)^{-1} (p^{**} - p^*)_{,j} \right]_{,i} - \frac{\psi^*}{\Delta t} (p^{**} - p^*) = \\ \left[ \left( \frac{\delta_{ij}}{\Delta t} + \frac{A_{ji}^{\{D\}}}{\rho^*} \right)^{-1} \left\{ (S_{ki,k}^{*(N)} - S_{ki,k}^{***(N)}) \right. \right. \\ \left. \left. - A_{ji} \left( \frac{\rho^* - \rho^{n-1}}{\rho^{n-1}} \right) u_i^{**} \right\} \right]_{,i} \\ + \frac{p^*}{\Delta t} (\psi^* - \psi^{n-1}) \end{aligned} \quad (4.91)$$

Resolviendo la Ec. 4.91 se obtiene  $p^{**}$  y las ecuaciones Ec. 4.90 y Ec. 4.88 proporcionan respectivamente a  $\rho^{**}$  y  $u_i^{**}$ .

### Segundo predictor de la energía

La ecuación de la energía es actualizada en la siguiente forma :

$$\left( \frac{1}{\Delta t} + \frac{B^{(D)}}{\rho^{**}} \right) (\rho^{**} e_s^{**}) = -(\rho e_s u_i)_{,i}^{*(N)} - (p^{**} u_i^{***})_{,i} + (\tau_{ij} v_i^{***})_{,j} + \frac{\rho^{n-1} e_s^{n-1}}{\Delta t} \quad (4.92)$$

Así,  $T^{**}$  puede se puede evaluar a partir de  $e_s^{**}$  y  $u_i^{***}$ . Es importante hacer notar que el orden formal de exactitud que se logra con el esquema de dos etapas descrito, resulta ser de segundo orden (en errores de discretización). Si se pretende incrementar la exactitud, deben agregarse etapas de corrección. Esto conlleva a un excesivo costo computacional y por consiguiente, el esquema de dos etapas es el más utilizado [1, 2].

De nuevo aquí cada una de las ecuaciones que intervienen en el *solver* se implementan en los archivos de cabecera eEqn.H, pEqn.H y UEqn.H, de forma similar a lo que fue descrito en Sección.3.8.

### 4.3.8. Esquemas centrados de Kurganov

Considérese un problema bidimensional que requiere utilizar millones de celdas de cómputo y que involucra flujo químicamente activo, acotando el problema y proponiendo un modelo cinético que involucra  $N_s$  especies y  $M_r$  reacciones, es claro que por cada celda se deben evaluar un sistema de  $N_s$  ODEs, además, se deben resolver  $N_s$  ecuaciones de transporte de las especies, sumadas a las de momento, de continuidad y de la energía. Es decir que por celda computacional se tienen  $N_s$  ODEs, más  $(4 + (N_s - 1))$  ecuaciones de transporte.

Si para determinar los flujos numéricos se plantea utilizar un método que involucre resolver un problema de Riemann en cada interfaz, para un vector de variables conservativas de dimensión  $N_s + 3$ , es evidente que las operaciones necesarias generarán un costo computacional excesivo. Como una alternativa a dichos métodos en la década de 1990 Nessyahu y Tadmor introducen una familia de esquemas centrados que parten del conocido esquema Lax-Friedrichs [47]. Este esquema se diseña con la premisa de incrementar el orden del esquema original y buscar una forma de reducir la excesiva difusión numérica que introduce, manteniendo su simplicidad de implementación [48].

Este tipo de esquemas han evolucionado como una interesante alternativa en lo que respecta a la solución de leyes de conservación, en <https://www.cscamm.umd.edu/centpack/publications/> se pueden encontrar una amplia gama de referencias que desarrollan diferentes implementaciones para la resolución de variados sistemas.

Para introducir de forma apropiada esta familia de esquemas se hace necesaria una breve revisión del artículo de Nessyahu y Tadmor de 1990, la cual se presenta a continuación [48]. El esquema propuesto de Lax-Friedrichs en una malla 1D tradicional (Fig. 4.4.a) resulta:

$$\mathbf{u}_i^{n+1} = \frac{1}{2} (\mathbf{u}_{i-1}^n + \mathbf{u}_{i+1}^n) - \frac{\Delta t}{2\Delta x} [\mathbf{F}_{1+i}^n - \mathbf{F}_{i-i}^n] \quad (4.93)$$

De Ec. 4.93 se puede afirmar que el cómputo de  $\mathbf{u}_i$  en el siguiente paso temporal es función de

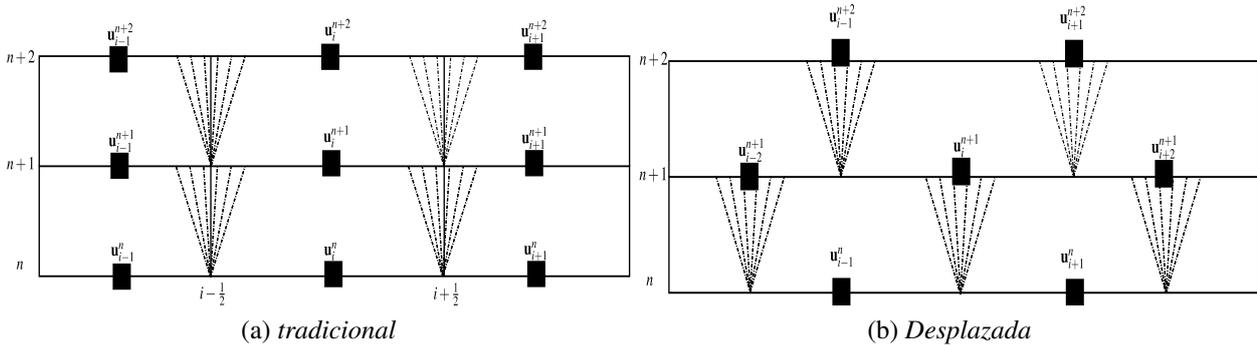


Fig. 4.4: Arreglos de malla unidimensional tradicional y desplazado

los valores nodales en  $(i - 1)$  y  $(i + 1)$ , entonces:

$$i = 1 \rightarrow \mathbf{f}(0, 2)$$

$$i = 2 \rightarrow \mathbf{f}(1, 3)$$

$$i = 3 \rightarrow \mathbf{f}(2, 4)$$

$$i = 4 \rightarrow \mathbf{f}(3, 5)$$

Por lo que, para un índice temporal impar aparecen valores nodales pares, y para uno par impares, en consecuencia tiene sentido utilizar una grilla desplazada en la que dependiendo del paso de tiempo se utilicen índices nodales pares o impares. Por otro lado, si se considera el esquema de Godunov, se puede observar que en la grilla definida anteriormente (Fig. 4.4.b) el esquema de Lax-Friedrichs se puede interpretar como una variante del de Godunov en el cual se resuelven

problemas de Riemann sucesivos que no interactúan entre sí, esta solución se proyecta y promedia sobre la grilla para  $t + \Delta t$ , así, para la solución en tiempo  $n$  el flujo numérico en la interfaz  $(i-1)$ - $(i+1)$  es  $i$ , mientras que en  $n+1$  se debe determinar el flujo en la nueva interfaz  $i-1$ , continuando el proceso de manera análoga. Nótese entonces que el problema de Riemann a resolver en la interfaz se desplaza [30, 48].

Nessyahu y Tadmor, utilizan este tipo de malla desplazada (*staggered*) para definir su esquema, para esto, se integra la ecuación de conservación sobre la celda en la grilla desplazada, de esta forma los valores medios son integrados sobre el abanico de Riemann y así los respectivos flujos numéricos se determinan en el centro de la celda [22, 48]. El precursor de las actuales implementaciones de los esquemas centrados, como ya se ha mencionado fue el esquema de Nessyahu y Tadmor, en el análisis de su familia de esquemas estos autores demuestran que la excesiva difusión numérica introducida puede ser mitigada mejorando las técnicas de reconstrucción [48].

El uso de dos mallas resulta problemático, haciéndose aún más en casos multidimensionales, por lo que se han propuesto diferentes maneras de sortear este inconveniente, por ejemplo, la solución propuesta por Jiang, la cual se basa básicamente en obtener un esquema a partir del promedio aritmético de esquemas definidos sobre celdas contiguas desplazadas [49, 50].

La versión de los esquemas centrados adaptada e implementada en openFoam<sup>TM</sup> corresponde una versión de los esquemas centrados de segundo orden de Kurganov y Tadmor, posteriormente extendidos en [22]. Por lo tanto, antes de presentar la implementación en el entorno de openFoam<sup>TM</sup> se introducen dichos esquemas en un contexto 1D con el fin de exponer de forma clara y concisa sus detalles más relevantes.

Considérese la ley de conservación:

$$u_t + F(u)_x = 0 \quad (4.94)$$

Definido el promedio de  $u$  en la celda,  $\tilde{u}$  dado por:

$$\tilde{u}_c^n = \frac{1}{|I|} \int_{I_c} u(\zeta, t^n) d\zeta \quad I_c = \{x_c - 0.5\Delta x, x_c + 0.5\Delta x\} \quad (4.95)$$

La familia de esquemas se basa en el avance temporal de dichos promedios sobre las celdas mientras se alternan grillas desplazadas:  $\{I_i \times t^n\}$  y  $\{I_{i+1/2} \times t^{n+1}\}$ . Si se integra Ec. 4.94 sobre la grilla desplazada  $\{I_{i+1/2} \times [t^n, t^{n+1}]\}$  se tiene:

$$\tilde{u}_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} = \tilde{u}_{i+\frac{1}{2}}^n - \Delta x^{-1} \left[ \int_{t^n}^{t^{n+1}} F(u(x_{i+1}, \tau)) d\tau - \int_{t^n}^{t^{n+1}} F(u(x_i, \tau)) d\tau \right] \quad (4.96)$$

La forma discreta del esquema se consigue evaluando el miembro derecho de Ec. 4.96, para esto se procede en dos pasos, primero se integran los valores reconstruidos de los datos nodales promedio  $u_i^n$  de  $u(x, t^n)$ , con lo cual se obtienen los valores promedios en la celda  $\tilde{u}_{i+1/2}$ . Para la reconstrucción se propone una interpolación polinómica a trozos  $u_i$  en la forma [22, 49]:

$$u(x, t^n) = R(x, \tilde{u}^n) = \sum p_j(x) \zeta_j(x) \quad (4.97)$$

donde  $\zeta(x)$  es la función característica de la celda  $i$  y  $p_i(x)$  es un polinomio que se construye a partir de los promedios nodales [22]. El procedimiento de reconstrucción es trascendente para obtener alta resolución con los esquemas centrados y en general los coeficientes de  $p_i(x)$  deben determinarse de forma que la función de reconstrucción satisfaga:

- Ser conservativo en la celda ( $\tilde{p}_i^n(x) = \tilde{u}_j^n$ ).
- La precisión de  $R(x, \tilde{u}^n) = u(x, t^n) + \mathcal{O}((\Delta x)^r)$  debe ser consistente con la del esquema.
- La función de reconstrucción debe ser no oscilatoria. Este requerimiento depende del tipo de procedimiento de reconstrucción, dentro de las más conocidas se encuentran las reconstrucciones TVD (Sección.2.4.4) [51, 52], las del tipo ENO (*essentially nonoscillatory*) y sus versiones WENO (*Weighted Essentially Non-Oscillatory*) [53, 54].

Una vez se ha efectuado la reconstrucción, el siguiente paso consiste en evaluar las integrales del miembro derecho de Ec. 4.96, dado que en  $[x = x_i] \times [t_n, t_{n+1}]$  las solución de Ec. 4.96 permanece constante, evaluar dicha integral con una cuadratura simple resulta suficiente [21]. La modificación ofrecida por Kurganov y Tadmor radica en una mejora en la evaluación de las velocidades de propagación en la interfaz, lo que junto con apropiados procedimientos de reconstrucción garantizan una buena resolución de las discontinuidades.

Se propone en lugar de utilizar una celda de tamaño constante  $\Delta x$ , utilizar celdas con  $\Delta x \sim \mathcal{C}(\Delta t)$ , para esto se incorpora la máxima velocidad de propagación en la interfaz:

$$a_{i+\frac{1}{2}}^n = \max_{u \in \mathcal{C}(u_{i+1/2}^-, u_{i+1/2}^+)} \rho_e\left(\frac{\partial}{\partial u} F(u)\right) \quad (4.98)$$

donde  $u_{i+1/2}^-$   $u_{i+1/2}^+$  son los valores reconstruidos de  $u$  a la izquierda y derecha de la interfaz

$$u_{i+\frac{1}{2}}^\pm = R(x_{j+\frac{1}{2}} \pm, \tilde{u}^n) \quad (4.99)$$

donde  $\rho_e()$  es el radio espectral de  $\frac{\partial F}{\partial U}$  y  $\mathcal{C}$  la curva que conecta a estos dos estados a través del abanico de Riemann en plano de fase<sup>15</sup>. En el caso genuinamente no lineal y linealmente degenerado la Ec. 4.106b se reduce a [23]:

$$a_{i+\frac{1}{2}}^n = \max \left( \rho\left(\frac{\partial}{\partial u} f(u_{i+1/2}^+), \rho\left(\frac{\partial}{\partial u} f(u_{i+1/2}^-)\right) \right) \right) \quad (4.100)$$

<sup>15</sup>si  $\lambda_i(A)$  son los autovalores de  $[A]$ , entonces  $\rho_e(A) = \max_i |([A])|$

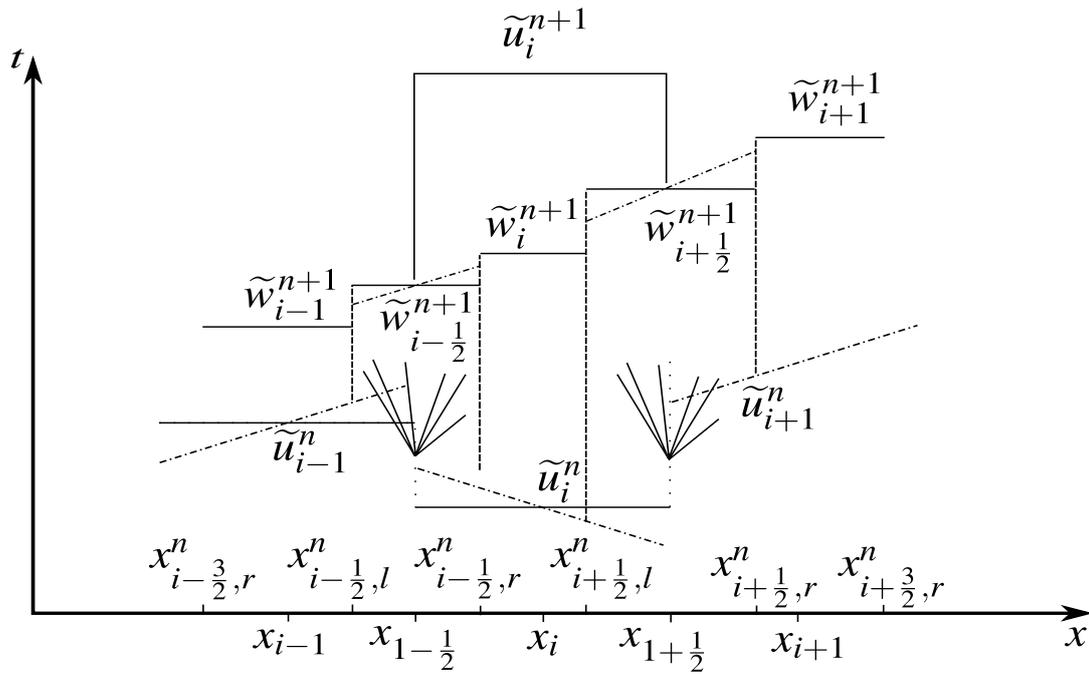


Fig. 4.5: Esquema centrado de Kurganov & Tadmor (figura adaptada de [21, 55])

Al tener la información de la velocidad de propagación en la interfaz es posible generar una grilla desplazada con respecto a la original con celdas  $2a_{i+1/2}\Delta t^n$ , donde la solución depende de la distribución del abanico de Riemann (ver Fig. 4.5):

$$\begin{aligned} I_{i+1/2}^R &= [x_{i+1/2,r}, x_{i+1/2,l}] \\ &= [x_{i+1/2} - a_{i+1/2}\Delta t^n, x_{i+1/2} + a_{i+1/2}\Delta t^n] \end{aligned} \quad (4.101)$$

Mientras que en la grilla  $(\Delta x)_j = \Delta x - \Delta t^n(a_{i-1/2} + a_{i+1/2})$  se encuentra por fuera de la influencia del abanico y por lo tanto la solución permanece continua:

$$\begin{aligned} I_i &= [x_{i-1/2,r}, x_{i+1/2,l}] \\ &= [x_{i-1/2} + a_{i-1/2}\Delta t^n, x_{i+1/2} - a_{i+1/2}\Delta t^n] \end{aligned} \quad (4.102)$$

En la zona influenciada por el abanico, la solución  $w_{i+1/2}^{n+1}$  se determina utilizando la grilla desplazada ( $\Delta x \sim \mathcal{O}(\Delta t)$ ) (definida en la vecindad del abanico). En la zona de no influencia se determina  $w_i^{n+1}$ . Habiendo determinado las evoluciones temporales sobre la malla desplazada se recupera la solución sobre la malla no desplazada utilizando el procedimiento de reconstrucción (para detalles ver [21]). La versión semi-discreta del esquema de Kurganov y Tadmor puede escribirse en forma conservativa como:

$$\frac{d}{dt}u_i = \Delta x^{-1} (F_{i-1/2} - F_{i+1/2}) \quad (4.103)$$

donde el flujo numérico está dado por:

$$F_{i+\frac{1}{2}} = \frac{f(u_{i+1/2}^+) + f(u_{i+1/2}^-)}{2} - \frac{a_{i+1/2}}{2} [u_{i+1/2}^+ + u_{i+1/2}^-] \quad (4.104)$$

Para el caso de las ecuaciones de Euler en 1D el radio espectral claramente será  $|u + a|$  y por lo tanto la velocidad de propagación quedará determinada por:

$$a_{i+\frac{1}{2}} = \max \left( |u_{i+1/2}^+ + c_{i+1/2}^+|, |u_{i+1/2}^- + c_{i+1/2}^-| \right) \quad (4.105)$$

En 2001 Kurganov, Noelle y Petrova introducen una nueva mejora al esquema, proponen mejorar el cómputo de la velocidad de propagación pero esta vez distinguir las velocidades de las discontinuidades a partir de su dirección de propagación [22].

$$a_{i+\frac{1}{2}}^+ = \max_{u \in \mathcal{C}(u_{i+1/2}^-, u_{i+1/2}^+)} \left\{ \lambda_N \left( \frac{\partial}{\partial u} F(u), 0 \right) \right\} \quad (4.106a)$$

$$a_{i+\frac{1}{2}}^- = \min_{u \in \mathcal{C}(u_{i+1/2}^-, u_{i+1/2}^+)} \left\{ \lambda_1 \left( \frac{\partial}{\partial u} F(u), 0 \right) \right\} \quad (4.106b)$$

En particular para el caso genuinamente no lineal y el linealmente degenerado se tiene:

$$a_{i+\frac{1}{2}}^+ = \max \left\{ \lambda_N \left( \frac{\partial}{\partial u} f(u_{i+1/2}^-), \lambda_N \left( \frac{\partial}{\partial u} f(u_{i+1/2}^+), 0 \right), 0 \right\} \quad (4.107a)$$

$$a_{i+\frac{1}{2}}^- = \min \left\{ \lambda_1 \left( \frac{\partial}{\partial u} f(u_{i+1/2}^-), \lambda_1 \left( \frac{\partial}{\partial u} f(u_{i+1/2}^+), 0 \right), 0 \right\} \quad (4.107b)$$

Es de hacer notar que a diferencia del esquema de Kurganov y Tadmor, luego de la modificación propuesta por Kurganov, Noelle y Petrova, la velocidad de propagación en lugar de utilizar únicamente el radio espectral tiene en cuenta  $\lambda_1$  y  $\lambda_N$  y de  $[A]$ . El respectivo flujo numérico para el esquema de Kurganov, Noelle y Petrova es:

$$F_{i+\frac{1}{2}} = \frac{a_{i+1/2}^- f(u_{i+1/2}^+) + a_{i+1/2}^+ f(u_{i+1/2}^-)}{a_{i+1/2}^+ + a_{i+1/2}^-} + \frac{a_{i+1/2}^+ a_{i+1/2}^-}{a_{i+1/2}^+ - a_{i+1/2}^-} [u_{i+1/2}^+ - u_{i+1/2}^-] \quad (4.108)$$

Este esquema, al distinguir las direcciones de propagación y ponderar dichas contribuciones en su construcción, se puede decir que cuenta con algún grado de *upwinding*, por lo que esta familia de esquemas ha sido denominada como *Central Upwind*. De nuevo resulta útil hacer notar que para el caso de las ecuaciones de Euler, la velocidad de propagación en la interfaz para la discontinuidad que viaja a la izquierda está dada por:

$$a_{i+\frac{1}{2}}^- = -\min \left( u_{i+1/2}^+ - c_{i+1/2}^+, u_{i+1/2}^- - c_{i+1/2}^- \right) \quad (4.109)$$

Aquí se han introducido de forma sucinta los esquemas centrados en un dominio unidimensional, es de destacar que esta familia de esquemas al no requerir información detallada de la estructura de las ondas en la interfaz, proporcionan una alternativa más económica a los esquemas basados en información precisa de dicha estructura como los que involucran *solvers* de Riemann. La modificación incluida en [22] ofrece una mejor estimación de las velocidades de propagación, lo que se ve reflejado en que se determina con mayor precisión el ancho del abanico de Riemann, y por lo tanto se consigue una resolución de las discontinuidades que muestra menor difusión numérica [22]. Por otro lado, se mencionó que la reconstrucción juega un papel esencial en la correcta

descripción de las discontinuidades y en el alto orden del esquema, por lo que en diferentes trabajos se han probado distintas técnicas de reconstrucción, para mayor información se sugieren las siguientes referencias [21–23, 53, 56]. En cuanto a la extensión de este tipo de esquemas en el contexto de mallas poliédricas no estructuradas, para el caso de gases no reactivos en el artículo de 2010 de Greenshields et al. [57] se presentó una adaptación de los esquemas de Kurganov-Tadmor y Kurganov, Noelle y Petrova utilizando la estructura de datos ofrecidos por openFoam<sup>TM</sup>. A continuación se presenta una breve descripción de la implementación de Greenshields et al. conocida dentro del paquete openFoam<sup>TM</sup> como rhoCentralFoam. El *solver* desarrollado en esta tesis y que será introducido en el Capítulo 5 se basa en la implementación de Greenshields et al. y corresponde a su extensión al caso de flujo químicamente activo.

### RhoCentralFoam

Como se mencionó en la sección anterior, al igual que el algoritmo PISO la técnica utilizada en rhoCentralFoam involucra *solvers* de Riemann y también provee soluciones no oscilatorias de notable calidad. Esto la hace muy atractiva para ser utilizada en problemas que requieren excesivo esfuerzo computacional ya sea porque involucran geometrías complejas, efectos químicos o niveles de resolución demandantes.

En flujos compresibles con altas velocidades las propiedades del fluido además de ser transportadas por el flujo, también lo son por la propagación de las distintas ondas presentes, de acuerdo a lo anterior, se hace necesario que en la construcción de la interpolación de los flujos desde el centro de la celda propietaria y de las celdas vecinas a la superficie en cuestión, se tenga en cuenta que dicho transporte puede ocurrir en cualquier dirección.

Los términos convectivos de las ecuaciones de transporte de masa, momento y energía son de la forma  $\nabla \cdot [\mathbf{U}\rho]$ ,  $\nabla \cdot [\mathbf{U}(\rho\mathbf{U})]$ ,  $\nabla \cdot [\mathbf{U}(\rho E)]$  y  $\nabla \cdot [\mathbf{U}p]$ . Cada uno de estos términos se integra sobre el dominio y se linealiza de la siguiente forma [57]:

$$\int_V \nabla \cdot [\mathbf{U}\Psi] dV = \sum_f [\mathbf{S}_f \cdot \mathbf{U}_f] \Psi_f \approx \sum_f \phi_f \Psi_f \quad (4.110)$$

donde  $\phi_f = \mathbf{S}_f \cdot \mathbf{U}_f$  es el flujo volumétrico (volumen de flujo que atraviesa una cara por unidad de tiempo). El flujo se divide en dos direcciones una saliente y otra entrante a la cara de la celda propietaria, de esta forma para evaluar  $\sum_f \phi_f \Psi_f$  se tiene el siguiente esquema:

$$\sum_f \phi_f \Psi_f = \sum_f [\alpha \phi_{f_+} \Psi_{f_+} + (1 - \alpha) \phi_{f_-} \Psi_{f_-} + \omega_f (\Psi_{f_-} - \Psi_{f_+})] \quad (4.111)$$

En la Ec. 4.111  $f_+$  y  $f_-$  denotan direcciones que coinciden con las de  $+\mathbf{S}_f$  y  $-\mathbf{S}_f$  respectivamente. El primero y el segundo término del lado derecho de Ec. 4.111 son las evaluaciones de los flujos en las direcciones  $f_+$  y  $f_-$ . El tercer término es necesario cuando el término convectivo a evaluar es parte de una derivada substancial (p.ej,  $\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \nabla \cdot [\mathbf{U}(\rho u_i)]$ ). Este término difusivo adicional usa un flujo volumétrico  $\omega_f$  el cual se determina teniendo en cuenta la máxima velocidad de propagación de cualquier discontinuidad que pudiera existir entre valores interpolados en las direcciones  $f_+$  y  $f_-$  [57].

Los flujos volumétricos  $\phi_{f_+}$  y  $\phi_{f_-}$  asociados a las velocidades locales de propagación pueden ser determinados de la siguiente forma:

$$\phi_{f_+} = \max(a_{f_+} |\mathbf{S}_f| + \phi_{f_+}, a_{f_-} |\mathbf{S}_f| + \phi_{f_-}, 0) \quad (4.112)$$

$$\varphi_{f_-} = \max(a_{f_+} |\mathbf{S}_f| - \phi_{f_+}, a_{f_-} |\mathbf{S}_f| - \phi_{f_-}, 0) \quad (4.113)$$

donde  $a_{f_{\pm}} = \sqrt{\gamma \frac{R_u}{W} T_{f_{\pm}}}$  es la velocidad del sonido del gas saliente y entrante por la cara de la celda propietaria, como se puede ver en la Ec. 4.111 aparece el coeficiente de ponderación  $\alpha$ , éste determina el grado de *upwinding* que se le da al esquema, así, si se toma el coeficiente  $\alpha = 1/2$ , el esquema resulta ser centrado debido a que las contribuciones de  $f_+$  y  $f_-$  son ponderadas por igual.

Por otro lado, si el coeficiente se determina de acuerdo con  $\alpha = \frac{\varphi_{f_+}}{(\varphi_{f_+} - \varphi_{f_-})}$ , el esquema resulta ser centrado con cierto grado de *upwinding*, en consecuencia a este tipo de esquemas se les denomina en la bibliografía inglesa como *central-upwind schemes*. El término asociado al flujo volumétrico difusivo  $\omega_f$  se determina como [57]:

$$\omega_f = \begin{cases} \alpha \max(\varphi_{f_+}, \varphi_{f_-}) & \text{Para el esquema de KT} \\ \alpha (1 - \alpha) (\varphi_{f_+} + \varphi_{f_-}) & \text{Para el esquema de KNP} \end{cases} \quad (4.114)$$

El método propuesto requiere la interpolación de los flujos  $f_+$  y  $f_-$  de las distintas variables involucradas ( $\rho$ ,  $T$ , etc) desde los centros de las celdas vecinas hacia las interfaces, para llevar a cabo dicha tarea el procedimiento de interpolación utiliza una función limitadora  $\beta(r)$ , donde  $r$  corresponde a la relación entre los gradientes sucesivos de la variable interpolada (con  $r \geq 0$ ). Las funciones limitadoras a considerar aquí corresponden a la de van Leer, van Albada y MinMod de Roe.<sup>16</sup>[58–60]:

VanLeer	$\frac{r+ r }{1+r}$
VanAlbada	$\frac{r+r^2}{1+r^2}$
MinMod	$\max(0, \min(1, r))$

Tabla 4.2: Funciones limitadoras: VanLeer, VanAlbada y MinMod

Así, la interpolación  $f_+$  de  $\Psi$  puede ser evaluada según:

$$\Psi_{f_+} = (1 - g_{f_+}) \Psi_P + g_{f_+} \Psi_N \quad (4.115)$$

donde  $g_{f_+} = \beta(1 - w_f)$ . El coeficiente de ponderación  $w_f$  dado por:

$$w_f = \frac{|\mathbf{S}_f \cdot \mathbf{d}_{fN}|}{|\mathbf{S}_f \cdot \mathbf{d}_{PN}|} \quad (4.116)$$

donde los vectores  $\mathbf{d}_{PN}$  y  $\mathbf{d}_{fN}$  son respectivamente, el vector que une los centroides de dos celdas contiguas y el vector que une el centro de interfaz con el centroide de la celda vecina (ver Fig. 4.6). Los términos gradientes se discretizan de acuerdo a lo que se expone en la Sección.2.4.7 del Cap. 2. El procedimiento de interpolación se divide de acuerdo a las direcciones  $f_+$  y  $f_-$  [23, 57]:

$$\sum_f \mathbf{S}_f \Psi_f = \sum_f [\alpha \mathbf{S}_f \Psi_{f_+} + (1 - \alpha) \mathbf{S}_f \Psi_{f_-}] \quad (4.117)$$

Las interpolaciones en  $f_+$  y  $f_-$  utilizan las funciones limitadoras que fueron descritas previamente (Ec. 4.115).

En openFoam<sup>TM</sup> la implementación numérica de rhoCentralFoam se realiza utilizando los archivos de cabecera readFluxScheme.H, createFields.H, rhoBoundaryTypes.H

<sup>16</sup>Por conveniencia aquí se utilizarán las contracciones vanLeer, vanAlbada y MinMod para denotar a las respectivas funciones limitadoras de van Leer, van Albada y MinMod de Roe.

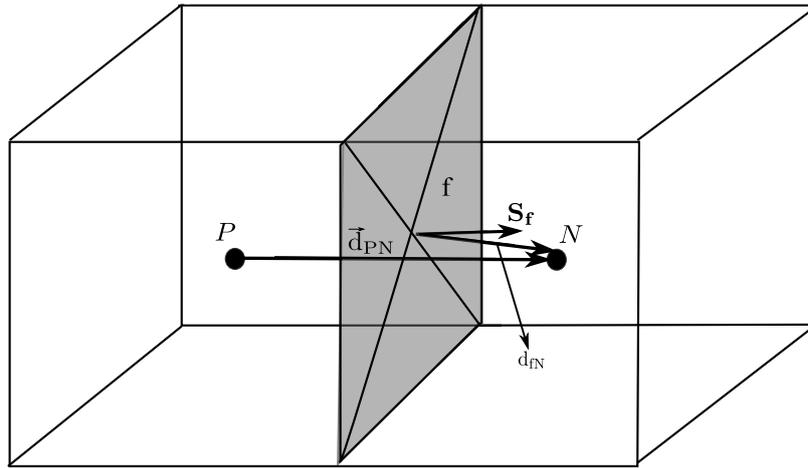


Fig. 4.6: Discretización por volúmenes finitos (vectores involucrados en el cómputo de  $w_f$ )

y

`rhoCentralFoam.C`. El primero lee la línea correspondiente del archivo `fvSolution`, donde se declara si se emplea el esquema KT o KNP, los cuales se identifican con las palabras claves `Tadmor` y `Kurganov`. El archivo `createFields.H` se encarga de inicializar y leer las condiciones de borde impuestas en los diferentes campos involucrados en la simulación (p.ej,  $\rho U$ ,  $\rho e$ ,  $T$ ,  $\psi$ ,  $p$ ,  $e$ ). Las condiciones de borde se imponen sobre  $p$ ,  $T$  y  $U$ , pero en este caso también se requiere imponer condiciones sobre  $\rho$ , el archivo `rhoBoundaryTypes.H` impone condiciones a  $\rho$  partiendo de las dadas para  $p$  y  $T$ . Finalmente, en `rhoCentralFoam.C` se resuelven las diferentes ecuaciones de transporte involucradas empleando la técnica descrita previamente (interpolando los valores de las variables hacia las caras de las celdas, luego determinando las velocidades de propagación local  $a_{\pm}$  en las direcciones  $f_+$  y  $f_-$  respectivamente y determinando con  $\alpha$  y  $\omega_f$  el grado *upwinded* del esquema numérico).

## 4.4. Casos de prueba

En esta sección se presentan las simulaciones de tres casos de prueba y se describen algunos pormenores relevantes a la construcción de cada uno de ellos. Estos casos de prueba corresponden al flujo sobre un perfil tipo doble cuña, el flujo a la entrada y en el conducto de una toma de aire y el flujo alrededor de un cuerpo romo considerando geometría bidimensional y axisimétrica.

Previo a la descripción de los resultados de las simulaciones, se incluyen dos secciones con comentarios adicionales relacionados a la selección de los esquemas numéricos y al ingreso de datos para el modelo termofísico.

### 4.4.1. Selección de los esquemas numéricos y algoritmos de solución

En el caso de `sonicFoam` se selecciona para la integración temporal el esquema de Euler implícito, para la evaluación de los gradientes el esquema centrado y para los términos convectivos los esquemas que se listan a continuación:

- `div(phi,U) → upwind`

- `div(phiD,U) → limitedLinear`
- `div(phi,e) → limitedLinear`
- `div(phiU,p) → limitedLinear`

El único término que involucra la evaluación del laplaciano resulta ser `laplacian((rho*(1|A(U))),p)`, que corresponde al término  $\nabla \cdot (\rho(a_p)^{-1} \nabla p)$  de la ecuación de la presión, este término se discretiza utilizando el esquema centrado con corrección. En cuanto a los algoritmos de solución, se mantienen los utilizados en la Sección.3.9.4.

En el caso de `rhoCentralFoam` se selecciona el esquema de Kurganov, Noelle y Petrova (NKP) atendiendo a que ha mostrado una mejor precisión comparado con el esquema de Kurganov y Tadmor (ver Sección.4.3.8) [57]. Para llevar a cabo el avance en el tiempo se utiliza el esquema de Euler explícito y debido a que no se consideran los efectos de la viscosidad no se requiere definir ningún esquema para la evaluación de los laplacianos.

En lo que respecta a la selección de los algoritmos de solución, al efectuarse el avance temporal con `rhoCentralFoam` de forma explícita, la matriz resultante de la discretización es diagonal y dentro de `openFoam™` se cuenta con el `solver Diagonal`, el cual implementa el procedimiento de solución aplicable a matrices diagonales [61].

Con `dbnsFoam` se utiliza el esquema de Euler implícito para el avance temporal, los términos convectivos se evalúan utilizando los flujos numéricos dados por los esquemas: AUSM+, el `solver` de Riemann de Roe o `solver` de Riemann HLLC.

#### 4.4.2. Datos para el modelo termofísico

Se considera que el fluido se comporta como un gas calórico perfecto, con lo cual los valores de  $C_p$  y  $C_v$  son constantes. Tal como se indicó al principio del presente capítulo y no obstante que los `solvers` permiten abordar problemas considerando la viscosidad molecular e incluso la turbulencia, aquí se restringe al problema invíscido, por lo tanto, se impone valor nulo del coeficiente de viscosidad y en consecuencia todos los términos de origen viscoso en las ecuaciones de transporte no son tenidos en cuenta.

Para ingresar los datos del modelo termofísico se utiliza un archivo de texto denominado: `thermophysicalProperties`

En el cual se declaran: el gas de trabajo, número de moles,  $C_p$  o  $C_v$ ,  $H_f$ ,  $\mu$  y  $Pr$ . El formato de dicho archivo se puede ver en la Lista de entrada 4.1.

```

1 thermoType          ePsiThermo<pureMixture<constTransport
2 specieThermo<eConstThermo<perfectGas >>>>;
3 mixture             GasName N W (Cp,Cv) Hf mu Pr;
```

Lista de entrada 4.1: Entrada de los datos para el modelo termofísico

En la línea 1 de la Lista de entrada 4.1 se proporciona al `solver` el modelo termofísico a utilizar, la entrada `ePsiThermo` indica que el modelo se basa en la energía interna ( $e$ ) y la compresibilidad ( $\psi$ ), continuación `pureMixture` establece que el gas se considera como una mezcla homogénea.

Luego por medio de la palabra clave `constTransport` se imponen propiedades de transporte constantes. La palabra clave `specieThermo` impone que las propiedades termofísicas del gas serán calculadas a partir de los datos proporcionados, es decir, dados  $W$  y  $R_u$  la constante particular del gas queda determinada como  $R = R_u/W$ . La siguiente entrada `eConstThermo` impone que se debe proporcionar el valor de  $C_v$  y en función de éste y la energía proveniente de la ecuación de transporte se evalúa  $T$ . La última entrada `perfectGas` define la ecuación de estado a utilizar, en este caso  $p = \rho RT$ .

En la línea de 2 se deben ingresar los datos correspondientes al nombre del gas, masa molecular, número de moles,  $C_p$  o  $C_v$  dependiendo de si se utiliza el modelo `hConstThermo` o `eConstThermo` lo cual depende de la variable energética que se resuelva. La siguiente entrada  $H_f$  corresponde a la entalpía de referencia, las dos entradas siguientes son respectivamente el coeficiente de viscosidad y el número de Prandtl. Con la finalidad de no considerar los efectos viscosos se tomará  $\mu = 0$  y  $Pr = 1$  para evitar problemas numéricos relacionados con indeterminación.

#### 4.4.3. Flujo supersónico sobre un perfil tipo doble cuña

Como primer caso de prueba se propone al flujo a  $M_\infty = 3$  sobre un perfil tipo doble cuña. La configuración del modelo de prueba se observa en la Fig. 4.7.

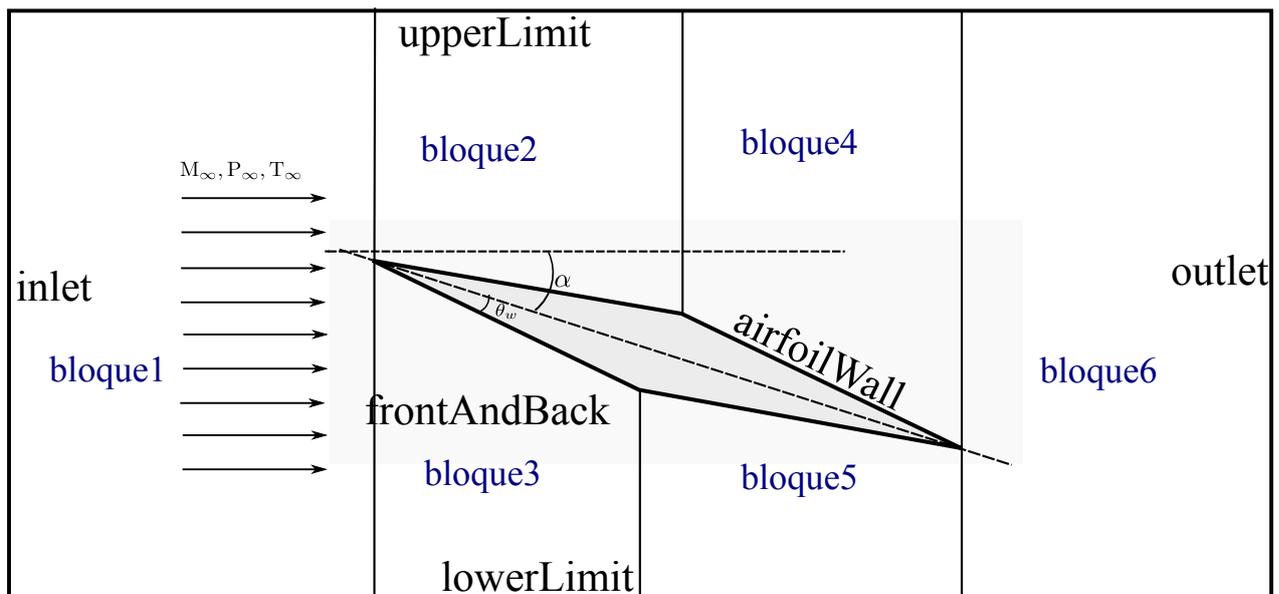


Fig. 4.7: Dominio de cálculo: perfil doble cuña.

Aquí,  $\theta_w$  es el ángulo de la superficie del perfil respecto a la línea media,  $\alpha$  el ángulo de ataque y las condiciones de la corriente libre se identifican por medio del subíndice  $\infty$ . Las condiciones de borde empleadas en este caso se detallan en la Tab. 4.3. Cabe notar, que en vista que a la salida se espera flujo supersónico se utiliza la condición de gradiente nulo en dicho contorno. Antes de mostrar los resultados obtenidos por medio de las simulaciones efectuadas y su comparación con soluciones teóricas disponibles, se presenta un análisis cualitativo del probable patrón de flujo sobre el perfil. Con base en la Fig. 4.8 para  $\alpha > 0$  se identifican las siguientes ondas en el campo de flujo (Fig. 4.9):

- Entre las regiones I y II se presenta un abanico de expansión.

Contorno	$p[kPa]$	$T[K]$	$U[m/s]$
<i>inlet</i>	101325	288.15	(1020.89, 0, 0)
<i>lowerLimit</i>	zG	zG	zG
<i>airfoilWall</i>	zG	zG	slip
<i>outlet</i>	zG	zG	zG
<i>upperLimit</i>	zG	zG	zG
<i>frontAndBack</i>	empty	empty	empty

Tabla 4.3: Condiciones de borde: perfil doble cuña

- Entre las regiones II y III se presenta un abanico de expansión.
  
- Entre las regiones I y IV se presenta una onda de choque.
  
- Entre las regiones IV y V se presenta un abanico de expansión.
  
- Entre las regiones III y VI se presenta una onda de choque

La onda entre las regiones V-VI y III-VI, no puede ser definida ni siquiera de manera cualitativa y únicamente se pueden determinar resolviendo el problema. A través de las ondas (abanicos de expansión) que dividen las regiones I-II, II-III y IV-V se espera un incremento de velocidad y un subsecuente decremento de presión, temperatura y densidad. El proceso opuesto debe suceder entre las regiones I-IV y III-VI donde se espera la presencia de ondas de choque. Todos los cambios en las variables de interés indicados con anterioridad pueden ser determinados en forma analítica por medio de las teorías de Prandtl-Meyer y del choque oblicuo.

La evolución a través del extradós del perfil, denotaría la aceleración del flujo por medio de dos abanicos de expansión, luego del cambio de dirección experimenta una disminución de velocidad como consecuencia de la onda de choque en el borde de salida. En el intradós el flujo sufre una disminución de velocidad como consecuencia de la onda de choque en el borde de ataque, luego se expande tanto a la mitad de la cuerda como en el borde de salida en respuesta a los dos abanicos de expansión (suponiendo la presencia de un abanico de expansión entre V y VI). Luego de atravesar el último abanico de expansión el flujo se hace paralelo al proveniente del extradós, sin embargo, las velocidades de los flujos provenientes del extradós y el intradós serán distintas, con lo cual en la región VI aparecerá una línea de deslizamiento a través de la cual se produce un salto de velocidad y la presión permanece constante.

Analy.		rcf		sonic		
	$M$	$p/p_\infty$	$M$	$p/p_\infty$	$M$	$p/p_\infty$
II	3.27	0.67	3.27	0.66 (1.52 %)	3.28 (0.3 %)	0.65 (3.08 %)
III	4.78	0.09	4.63 (3.29 %)	0.094 (4.26 %)	4.78 (0 %)	0.086 (4.65 %)
IV	1.73	4.88	1.71 (1.17 %)	4.89 (0.2 %)	1.88 ( <b>7.98 %</b> )	4.85 (0.62 %)
V	2.48	1.51	2.43 (2.06 %)	1.63 ( <b>7.36 %</b> )	2.47 (0.4 %)	1.33 ( <b>13.5 %</b> )

AUSM+		HLLC		ROE		
	$M$	$p/p_\infty$	$M$	$p/p_\infty$	$M$	$p/p_\infty$
II	3.27 (0 %)	0.67 (0 %)	3.27 (0 %)	0.67 (0 %)	3.27 (0)	0.68 (1.47 %)
III	4.77 (0 %)	0.09 (0 %)	4.78 (0 %)	0.09 (0 %)	4.73 (0.21)	0.09 (0)
IV	1.72 (0.58 %)	4.93 (1.01 %)	1.72 (0.58 %)	4.9 (0.41 %)	1.72 (0.58)	4.92 (0.81 %)
V	2.44 (1.64 %)	1.58 (4.45 %)	2.44 (1.64 %)	1.57 (3.82 %)	2.44 (1.64)	1.59 (5.03 %)

Tabla 4.4: Relaciones de presión en las regiones II,III,IV y V (perfil doble cuña)

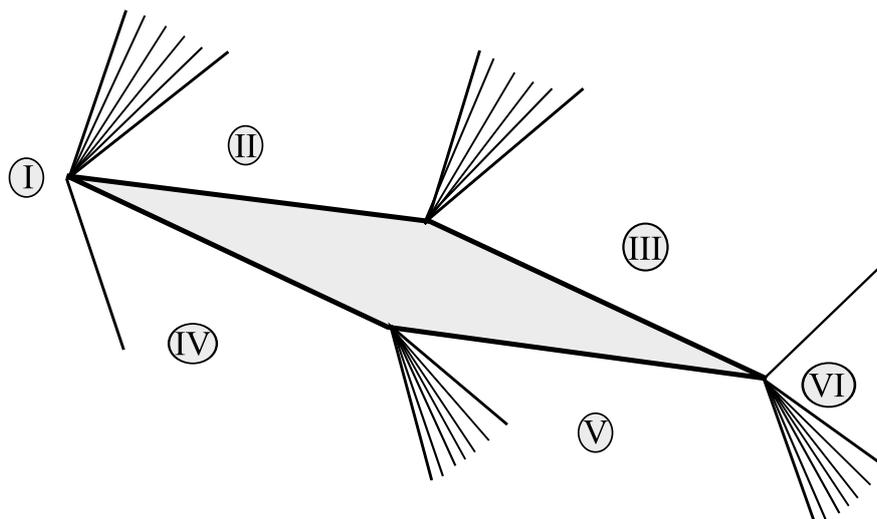


Fig. 4.8: Regiones de flujo: perfil doble cuña.

El análisis de este problema se restringe a un ángulo de ataque  $\alpha = 15^\circ$  y un ángulo del perfil  $\theta_w = 10^\circ$ . Luego de realizar pruebas numéricas se seleccionaron dos mallas construidas con 6 bloques de celdas (ver Fig. 4.7), una con 285300 celdas hexaédricas para ser utilizada con `sonicFoam` y otra con 44000 celdas para `rhoCentralFoam` y `dbnsFoam`. En la Tab. 4.4 se pueden observar las relaciones de presión y número de Mach obtenidos con los *solvers* basados en densidad (`rhoCentralFoam`, `sonicFoam` y `dbnsFoam`) para las diferentes regiones definidas en la Fig. 4.8.

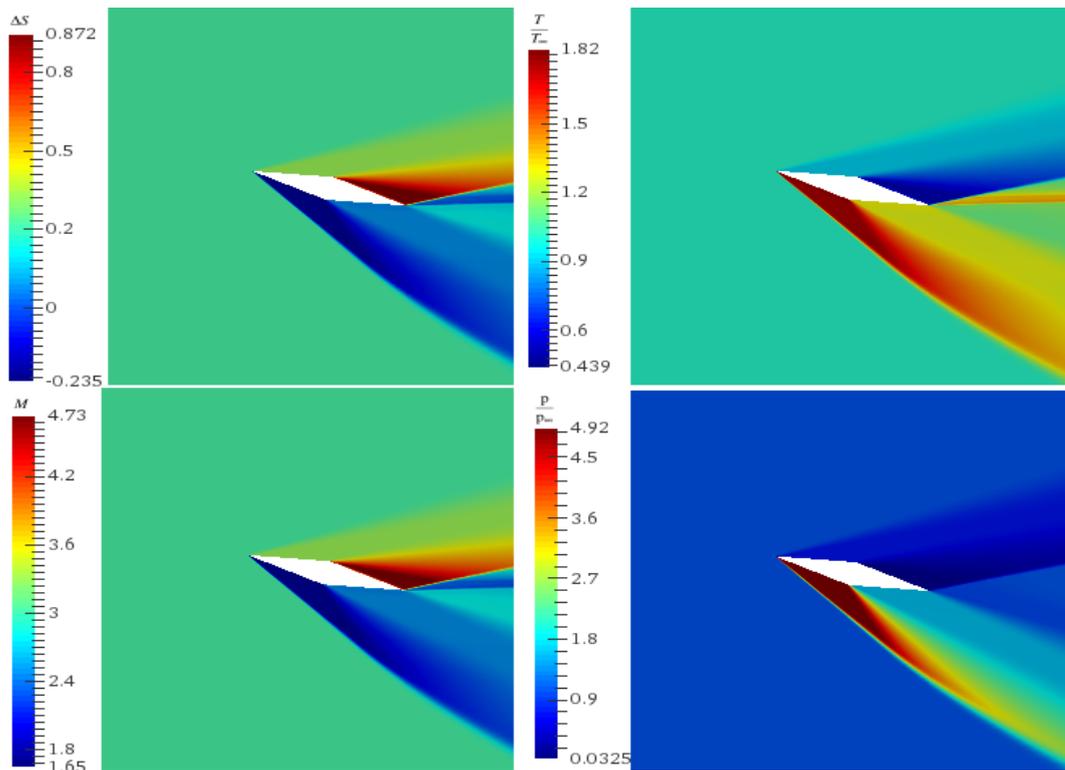


Fig. 4.9: Campos de velocidad, presión, temperatura y entropía para el perfil doble cuña (*solver*: rhoCentralFoam)

La Tab. 4.4 muestra que si bien los resultados obtenidos con todos los *solvers* son de buena calidad, desde el punto de vista del costo computacional con *sonicFoam* se necesitó una malla con alrededor de 3.3 veces más celdas para obtener resultados comparables a los obtenidos con *rhoCentralFoam* y *dbnsFoam*, no obstante, los tiempos de cálculo de *rhoCentralFoam* resultan ser menores. Además se puede observar que la predicción de la presión en la región V por *sonicFoam* muestra un error que ronda el 12 %.

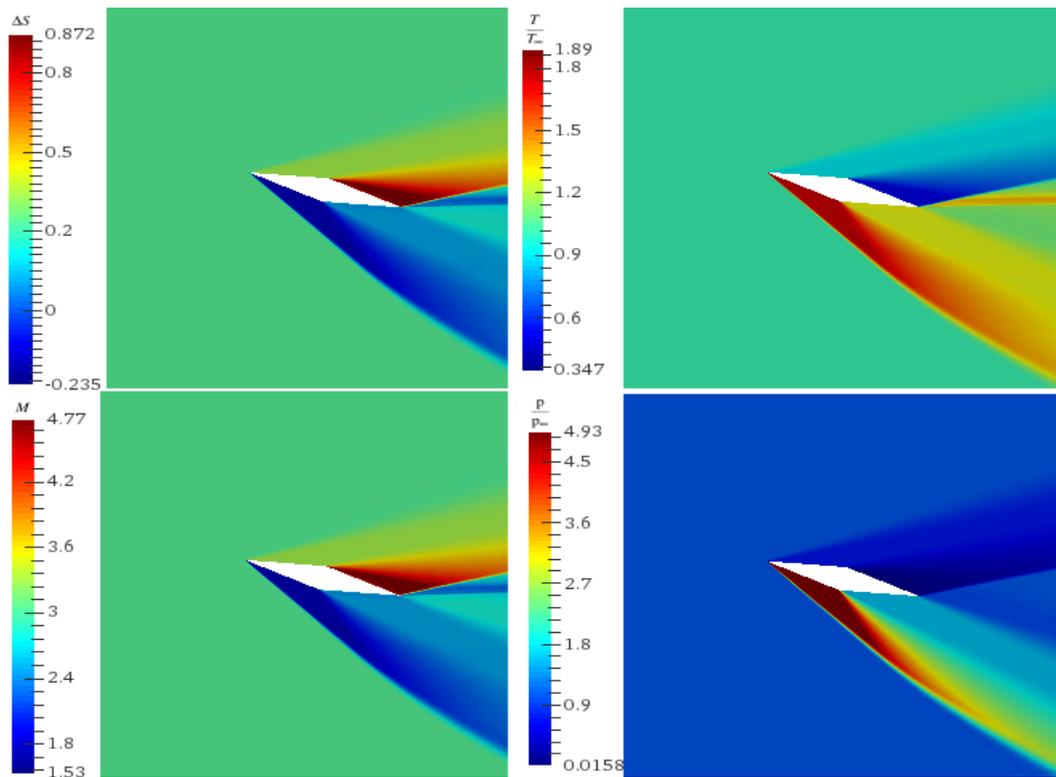


Fig. 4.10: Campos de velocidad, presión, temperatura y entropía para el perfil doble cuña (*solver*: dbnsFoam-AUSM+)

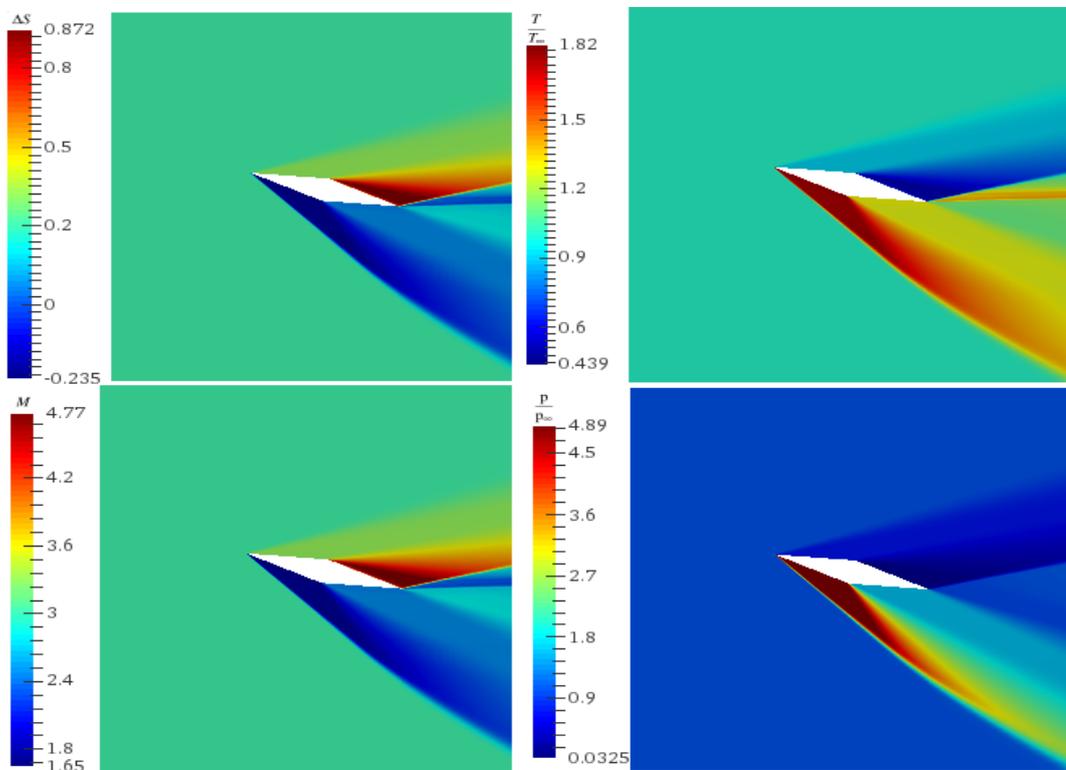


Fig. 4.11: Campos de velocidad, presión, temperatura y entropía para el perfil doble cuña (*solver*: dbnsFoam-HLLC)

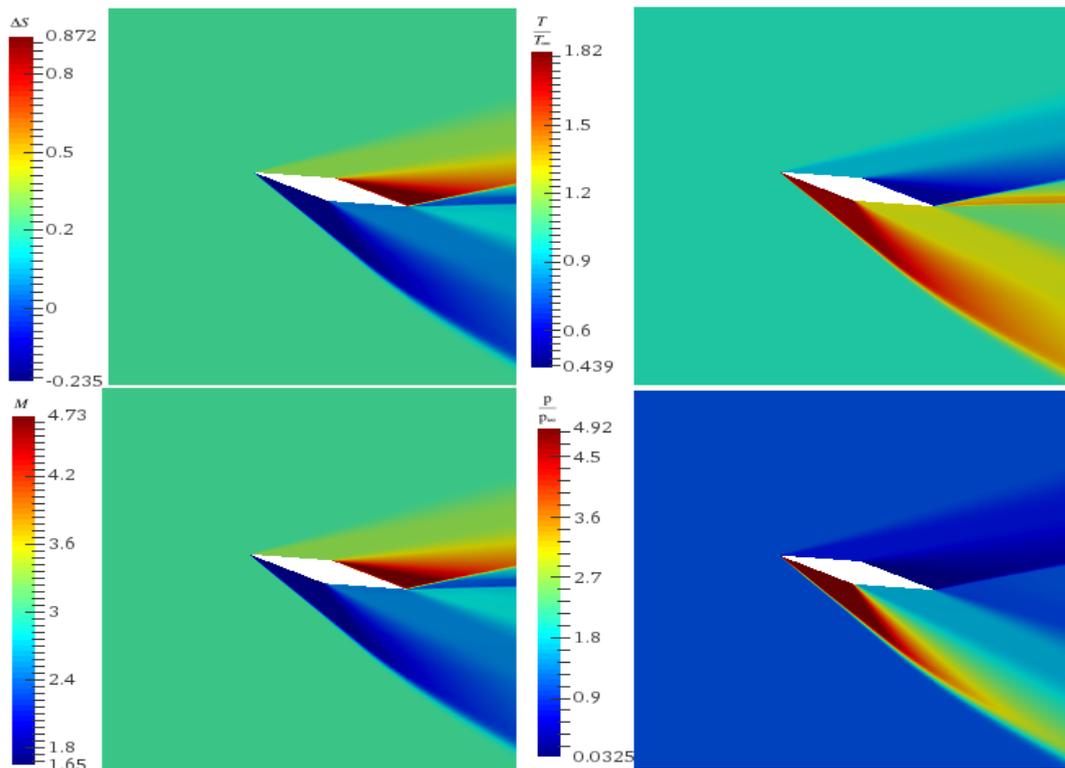


Fig. 4.12: Campos de velocidad, presión, temperatura y entropía para el perfil doble cuña (*solver*: dbnsFoam-ROE)

En las Fig. 4.9, Fig. 4.10, Fig. 4.11 y Fig. 4.12 se pueden ver los campos de Mach, presión, temperatura y de entropía obtenidos a partir de las simulaciones realizadas con `rhoCentralFoam` y `dbnsFoam`. De dichas figuras queda explícito que el patrón de flujo obtenido corresponde al descrito con anterioridad (ver Fig. 4.8). Las soluciones para el número de Mach, muestran claramente las ondas de choque y abanicos de expansión tanto en el intradós como en el extradós del perfil. De forma similar se confirma a partir de dichas figuras que entre las regiones V y VI existe un abanico de expansión y entre III y VI un choque. Finalmente a partir de la visualización de los campos de entropía se puede concluir que los cálculos efectuados respetan la condición de entropía a través de las diferentes ondas, y por lo tanto las soluciones son físicamente posibles. También es interesante ver que la visualización de la entropía permite detectar de manera muy clara a la línea de deslizamiento en la región VI, y su comportamiento es consistente con la teoría en el sentido que la entropía muestra una discontinuidad pero la presión se mantiene constante.

En la Fig. 4.13 se puede observar la distribución de presión sobre una línea perpendicular al flujo ubicada en  $x = 1.25m$ . En dicha figura el eje de las abscisas se define iniciando en el extremo superior del dominio computacional y aumentando a medida que se recorren las diferentes zonas en forma descendente. En dicha figura se identifican las influencias de las ondas que emanan de cada uno de los vértices del perfil, es notable que tanto `dbnsFoam` utilizando los flujos de Roe, AUSM+ y HLLC, como `rhoCentralFoam` describen la variación de presión de manera consistente. El máximo pico de presión registrado al atravesar el choque que divide las zonas I y IV (ver Fig. 4.9) se registra en la Tab. 4.5 y se observa que todos los cálculos registran valores similares.

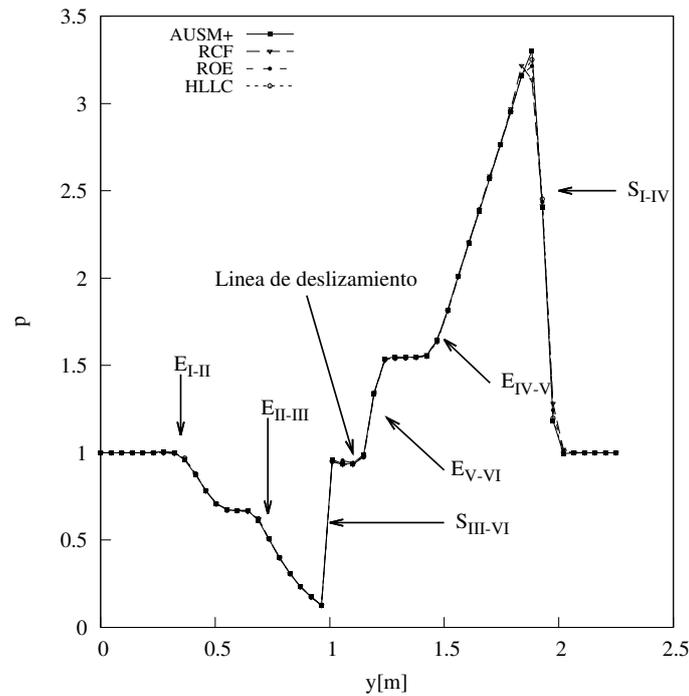


Fig. 4.13: Distribución de presión sobre una línea vertical en  $x = 1.25m$  para el perfil doble cuña (E: expansión, S: choque)

	$P_{\max}$
RCF	3.1
ROE	3.2
HLLC	3.2
AUSM+	3.3

Tabla 4.5: Valores máximos de  $p$  ( $S_{I-IV}$ ) perfil doble cuña

En la Fig. 4.14 se pueden observar distribución de densidad y número de Mach a lo largo de una línea ubicada en  $x = 1.25m$ . Dicha zona es atravesada por los tres tipos de ondas presentes en el campo de flujo (línea de deslizamiento, onda de choque y abanico de expansión), por lo tanto observar la variación que presentan las variables en dicha estación y comparar sus resultados, proporciona una clara idea del andar de los resultados.

Por otro lado en la Fig. 4.15 se observan los tiempos de cómputo registrados para las simulaciones desarrolladas con `rhoCentralFoam` y `dbnsFoam` (AUSM+, ROE y HLLC), de dicha figura es claro que la opción más económica resulta ser `rhoCentralFoam`. Puntualmente el cómputo con `dbnsFoam-ROE` requiere un tiempo computacional 88.11% mayor que el de `rhoCentralFoam`, siendo los de `dbnsFoam-AUSM+` y `dbnsFoam-HLLC` 36.85% y 17.75% respectivamente. Como se mencionara antes, se necesitaron 285300 celdas con `sonicFoam` para obtener resultados similares a los calculados con 44000 celdas por `rhoCentralFoam`, por lo que comparar los tiempos de cómputo de `sonicFoam` no resulta adecuado debido al claro incremento en requerimientos de cálculo producto del refinamiento necesario de la grilla.

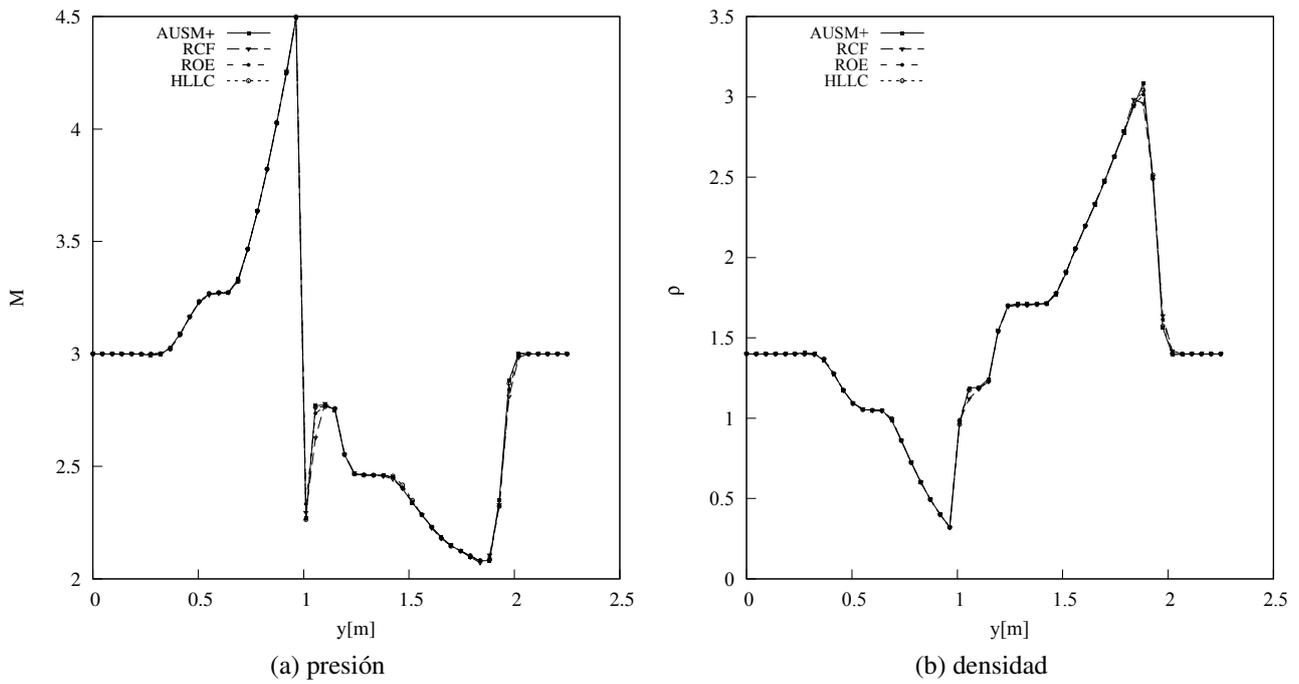


Fig. 4.14: Distribuciones de densidad y número de Mach a  $x = 1.25m$  para el perfil doble cuña

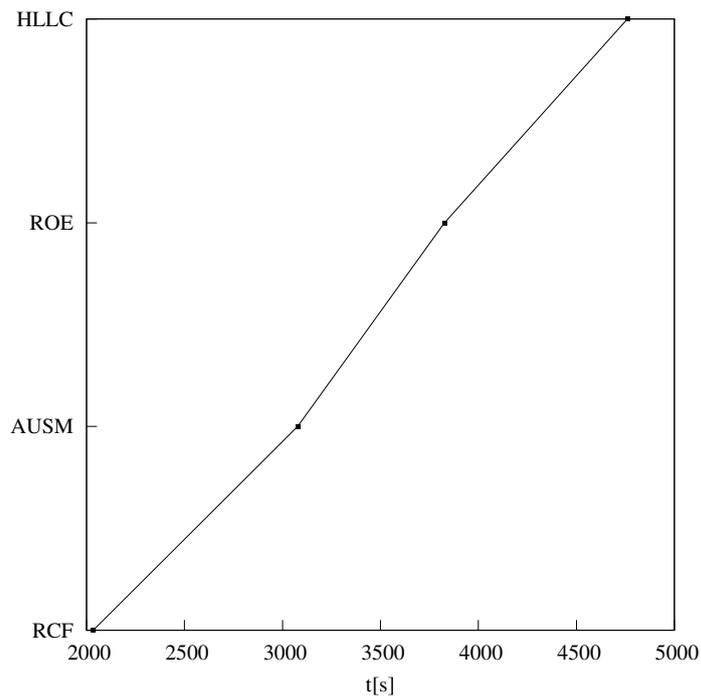


Fig. 4.15: Tiempos de cómputo perfil doble cuña ( $\Delta t = 5e - 4s$ ,  $N_c = 44000$ , 16 procesadores)

La Fig. 4.16 muestra la convergencia expresada en la norma  $L_2$  de los residuos de la densidad para `rhoCentralFoam` y `dbnsFoam` con los flujos numéricos HLLC, ROE y AUSM. En la Fig. 4.16.a se observan los residuos para `rhoCentralFoam` en función del número de Courant, de allí se observa como si bien en todos los casos se alcanza la convergencia, a medida que se disminuye el máximo valor admisible del número de Courant se consiguen residuos de menor magnitud. En la Fig. 4.16.b se presentan los residuos de `rhoCentralFoam` y `dbnsFoam` para

un Courant máximo de 0.35. En dicha figura se observa como para este valor `dbnsFoam` alcanza residuos de menor magnitud en comparación con `rhoCentralFoam`, no obstante, a expensas de penalizar el paso de tiempo es factible conseguir niveles similares de convergencia lo cual no necesariamente significa un aumento excesivo en el costo computacional. Para  $max(Co) = 0.35$  se registra un tiempo de computacional de 2034s Fig. 4.15. Penalizando el número de Courant con  $max(Co) = 0.15$  se alcanza un nivel de residuos incluso menor que el de los otros *solvers* con un tiempo de cómputo de 4535s. Cabe destacar que aunque para un mismo número de Courant `rhoCentralFoam` presenta mayor magnitud en los residuos alcanzados la solución obtenida converge a un estado estacionario.

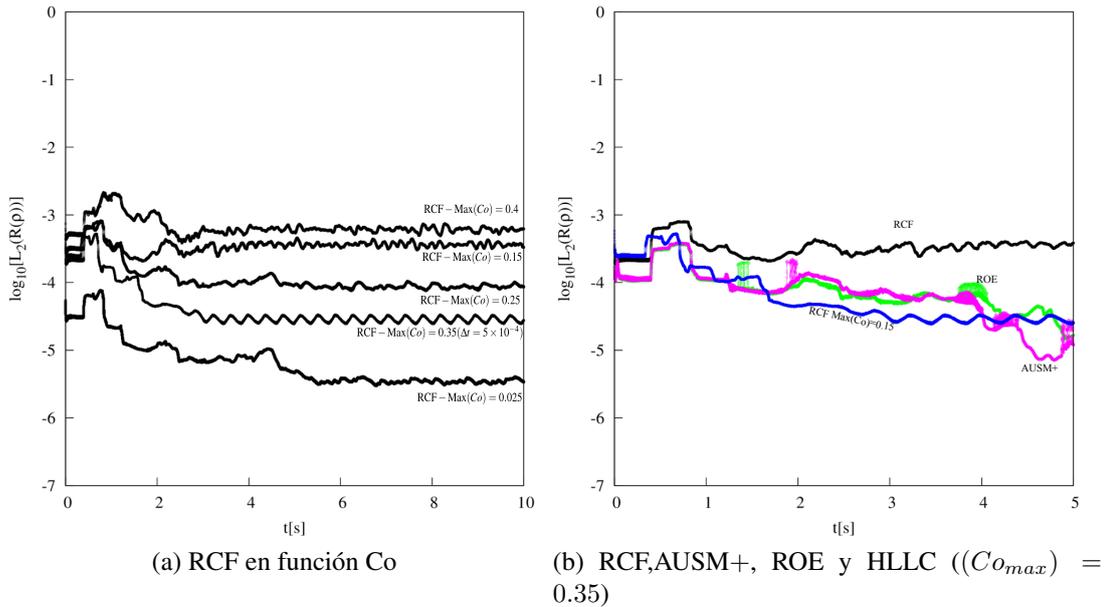


Fig. 4.16: Residuos en la norma  $L_2$  de la densidad para el perfil doble cuña (*solvers*: `rhoCentralFoam`, `dbnsFoam(AUSM+, ROE, HLLC)`)

#### 4.4.4. Flujo bidimensional en una toma de Aire supersónica

Las prestaciones de la unidad propulsora (motor a reacción convencional, *ramjet*, *scramjet*) en vuelo supersónico o hipersónico, dependen de la cantidad y calidad del flujo de aire (caudal másico, presión total y uniformidad), que la toma de aire le pueda proporcionar. Dichas tomas de aire se diseñan como una combinación de compresión externa e interna del flujo entrante (Fig. 4.17), con el propósito de lograr las condiciones exigidas por el tipo de motor y además, hacerlo de tal manera que las pérdidas durante el proceso de conversión de la energía cinética del vuelo libre en presión interna, sean mínimas. La Fig. 4.17 muestra de manera esquemática el diagrama de ondas que se produce externa e internamente en la toma de aire según que opere en condición crítica u óptima, sub y supercrítica.

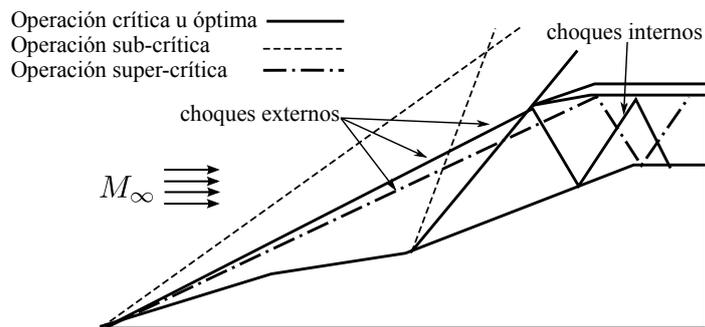


Fig. 4.17: Esquema de operación toma de aire supersónica

Para cuantificar la eficiencia de una toma de aire existen diferentes parámetros, aquí se usan la **relación de presión total** ( $\Pi_{p0}$ ) y la *captura de aire* ( $m_c$ ). La relación de presiones está dada por:

$$\Pi_{p0} = \frac{p_{0T}}{p_{p\infty}} \quad (4.118)$$

donde  $p_{0T}$  es la presión total en la sección final de la toma de aire y  $p_{p\infty}$  la presión total de la corriente libre. Por su parte la captura de aire se define por:

$$m_c = \frac{A_c}{A_{100\%}} \quad (4.119)$$

es decir, como el cociente entre el área de la captura  $A_c$  definida por la proyección vertical de la línea de corriente que luego de ser desviada por los choques emergentes desde la rampa de compresión externa arriba al borde de ataque de la cubierta superior (*cowling lip*), y el área  $A_{100\%}$  definida por la proyección vertical de la línea de corriente que desde el inicio de la rampa y sin desviarse, llega al borde de ataque de la cubierta superior. Dichas áreas  $A_c$  y  $A_{100\%}$  se muestran en la Fig. 4.18. La configuración objeto de las simulaciones numéricas aquí presentadas y analizadas, ha sido diseñada y experimentalmente evaluada por NASA [62, 63].

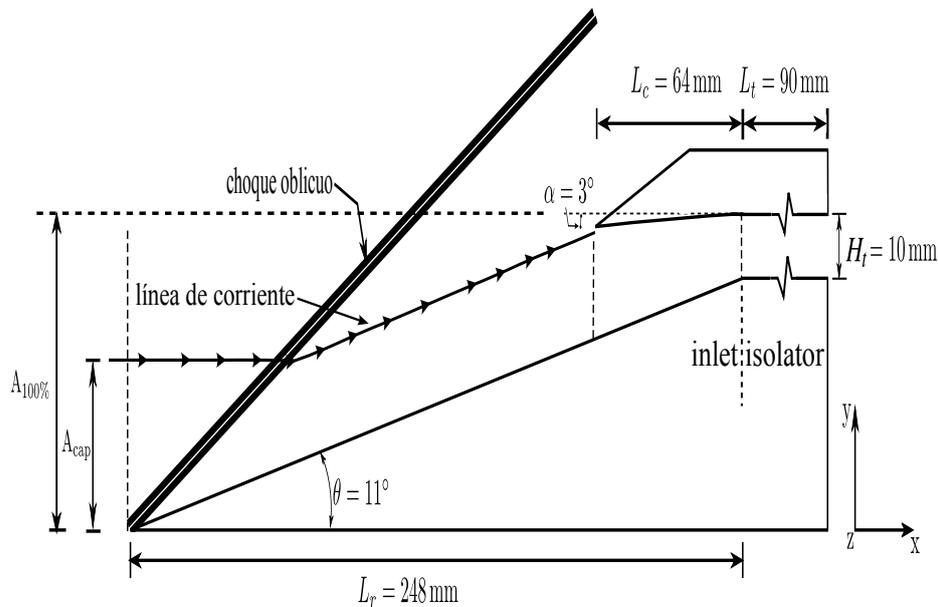


Fig. 4.18: Parámetros geométricos de la toma de aire y líneas de corriente que definen a  $m_c$

Las Fig. 4.19.a y Fig. 4.19.b, muestran distribuciones de presiones sobre la superficie de la rampa y su continuación como superficie inferior del conducto de sección constante (también se le conoce como aislador (*isolator*)). Dichas presiones corresponden a simulaciones efectuadas con distintos *solvers* y a mediciones experimentales aplicables a la condición de vuelo  $M_\infty = 4.0$ . Los valores de presión presentados han sido normalizados con la presión ( $p_\infty$ ) de la corriente libre y la altura ( $H_t$ ) del conducto. En las Fig. 4.19.a y Fig. 4.19.b cabe destacar los puntos R1, R2 y R3, los cuales corresponden a la primera reflexión de la onda proveniente de la cubierta superior (R1), al inicio del abanico de expansión que aparece como consecuencia del cambio de dirección del flujo al ingresar desde la rampa al conducto (R2) y finalmente (R3), consecuencia de la compleja interacción entre el choque originado en R1 y la expansión R2. Se observa que donde la simulación numérica produce fuertes gradientes adversos de presión ( $x/H_t \sim 22.5$ ) y ( $x/H_t \sim 27$ ), las discrepancias con datos experimentales son muy notables. Se estima que dichas discrepancias son consecuencia de la separación de la capa límite y tales efectos no pueden ser contemplados en simulaciones que no incluyen efectos viscosos.

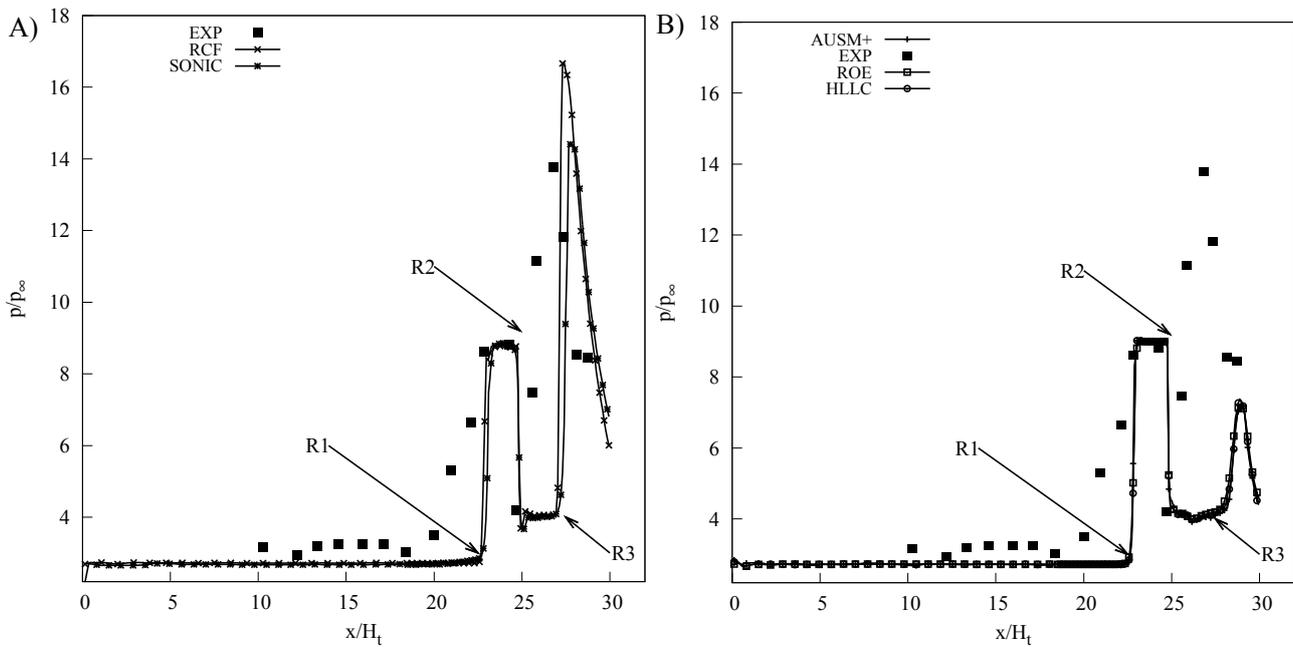


Fig. 4.19: Presión sobre la rampa principal de la toma de aire ( $M_\infty = 4.0$ )

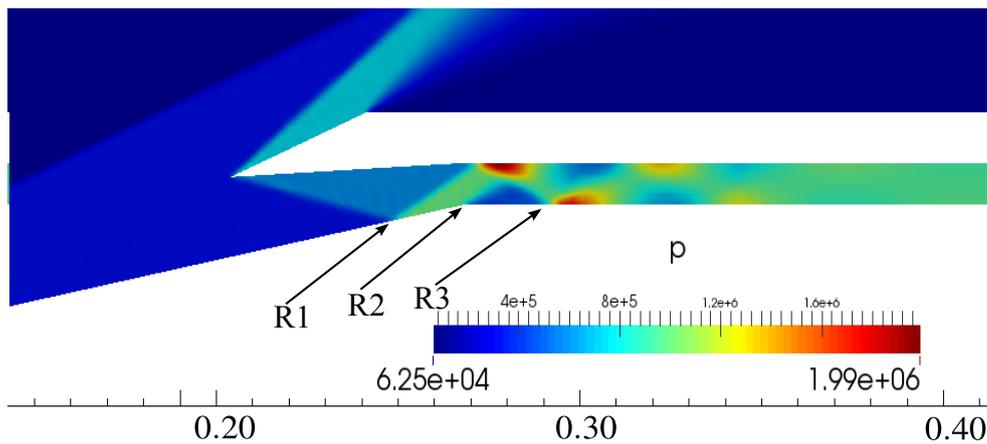


Fig. 4.20: Detalle de la distribución de presión en el conducto interno de la toma de aire ( $M_\infty = 4.0$ ) (rhoCentralFoam)

Si la condición de funcionamiento de la toma es sub-crítica, no todas las ondas de compresión externa se focalizan en el borde de ataque de la cubierta superior. Esto conduce a que cierta cantidad de flujo másico procesado por la toma de aire no entre al conducto previo a la ubicación de la unidad propulsora. Se dice entonces que una porción del flujo es *spilled* y, obviamente, la toma de aire no operará según su condición de diseño. En la Fig. 4.21, se presentan valores de la relación de captura  $m_c$  a números de Mach de vuelo menores y mayores que el de diseño  $M_\infty = 3, 4, 5, 6, 7$ <sup>17</sup>. Todas las predicciones numéricas concuerdan satisfactoriamente con los resultados experimentales. La Fig. 4.21 también muestra que  $M_\infty \sim 3$  se produce una caída abrupta del parámetro  $m_c$  y por consiguiente una abrupta disminución de la masa de aire que ingresa a la toma. Cuando  $m_c < 0.3$  la toma de aire ya no es operativa y alcanza la condición que se conoce como *unstart*

<sup>17</sup>Se hace la excepción de incluir resultados para  $M_\infty = \{6, 7\}$  ya que se cuenta con datos de comparación

*inlet*. Nótese que la aproximación a este estado de la toma de aire es bien captada por el *solver* `rhoCentralFoam`.

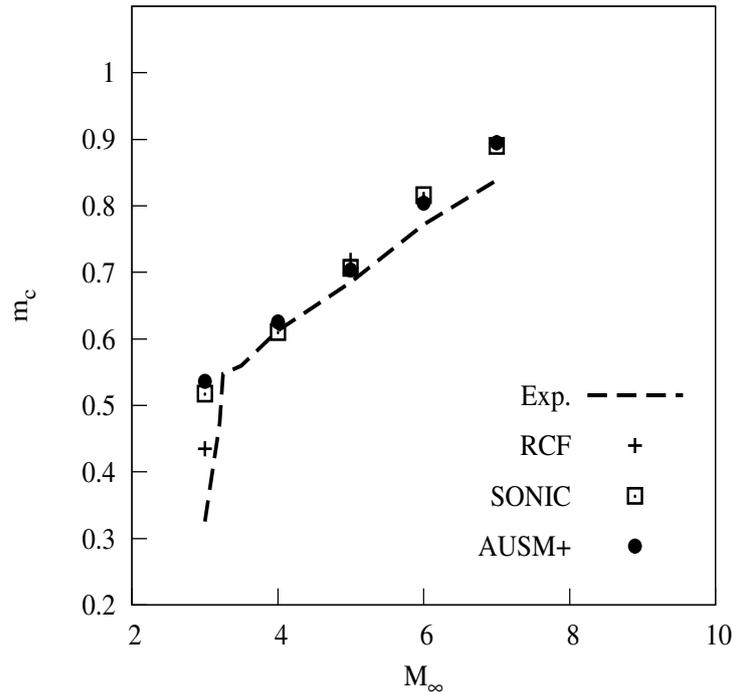
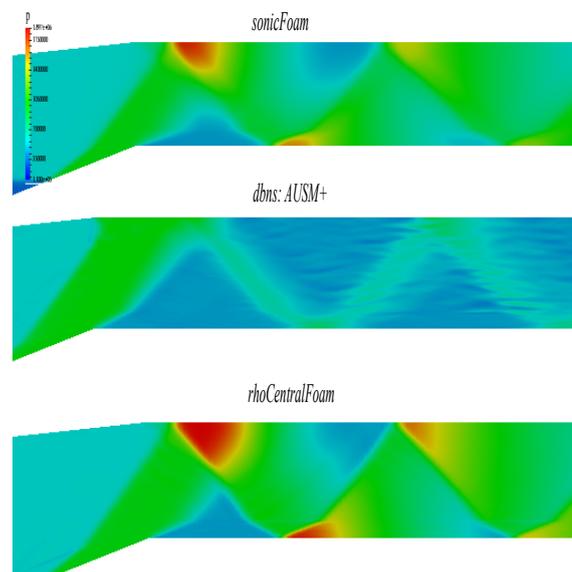
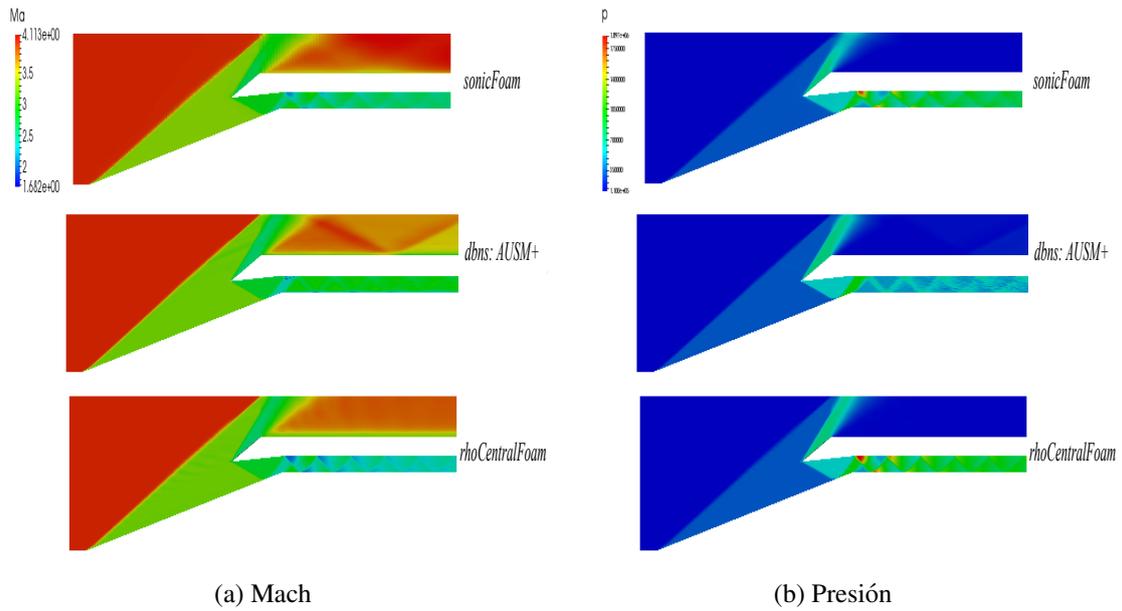


Fig. 4.21: Captura de aire para ( $M_\infty = [3, 4, 5, 6, 7]$ )

Las Fig. 4.22.a y Fig. 4.22.b muestran distribuciones de números de Mach y presiones asociados con el flujo externo de la toma de aire y la Fig. 4.22.c, detalles correspondientes al comportamiento de la presión en el interior del conducto de sección constante para cada uno de los *solvers* considerados (`rhoCentralFoam`, `dbnsFoam` y `sonicFoam`). Cabe notar que todos los *solvers* describen un comportamiento similar en la parte externa de la toma. No ocurre así con el flujo interno donde se desarrolla un proceso complejo interactivo de expansiones y compresiones y los resultados de las simulaciones provistas por los *solvers* de la librería `dbnsFoam` se diferencian significativamente de las que se obtienen con `rhoCentralFoam` y `sonicFoam`. Así por ejemplo, en la Fig. 4.19.a que muestra presiones sobre la rampa principal y parte del conducto computadas con `rhoCentralFoam` y `sonicFoam`, se obtiene para  $x/H_t \sim 27$  un pico de presión consistente con los datos experimentales, mientras que con los *solvers* `dbns` dicho pico de presión se reduce en un 50 % (Fig. 4.19.b)

Es de fundamental importancia determinar la presión total con que el flujo capturado por la toma es entregado al sistema propulsor. La Fig. 4.23 muestra un gráfico, aplicable a una toma de aire cuyo diseño ha sido esquematizado en la Fig. 4.17, con datos numéricos de la recuperación de la presión total en términos del parámetro  $\Pi_{p0}$  vs. el número de Mach de vuelo. Dichos datos, obtenidos con simulaciones numéricas con los *solvers* `rhoCentralFoam`, `+sonicFoam` y `dbnsFoam-AUSM+`, verifican que ningún resultado de las simulaciones numéricas es satisfactorio. No obstante, los resultados de `rhoCentralFoam` son los que mejor se adaptan al comportamiento de los valores experimentales.



(c) Detalle zona del conducto de la toma de aire: presión

Fig. 4.22: Mach, presión y densidad en el conducto de la toma de aire

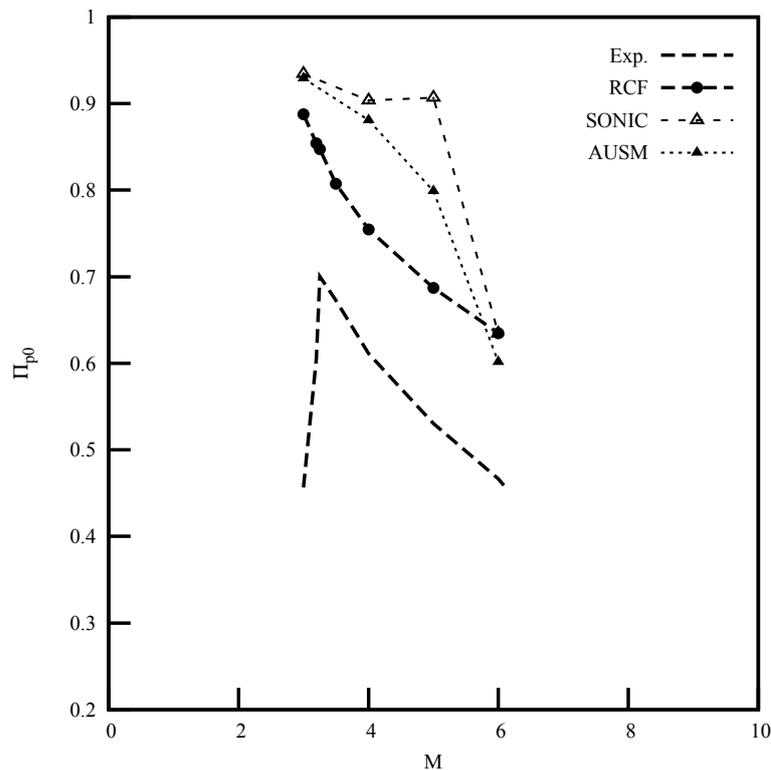


Fig. 4.23: Relación de presiones totales para la toma de aire

Una posibilidad de mejora en las predicciones de recuperación de presión total, particularmente en el conducto, es incorporar los efectos viscosos producto del comportamiento de la capa límite. Esto implicaría determinar su transición desde laminar a turbulenta y su eventual separación. La incorporación del modelo turbulento de Menter [64] identificado como *Shear Stress Transport* (SST), al *solver rhoCentralFoam* está prevista como próximo trabajo de aplicaciones al flujo supersónico. El modelo SST está basado en modificaciones efectuadas sobre el  $k - \omega$  de Wilcox [65] que se utiliza en la subcapa y en la zona logarítmica de la capa límite turbulenta y gradualmente cambia hacia el modelo  $k - \varepsilon$  estándar en la zona de la capa límite turbulenta conocida como *wake región*.

#### 4.4.5. Flujo bidimensional y axisimétrico alrededor de un cuerpo romo

Los resultados presentados en secciones anteriores han mostrado que en el entorno de openFoam<sup>TM</sup> los esquemas centrados de Kurganov et al. cuentan con la capacidad de proporcionar soluciones de similar y en ocasiones superior calidad a las proporcionadas por esquemas tradicionales de cálculo basados en el uso de *solvers* de Riemann y del esquema AUSM+. También se mostró que en cuanto concierne a costo computacional resultan más eficientes los esquema de Kurganov et al. y a su vez mediante una adecuada selección de esquema de reconstrucción se puede mantener acotada la difusión numérica lo cual se traduce en buena resolución de las discontinuidades en el campo de flujo.

No obstante y como culminación de las pruebas realizadas con la implementación de los esquemas de Kurganov et al. dentro de openFoam<sup>TM</sup> (`rhoCentralFoam`) en esta sección se resuelve el problema de flujo externo sobre un cuerpo romo. Para lo cual se consideran dos configuraciones una bidimensional y otra axisimétrica. Además en esta sección se comparan las soluciones obtenidas utilizando diferentes funciones limitadoras en el procedimiento de reconstrucción. Se considera un cuerpo romo cuyo contorno en un plano  $xy$  se define por la función:

$$f(x) = x^{0.5} \quad \text{for } 0 \leq x \leq 1 \quad (4.120)$$

Para el problema axisimétrico la generatriz de la configuración es el contorno descrito por la Ec. 4.120. Las condiciones de la corriente libre en ambas configuraciones son  $M_\infty = 3.5$ ,  $T_\infty = 1$  y  $p_\infty = 1$  (valores para un gas normalizado en el cual  $M = U$  lo cual implica  $T = 1$ ,  $a = 1 \text{ m/s}$ ,  $\gamma = 7/5$  y  $W = 11640.3 \text{ kg/kMol}$ ) [66].

### Caso bidimensional

El caso se computa utilizando dos mallas construidas con un bloque de 45000 (malla-1) y otro de 72000 (malla-2) celdas hexaédricas. La configuración de la malla puede observarse en la Fig. 4.24. Las condiciones de borde aplicadas en este caso corresponden a las descritas en la Tab. 4.6.

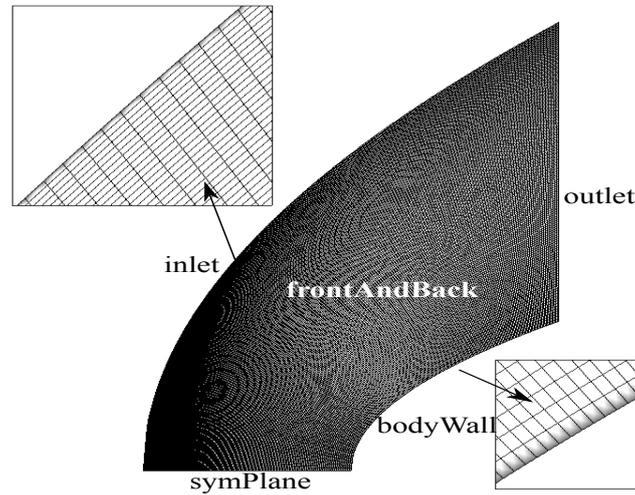


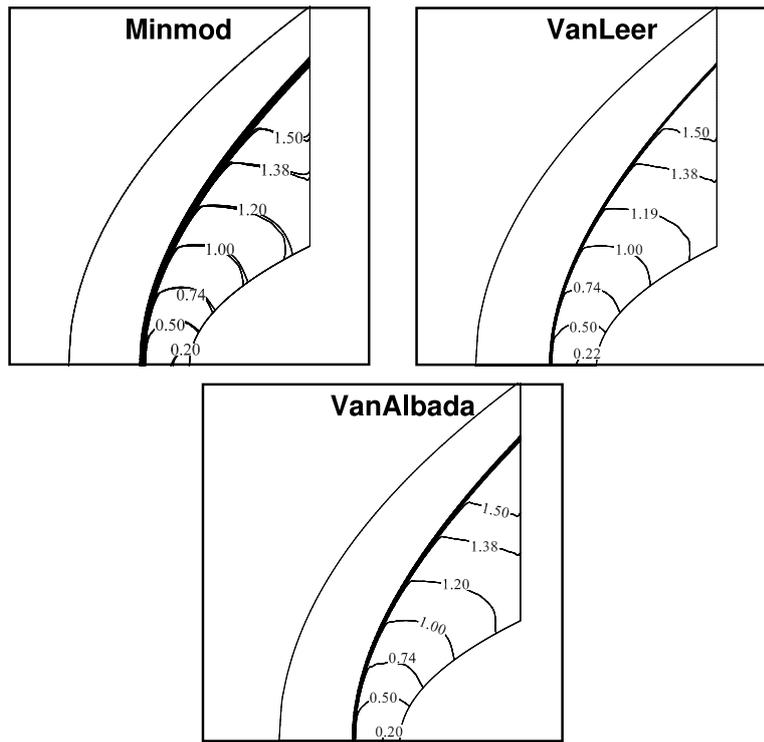
Fig. 4.24: Configuración de la malla: cuerpo romo configuración 2D.

Contorno	$p[kPa]$	$T[K]$	$U[m/s]$
<i>inlet</i>	1	1	(3, 0, 0)
<i>symPlane</i>	symmetryPlane	symmetryPlane	symmetryPlane
<i>bodyWall</i>	zeroGradient	zeroGradient	slip
<i>outlet</i>	zG	zG	zG
<i>frontAndBack</i>	empty	empty	empty

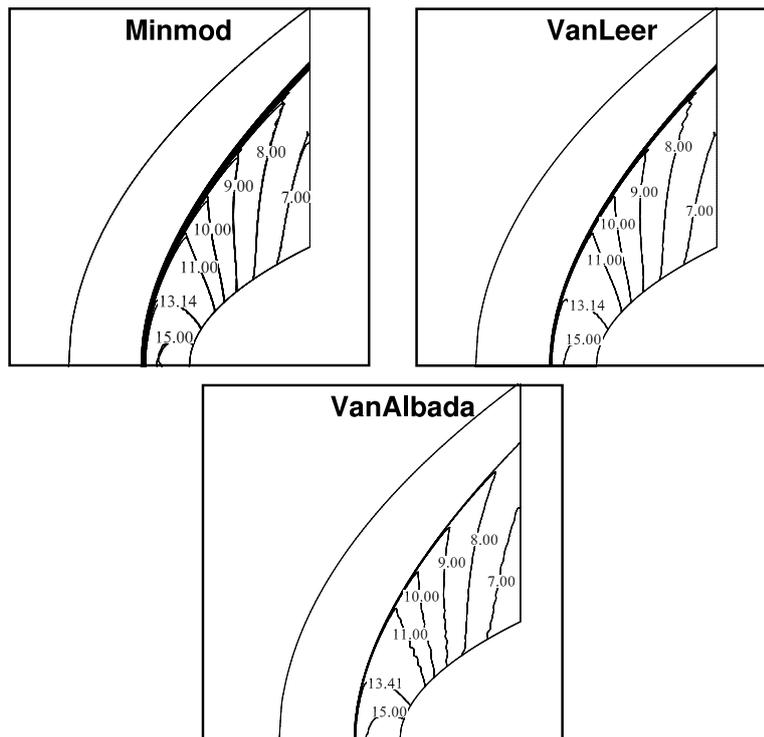
Tabla 4.6: Condiciones de borde: cuerpo romo configuración 2D

El problema se resuelve utilizando las funciones limitadoras de van Leer, van Albada y Min-Mod de Roe (ver Tab. 4.2). En las Fig. 4.25a y Fig. 4.25b se pueden ver las curvas de nivel de los campos de número de Mach y presión obtenidas para cada una de las funciones limitadoras. A partir de dichas figuras se observa que la resolución de la onda dada por la función MinMod muestra el comportamiento más difusivo. Por otro lado tanto la función vanLeer como la vanAlbada proporcionan una mejor resolución, pero se observa una tendencia a inducir oscilaciones en el campo de presión.

La mejor resolución de la onda se obtiene con la función limitadora vanAlbada, no obstante la tendencia de dicha función a inducir oscilaciones en el cómputo de la presión resulta más notable. Lo expuesto indicaría que los resultados con el mejor balance entre un campo de presiones libre de oscilaciones y una buena resolución para la onda de choque se consiguen con la función vanLeer.



(a) Distribución número de Mach:



(b) Distribución de presiones

Fig. 4.25: Distribuciones de número de Mach y presiones: cuerpo romo configuración 2D (Malla-1).

La Fig. 4.26 presenta los cambios de entropía obtenidos en el dominio con cada una de las funciones limitadoras. Dichos cambios se corresponden con los esperados a través de ondas de choque curvas. Se puede decir entonces que la simulación numérica tiene sentido físico. Si a los cambios de entropía se añaden resultados relativos a números de Mach y presiones locales, se puede concluir que la simulación es correcta.

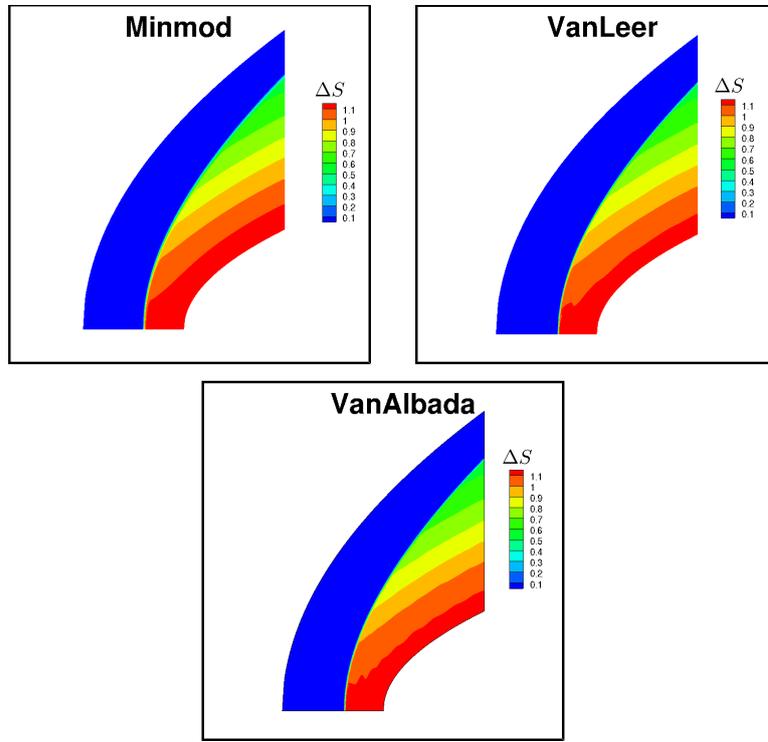


Fig. 4.26: Distribuciones de entropía: cuerpo romo configuración 2D (Malla-1).

La presión de impacto calculada por medio de la teoría de onda de choque normal para este problema resulta  $P_0/P_\infty = 16.24$  [16, 17]. En la Tab. 4.7 se pueden observar los valores obtenidos para presión y el error asociado con cada una de las funciones limitadoras.

$\beta(r)$	Presión de estancamiento	%Error
VanLeer	16.21	0.18
Minmod	16.34	0.6
VanAlbada	16.22	0.12

Tabla 4.7: Presión de impacto: cuerpo romo configuración 2D (Malla-1)

Finalmente las distribuciones de número de Mach y presión para la malla con mayor número de celdas (Malla-2) se pueden observar en las Fig. 4.27a y Fig. 4.27b. A partir de dichas figuras queda claro que el refinamiento de la malla brinda una mejor calidad en los campos solución obtenidos. En lo que respecta a los resultados producidos con la función MinMod se nota una reducción apreciable en la difusividad de la onda de choque. Los campos de presiones obtenidos con las funciones vanAlbada y vanLeer carecen prácticamente de oscilaciones. En cuanto a la captura de la onda, aparentemente la función vanAlbada proporciona la mejor resolución.

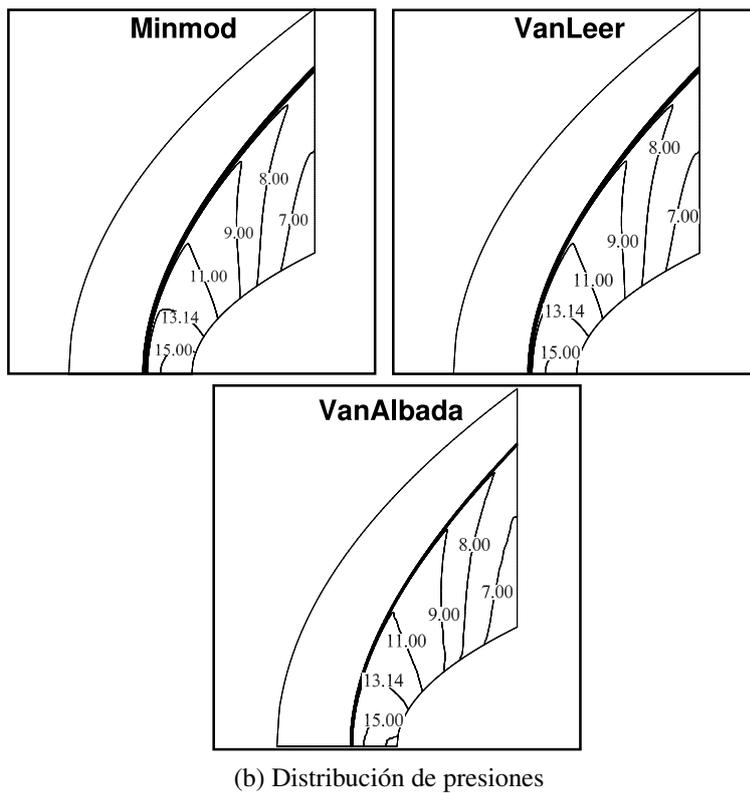
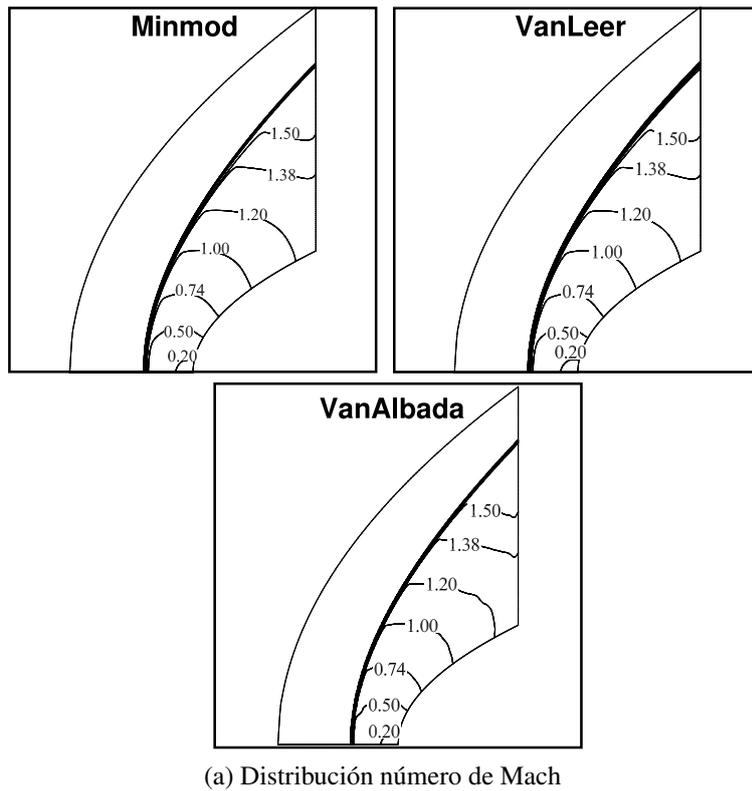
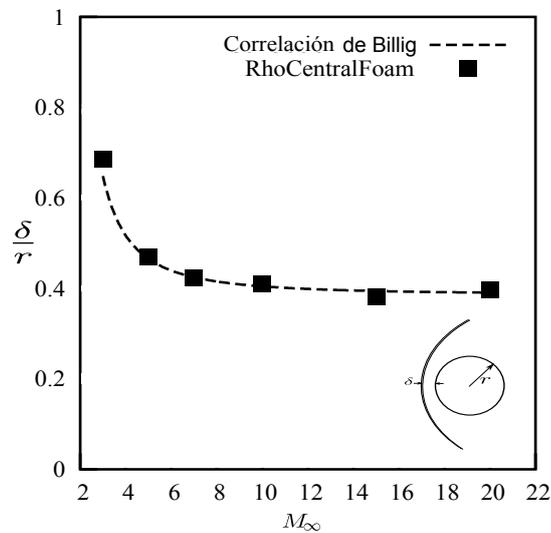


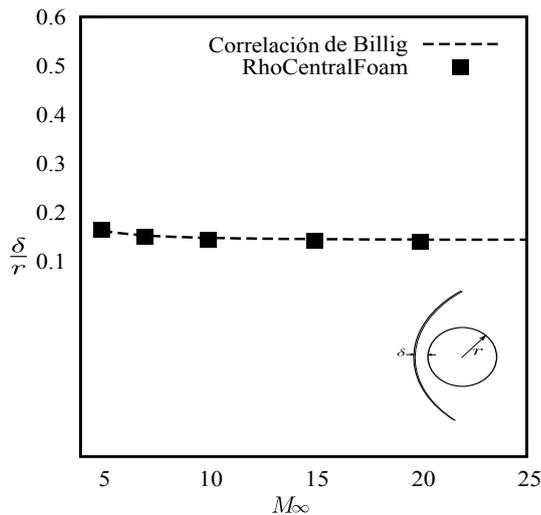
Fig. 4.27: Distribuciones de número de Mach y presiones: cuerpo romo configuración 2D (Malla-2)

La distancia desde el cuerpo hasta el choque normal se estima en  $0.38\text{ m}$ . Debido a que para el cuerpo en estudio (configuración 2D) no se han encontrado datos con que comparar la distancia desde el cuerpo hasta la onda, ésta se ha verificado mediante la realización de casos de prueba sobre cilindros y esferas para los cuales dicha distancia puede ser estimada por medio de la correlación

de Billig [67](Fig. 4.28). Por lo tanto se estima que el valor determinado para el cuerpo en estudio es confiable.



(a) Cilindro 2D



(b) Esfera: Configuración axisimétrica

Fig. 4.28: Comparación de la distancia de la onda normal determinada con rhoCentralFoam con la obtenida por medio de la correlación de Billig para un cilindro y una esfera.

En cuanto a la convergencia de los diferentes campos solución, en la Fig. 4.29 se observa la convergencia en la norma  $L_2$  para cada una de las funciones limitadoras. Dicha figura confirma en términos de la convergencia que las funciones limitadoras que mejor comportamiento presentan son las de van Leer y van Albada. En el caso de la función MinMod, se observa que ésta aún no converge cuando las de van Leer y van Albada alcanzan la condición estacionaria alrededor de los 35000 pasos de tiempo. Puntualmente en la temperatura y el Mach es evidente un comportamiento oscilatorio tanto para la función van Albada como para la vanLeer. A pesar de esto, en vista de los resultados obtenidos al emplear la función van Leer, se puede decir que proporciona los mejores resultados en cuanto a calidad y convergencia.

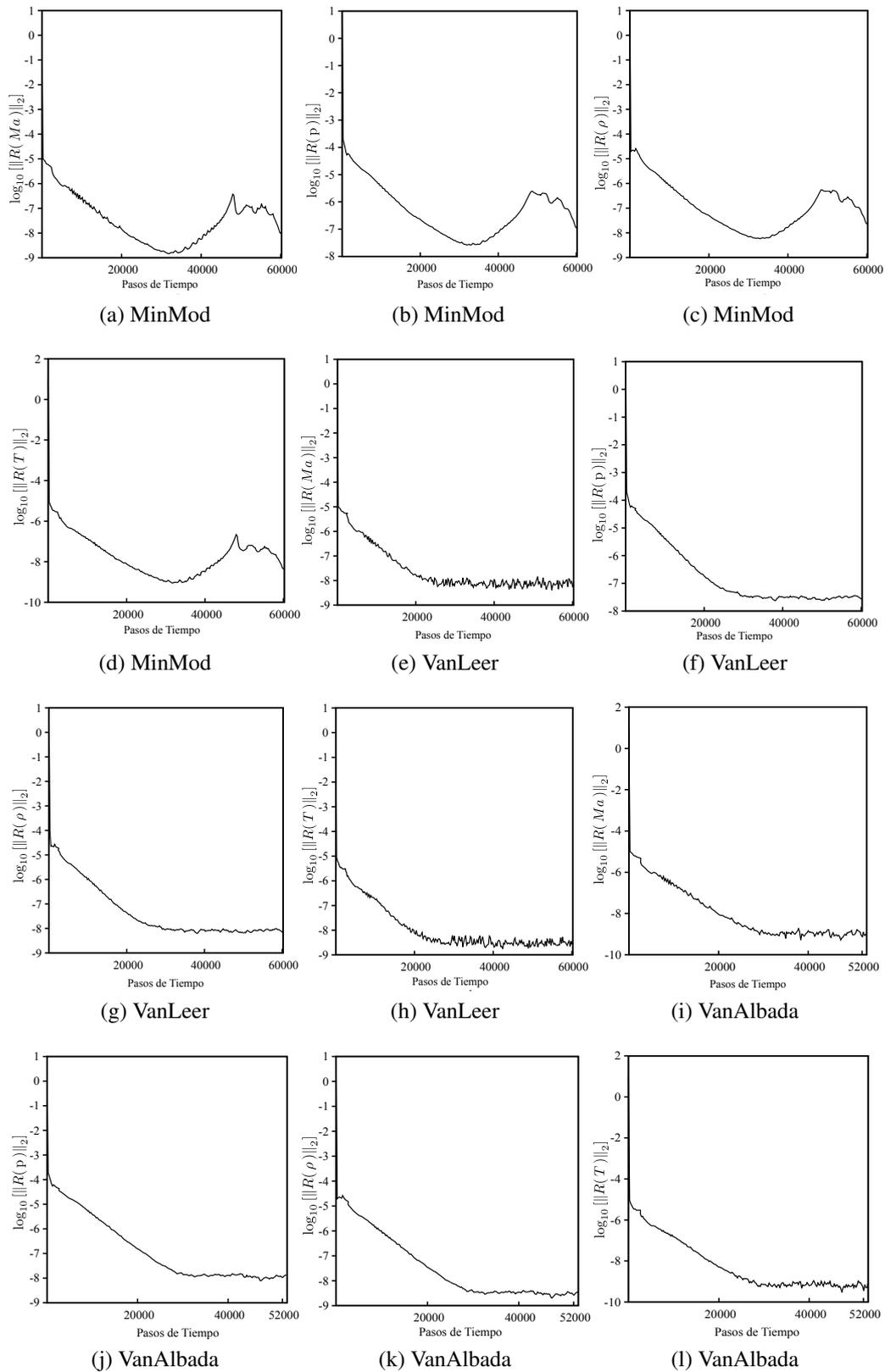


Fig. 4.29: Residuos en la norma  $L_2$  de  $Ma$ ,  $p$ ,  $\rho$  y  $T$  para las diferentes funciones limitadoras: cuerpo como configuración 2D.

### Caso axisimétrico

La configuración axisimétrica de la malla se construye suponiendo simetría respecto de un eje central y utilizando superficies denominadas *wedge patches* para limitar el dominio lateralmente [68]. Los límites radiales del mallado surgen de la intersección de estos *patches* con las superficies contorno del cuerpo y la preestablecida como entrada del dominio de cómputo. La malla se construye utilizando un bloque de 24500 celdas hexaédricas (Fig. 4.30). Las condiciones de borde resultan ser idénticas a las descritas para todos los contornos del caso 2D a excepción del contorno *frontAndBack* el cual se divide en 2 contornos *frontAndBack\_pos* y *frontAndBack\_neg*, sobre los cuales se aplica la condición de borde tipo *wedge* (ver Sección.2.8).

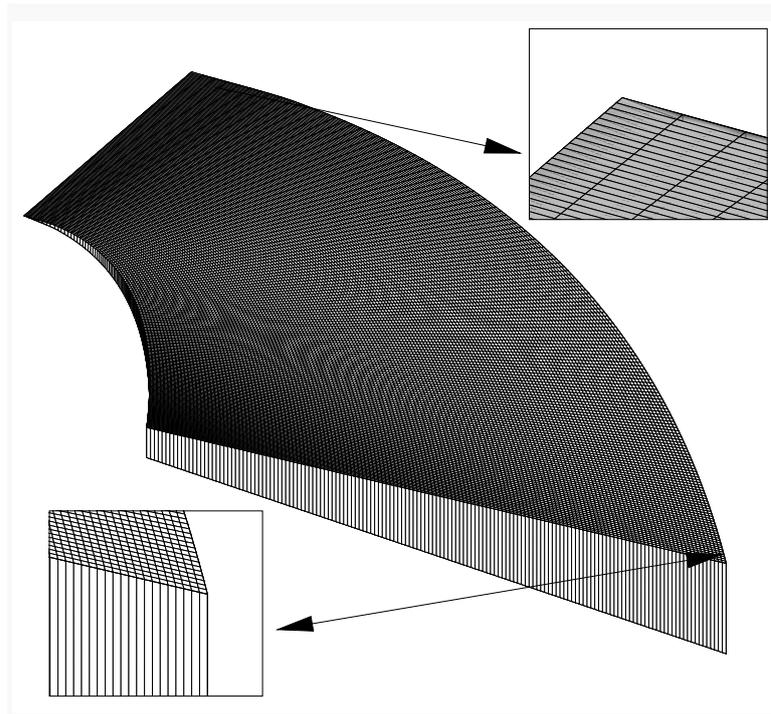


Fig. 4.30: Malla cuerpo romo: configuración axisimétrica.

Considerando que los resultados del caso bidimensional mostraron que la función limitadora de van Leer brinda el mejor compromiso entre un campo de presiones libre de oscilaciones, una apropiada resolución de la onda de choque y convergencia, la única simulación para este caso se desarrolla empleando dicha función.

En la Fig. 4.31<sup>18</sup> se comparan el campo de número de Mach obtenido en la simulación efectuada con `rhoCentralFoam` y el reportado por Brooks [66]. De acuerdo a la simulación realizada, la distancia de la onda se estima en  $0.10048\text{ m}$  la cual difiere en  $4.47\%$  respecto a la reportada por Brooks. También se compara la posición de la línea sónica tomando como dato de referencia al punto de intersección de dicha línea con el cuerpo. Dicho punto se ubica en  $0.2584\text{ m}$  ( $0.5078\text{ m}$ ) con respecto a un sistema de coordenadas plano con origen en el punto de impacto, en este caso las diferencias son  $3.11\%$  y  $1.57\%$  para las coordenadas  $x$  e  $y$  respectivamente. Es de hacer notar que la resolución de la onda de choque que se obtiene con las simulaciones con `rhoCentralFoam` es aceptable a pesar de la relativa poca cantidad de celdas empleadas. En la Fig. 4.32 se observa la

<sup>18</sup>Nótese que las coordenadas del cuerpo utilizadas por Brooks y las utilizadas aquí fijan diferentes marcos de referencia de allí las diferencias observadas en las escalas.

comparación de la distribución de presiones sobre el cuerpo calculada con rhoCentralFoam, con la obtenida por Brooks [66]. Se observa una buena correspondencia entre ambos campos.

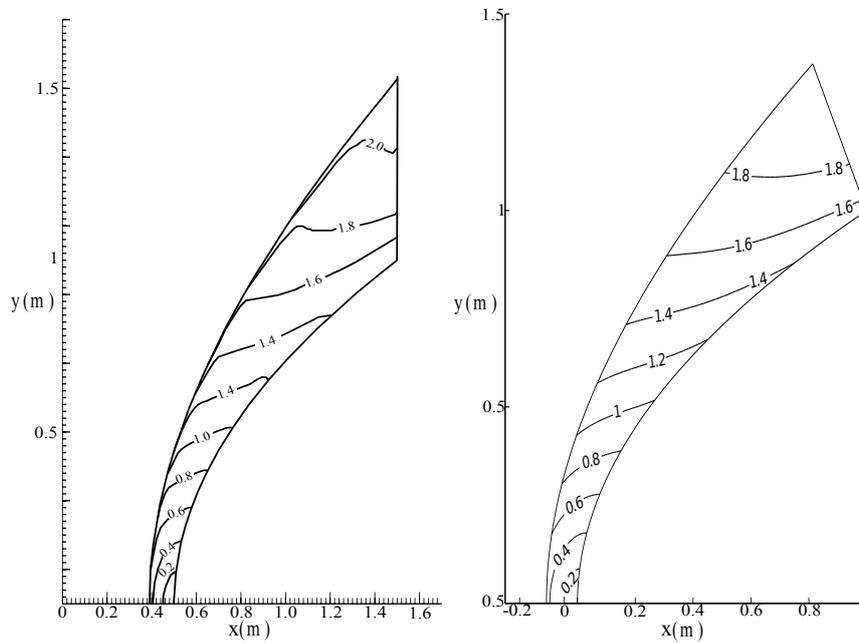


Fig. 4.31: Cuerpo romo axisimétrico distribuciones de Mach: rhoCentralFoam(izq) - Brooks [66] (der).

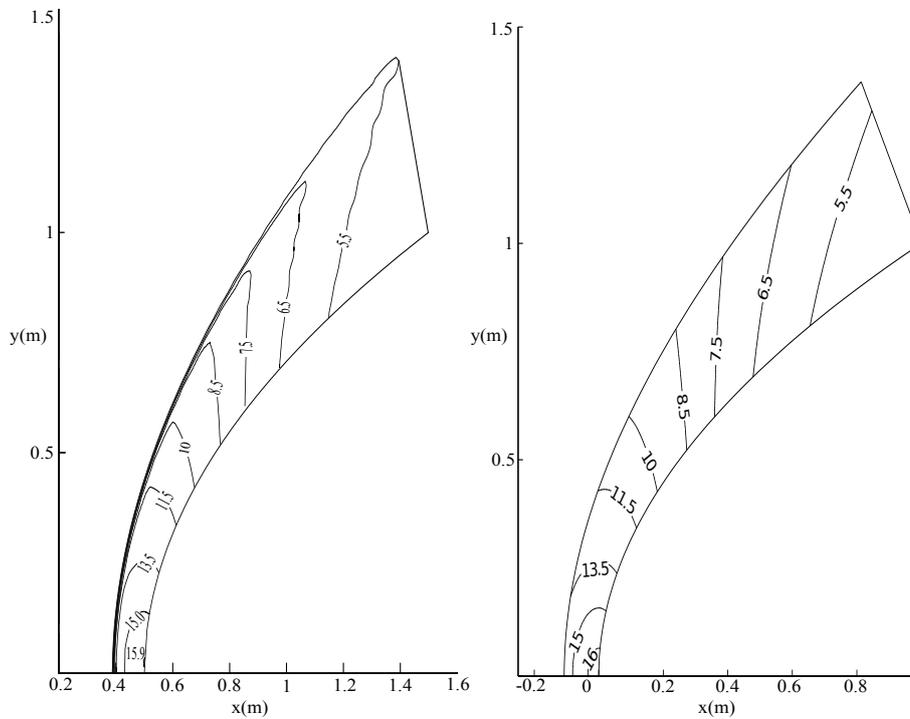


Fig. 4.32: Cuerpo romo axisimétrico distribución de presiones : rhoCentralFoam (izq) - Brooks [66] (der).

La simetría del problema permitiría utilizar la teoría newtoniana modificada (TNM) para esti-

mar el coeficiente de presión ( $c_p$ ) sobre el cuerpo [14]. Por lo tanto resulta útil comparar los resultados de la simulación numérica con los provenientes de dicha teoría. En la Fig. 4.33 se muestra dicha comparación.

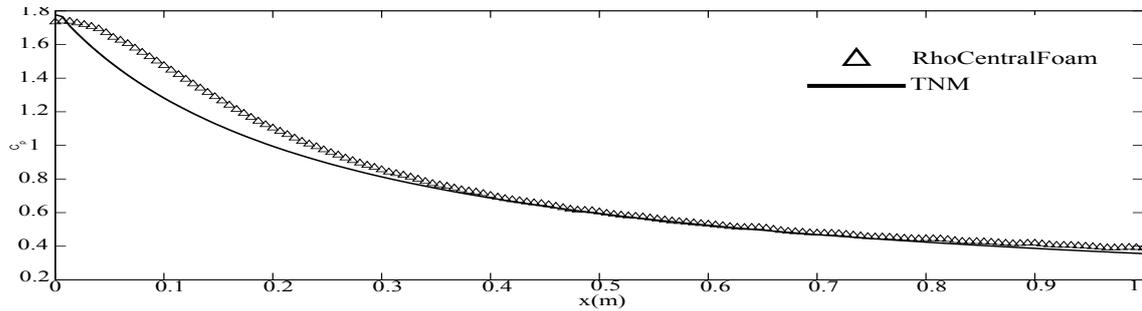


Fig. 4.33: Cuerpo romo axisimétrico: distribución del coeficiente de presión

Nótese que en el punto de impacto la simulación realizada con rhoCentralFoam en conjunto con la función limitadora de van Leer da como resultado una diferencia del 1.6 % respecto del valor provisto por la teoría newtoniana. La máxima diferencia encontrada entre resultados obtenidos con rhoCentralFoam y la teoría newtoniana es del orden del 15 %. Téngase en cuenta que la aplicación de esta teoría para  $M_\infty = 3.5$  es inusual. Finalmente en la Fig. 4.34 se puede observar los cambios experimentados por el número de Mach, presión, temperatura y densidad de la corriente libre a través de la discontinuidad producida por la onda de choque. La resolución de la onda si bien es aceptable, puede ser mejorada aumentando la cantidad de celdas utilizadas en la grilla o mediante mallado adaptivo.

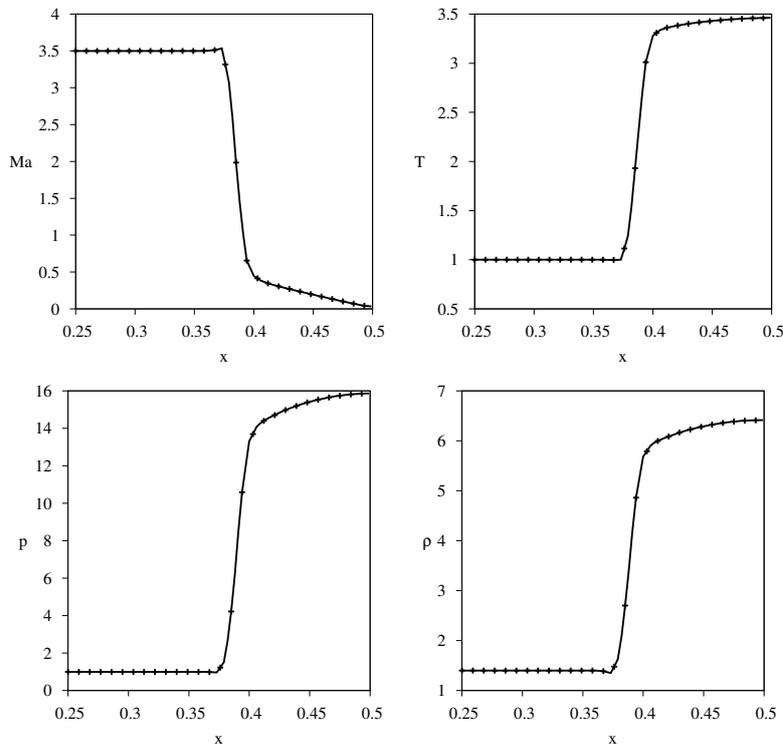


Fig. 4.34: Cuerpo romo axisimétrico: cambios de Mach, presión, temperatura y densidad a través del choque.

## Referencias capítulo 4

- [1] **R. Issa**, *Solution of the implicitly discretised fluid flow equations by operator-splitting*, *Journal of Computational Physics*, vol. 62(1):pp. 40 – 65, 1986.
- [2] **T. J. Chung**, *Computational Fluid Dynamics*, Cambridge University Press, 2nd ed., 2010.
- [3] **F. Moukalled y M. Darwish**, *A high-resolution pressure-based algorithm for fluid flow at all speeds*, *Journal of Computational Physics*, vol. 168(1):pp. 101–130, 2001.
- [4] **P. Wesseling**, *Principles of computational fluid dynamics*, vol. 29, Springer Science & Business Media, 2009.
- [5] **K. Nerinckx, J. Vierendeels y E. Dick**, *A mach-uniform pressure correction algorithm using ausm flux definitions*, *ADVANCES IN FLUID MECHANICS SERIES*, vol. 40:pp. 33–42, 2004.
- [6] **C. Xisto, J. Páscoa, P. Oliveira y D. Nicolini**, *A hybrid pressure–density-based algorithm for the euler equations at all mach number regimes*, *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, vol. 70(8):pp. 961–976, 2012.
- [7] **J. Blazek**, *Computational fluid dynamics: principles and applications*, Elsevier Science, 3rd ed., 2015.
- [8] **E. F. Toro**, *Riemann solvers and numerical methods for fluid dynamics: a practical introduction*, Springer Science & Business Media, 2009.
- [9] **V. Guinot**, *Godunov-type schemes: an introduction for engineers*, Elsevier, 2003.
- [10] **C. B. Laney**, *Computational gasdynamics*, Cambridge University Press, 1998.
- [11] **K. K. Kuo.**, *Principles of Combustion*, John Wiley & Sons, Inc., 2nd ed., 2005.
- [12] **J. Anderson**, *Modern Compressible Flow: With Historical Perspective*, McGraw-Hill Series in Aeronautical and Aerospace Engineering, McGraw-Hill, 2004.
- [13] **C. J. Chapman**, *High speed flow*, vol. 23, Cambridge University Press, 2000.
- [14] **J. Anderson**, *Hypersonic and High-Temperature Gas Dynamics*, AIAA Education Series, American Institute of Aeronautics and Astronautics, 2006.
- [15] **D. Knight**, *Elements of Numerical Methods for Compressible Flows*, Cambridge Aerospace Series, Cambridge University Press, 2006.
- [16] **J. Anderson**, *Hypersonic and High-Temperature Gas Dynamics*, AIAA Education Series, American Institute of Aeronautics and Astronautics, 2006.
- [17] **J. P. Tamagno, S. A. Elaskar y W. Schulz**, *Dinámica de los Gases. Flujo Unidimensional Estacionario*, Asociación Argentina de Mecánica Computacional Serie de Monografías en tópicos de Mecánica Aplicada y Computacional, Editorial Universitatis, Córdoba (Argentina), 2008.
- [18] **R. Courant y K. O. Friedrichs**, *Supersonic flow and shock waves*, vol. 21, Springer Science & Business Media, 1999.
- [19] **A. H. Shapiro**, *The dynamics and thermodynamics of compressible fluid flow*, vol. 1,2, New York: Ronald Press, 1953-5.

- [20] **W. Vincenti y C. Kruger**, Introduction to physical gas dynamics, Krieger, 1967.
- [21] **A. Kurganov y E. Tadmor**, *New high-resolution central schemes for nonlinear conservation laws and convection-diffusion equations*, *Journal of Computational Physics*, vol. 160(1):pp. 241–282, 2000.
- [22] **A. Kurganov, S. Noelle y G. Petrova**, *Semidiscrete central-upwind schemes for hyperbolic conservation laws and hamilton–jacobi equations*, *SIAM Journal on Scientific Computing*, vol. 23(3):pp. 707–740, 2001.
- [23] **A. Kurganov y G. Petrova**, *Central-upwind schemes on triangular grids for hyperbolic systems of conservation laws*, *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, vol. 21(3):pp. 536–552, 2005.
- [24] **L. F. Gutierrez Marcantoni, J. P. Tamagno y S. A. Elaskar**, *High speed flow simulation using openfoam*, in Actas del Congreso X Argentino de mecánica computacional, Salta, Argentina, 2012.
- [25] **P. L. Roe**, *Approximate riemann solvers, parameter vectors, and difference schemes*, *Journal of Computational Physics*, vol. 43(2):pp. 357–372, 1981.
- [26] **M. S. Liou y C. J. Steffen**, *A new flux splitting scheme*, *Journal of Computational physics*, vol. 107(1):pp. 23–39, 1993.
- [27] **P. L. Roe y J. Pike**, *Efficient construction and utilisation of approximate riemann solutions*, in Proc. Of the Sixth Int’L. Symposium on Computing Methods in Applied Sciences and Engineering, VI, pp. 499–518, North-Holland Publishing Co., Amsterdam, The Netherlands, The Netherlands, 1985.
- [28] **P. Lax y B. Wendroff**, *Systems of conservation laws*, *Communications on Pure and Applied Mathematics*, vol. 13(2):pp. 217–237, 1960.
- [29] **J. Logan**, *An Introduction to Nonlinear Partial Differential Equations*, Pure and Applied Mathematics: A Wiley Series of Texts, Monographs and Tracts.
- [30] **R. J. LeVeque**, *Finite volume methods for hyperbolic problems*, vol. 31, Cambridge university press, 2002.
- [31] **J. Wendt**, *Computational Fluid Dynamics: An Introduction*, A von Karman Institute book, Springer Berlin Heidelberg, 2010.
- [32] **S. K. Godunov**, *A difference method for numerical calculation of discontinuous solutions of the equations of hydrodynamics*, *Matematicheskii Sbornik*, vol. 89(3):pp. 271–306, 1959.
- [33] **R. Pletcher, J. Tannehill y D. Anderson**, *Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer*, Third Edition, Series in Computational and Physical Processes in Mechanics and Thermal Sciences, CRC Press, 2012.
- [34] **E. F. Toro, M. Spruce y W. Speares**, *Restoration of the contact surface in the hll-riemann solver*, *Shock waves*, vol. 4(1):pp. 25–34, 1994.
- [35] **A. Harten y J. M. Hyman**, *Self adjusting grid methods for one-dimensional hyperbolic conservation laws*, *Journal of computational Physics*, vol. 50(2):pp. 235–269, 1983.
- [36] **M. Kermani y E. Plett**, *Modified entropy correction formula for the roe scheme*, 2001.

- [37] **A. Harten, P. D. Lax y B. v. Leer**, *On upstream differencing and godunov-type schemes for hyperbolic conservation laws*, *SIAM review*, vol. 25(1):pp. 35–61, 1983.
- [38] **B. Einfeldt**, *On godunov-type methods for gas dynamics*, *SIAM Journal on Numerical Analysis*, vol. 25(2):pp. 294–318, 1988.
- [39] **B. Van Leer**, *Flux-vector splitting for the euler equations*, in Eighth international conference on numerical methods in fluid dynamics, pp. 507–512, Springer, 1982.
- [40] **O. Borm, A. Jemcov y H.-P. Kau**, *Density based navier stokes solver for transonic flows*, in 6th OpenFOAM Workshop, PennState University, USA, 2011.
- [41] **M. Heinrich y R. Schwarze**, *All-mach number density based flow solver for openfoam*, in ASME Turbo Expo 2014: Turbine Technical Conference and Exposition, American Society of Mechanical Engineers, 2014.
- [42] **C. Shen, S. Fengxian y X. Xinlin**, *Analysis on capabilities of density-based solvers within OpenFOAM to distinguish aerothermal variables in diffusion boundary layer*, *Chinese Journal of Aeronautics*, vol. 26(6):pp. 1370–1379, 2013.
- [43] **J. L. Steger y R. Warming**, *Flux vector splitting of the inviscid gasdynamic equations with application to finite-difference methods*, *Journal of computational physics*, vol. 40(2):pp. 263–293, 1981.
- [44] **B. Van Leer**, *Upwind and high-resolution methods for compressible flow: From donor cell to residual-distribution schemes*, *Communications in Computational Physics*, vol. 1(192-206):p. 138, 2006.
- [45] **M. S. Liou**, *A sequel to ausm: Ausm+*, *Journal of Computational Physics*, vol. 129(2):pp. 364–382, 1996.
- [46] **M. S. Liou**, *The evolution of ausm schemes*, *Defence Science Journal*, vol. 60(6):pp. 606–613, 2010.
- [47] **P. D. Lax**, *Hyperbolic systems of conservation laws and the mathematical theory of shock waves*, vol. 11, SIAM, 1973.
- [48] **H. Nessyahu y E. Tadmor**, *Non-oscillatory central differencing for hyperbolic conservation laws*, *Journal of computational physics*, vol. 87(2):pp. 408–463, 1990.
- [49] **G. Jiang, D. Levy, C. Lin, S. Osher y E. Tadmor**, *High-resolution nonoscillatory central schemes with nonstaggered grids for hyperbolic conservation laws*, *SIAM Journal on Numerical Analysis*, vol. 35(6):pp. pp. 2147–2168, 1998.
- [50] **X. D. Liu y E. Tadmor**, *Third order nonoscillatory central scheme for hyperbolic conservation laws*, *Numerische mathematik*, vol. 79(3):pp. 397–425, 1998.
- [51] **B. Van Leer**, *Towards the ultimate conservative difference scheme. v. a second-order sequel to godunov's method*, *Journal of computational Physics*, vol. 32(1):pp. 101–136, 1979.
- [52] **A. Harten**, *High resolution schemes for hyperbolic conservation laws*, *Journal of computational physics*, vol. 49(3):pp. 357–393, 1983.
- [53] **A. Kurganov y G. Petrova**, *A third-order semi-discrete genuinely multidimensional central scheme for hyperbolic conservation laws and related problems*, *Numerische Mathematik*, vol. 88(4):pp. 683–729, 2001.

- [54] **C. W. Shu**, *Essentially non-oscillatory and weighted essentially non-oscillatory schemes for hyperbolic conservation laws*, Springer, 1998.
- [55] **S. Marquez Damian**, *An Extended Mixture Model for the Simultaneous Treatment of Short and Long Scale Interfaces*, Ph.D. thesis, Universidad Nacional del Litoral, Santa Fe, Argentina., 2013.
- [56] **P. Arminjon y R. Touma**, *Finite volume central schemes for 3-dimensional ideal mhd*, *Centre de Recherches Mathematiques, Universite de Montreal, Canada*, 2010.
- [57] **C. Greenshields, H. Weller, L. Gasparini y J. Reese**, *Implementation of semi-discrete, non-staggered central schemes in a colocated, polyhedral, finite volume framework, for high-speed viscous flows*, *International journal for numerical methods in fluids*, vol. 63(1):pp. 1–21, 2010.
- [58] **B. Van Leer**, *Towards the ultimate conservative difference scheme. ii. monotonicity and conservation combined in a second-order scheme*, *Journal of Computational Physics*, vol. 14(4):pp. 361–370, 1974.
- [59] **G. Van Albada, B. Van Leer y W. Roberts Jr**, *A comparative study of computational methods in cosmic gas dynamics*, *Astronomy and Astrophysics*, vol. 108:pp. 76–84, 1982.
- [60] **P. Roe**, *Characteristic-based schemes for the euler equations*, *Annual review of fluid mechanics*, vol. 18(1):pp. 337–365, 1986.
- [61] **T. Behrens**, *Openfoam's basic solvers for linear systems of equations*, Tech. rep., Technical University of Denmark, 2009.
- [62] **S. Saha y D. Chakraborty**, *Hypersonic intake starting characteristics—a cfd validation study*, *Defence Science Journal*, vol. 62(3):pp. 147–152, 2012.
- [63] **S. Emami, C. A. Trexler, A. H. Auslender y J. P. Weidner**, *Experimental investigation of inlet-combustor isolators for a dual-mode scramjet at a Mach number of 4*, vol. 3502, NASA, 1995.
- [64] **F. R. Menter**, *Two-equation eddy-viscosity turbulence models for engineering applications*, *AIAA journal*, vol. 32(8):pp. 1598–1605, 1994.
- [65] **D. C. Wilcox**, *Comparison of two-equation turbulence models for boundary layers with pressure gradient*, *AIAA journal*, vol. 31(8):pp. 1414–1421, 1993.
- [66] **G. Brooks y J. Powers**, *Standardized pseudospectral formulation of the inviscid supersonic blunt body problem*, *Journal of Computational Physics*, vol. 197(1):pp. 58–85, 2004.
- [67] **F. Billig**, *Shock-wave shapes around spherical-and cylindrical-nosed bodies.*, *Journal of Spacecraft and Rockets*, vol. 4:pp. 822–823, 1967.
- [68] **OpenFOAM - The Open Source CFD Toolbox - User's Guide**, OpenCFD Ltd, 2015.



# Capítulo 5

## Detonaciones

### Nomenclatura

#### Abreviaturas

CEA	<i>Chemical Equilibrium with Applications</i>
CFL	Condición de Courant–Friedrichs–Lewy
CJ	Chapman-Jouguet
fV	<i>Fixed value</i>
NASA	<i>National Aeronautics and Space Administration</i>
ODEs	<i>Ordinary differential equations</i>
PaSR	<i>Partially stirred reactor</i>
SIBS	<i>Semi implicit method of Bulirsh and Stoer</i>
vN	von Neumann
zG	Gradiente nulo

#### Alfabeto latino

$A$	Factor pre-exponencial
$a$	Velocidad de propagación del sonido
$a$	Altura de la célula de la detonación
$b$	Longitud de la célula
$C$	Concentración
$c^{ar}$	Relación de aspecto de la célula
$C_p$	Calor específico a presión constante
$Co$	Número de Courant
$C_v$	Calor específico a volumen constante
$D$	Velocidad de propagación de la detonación
$E$	Energía total
$E_a$	Energía de activación
$e_s$	Energía sensible
$f_o$	<i>Overdriven factor</i>
$H$	Entalpía total
$h_s$	Entalpía sensible
$k_A$	Coefficiente de Arrhenius
$k_i^b$	Constante de reacción de retroceso

$k_i^f$	Constante de reacción de avance
$L_d$	Longitud del dominio
$L_i$	Longitud de inducción
$\dot{m}$	Flujo másico
$n$	Exponente de la temperatura
$N, C$	Número de moles
$p$	Presión
$R$	Constante particular del gas
$R_u$	Constante universal de los gases
$T$	Temperatura
$T_0$	Temperatura de referencia
$T_A$	Temperatura de activación
$T_c$	Temperatura de empalme tablas JANAF
$T_H$	Temperatura límite superior tablas JANAF
$T_L$	Temperatura límite inferior tablas JANAF
$t$	Tiempo
$W$	Peso molecular
$W_k$	Peso molecular de la especie k
$\bar{W}$	Peso molecular medio
$X_k$	Fracción molar de la especie k
$Y_k$	Fracción de masa de la especie k

### Alfabeto griego

$\delta_I$	Ángulo de deflexión
$\Delta h_{f,k}^\circ$	Entalpía de formación o química de la especie k
$\Delta t$	Paso de tiempo fluidodinámico
$\epsilon_{ji}$	Eficiencia de tercer cuerpo de la especie $j$ para la reacción $i$
$\nu'_{ji}$	Coefficientes estequiométricos de los reactantes
$\nu''_{ji}$	Coefficientes estequiométricos de los productos
$\rho$	Densidad
$\rho_k$	Concentración másica de la especie k
$\phi$	Relación de equivalencia.
$\psi$	Compresibilidad
$\dot{\omega}_k$	Velocidad de reacción de la especie k
$\dot{\omega}_T$	Calor liberado por la combustión

### Superíndices

$m$	Base molar
$\circ$	Condiciones estándar

### Subíndices

$N$	Número de especies
$k$	Propiedad de la especie k
$u$	Mezcla fresca ( <i>unburned</i> )
$b$	Mezcla quemada ( <i>burned</i> )
$DN$	Condición en el ( <i>driven</i> )
$dr$	Condición en el ( <i>driver</i> )

## Introducción

En el capítulo anterior se exploraron diferentes técnicas aplicables a flujos con altas velocidades construidas utilizando las diferentes herramientas numéricas ofrecidas por openFoam™. Se observó que los esquemas centrados de Kurganov en un contexto de malla poliédrica no estructurada, proporcionan una alternativa a las técnicas tradicionales que también ofrece soluciones de buena relación calidad/costo computacional a problemas que involucran flujos en los que una correcta captura de las ondas presentes en el campo de flujo resulta ser definitoria. Aquí se aborda el problema de las detonaciones, las cuales se caracterizan porque el frente de onda viaja a velocidades supersónicas induciendo a medida que se desplaza por un medio reactivo, reacciones exotérmicas que sustentan a la detonación[1].

A diferencia de la combustión con baja velocidad (Cap. 3), al resolver las ecuaciones reactivas a altas velocidades, además de los efectos compresibles asociados a los fuertes gradientes de temperatura producto de los efectos de la liberación de calor (reacciones exotérmicas), se deben tener en cuenta los efectos típicos de un flujo a alta velocidad. Estos efectos son consecuencia de los cambios de densidad por la compresión/expansión que experimenta el fluido en respuesta a fuertes gradientes de presión [2, 3]. Como los términos convectivos cobran preponderancia en un campo de flujo en el cual se producen detonaciones ( $M \gg 1$ ), se hace necesario dar un trato apropiado a dichos términos y aplicar técnicas que puedan resolver de manera adecuada las diferentes ondas presentes. Para esta tarea, en este capítulo se propone utilizar los esquemas de Kurganov como técnica resolutoria en vista de los buenos resultados obtenidos con flujos compresibles no reactivos (Cap. 4) [4–7].

En función de la velocidad a la cual se propaga una onda reactiva se pueden distinguir dos modos de combustión, la deflagración y la detonación. En un proceso de combustión a baja velocidad el mecanismo principal de ignición de la mezcla reactiva y propagación de la llama está dominado por efectos difusivos turbulentos, por lo tanto, resulta trascendental tener en cuenta dichos efectos y la turbulencia [8, 9]. Por otro lado, el mecanismo que genera la ignición en un proceso detonante es la compresión generada por el frente de onda, mientras que debido a las altas velocidades los efectos difusivos tienen poca incidencia y pueden no ser considerados[1]. En consecuencia, las ecuaciones de Euler aplicables a procesos detonantes resultan ser una apropiada representación matemática.

Simular numéricamente procesos detonantes es una tarea demandante desde el punto de vista computacional y para lograr desarrollar un modelo exitoso para las ondas detonantes se debe contar con un método eficiente para resolver la parte fluidodinámica. Aquí se mostrará que se han empleado con éxito volúmenes finitos y el esquema de Kurganov para tratar los términos convectivos[10]. El modelado de la química implica seleccionar un modelo cinético apropiado para la mezcla reactiva en estudio, dicho modelo debe reflejar de la forma más fidedigna posible el mecanismo cinético de reacción, para esto existen diferentes niveles de aproximación, tal cual fue mostrado en Cap. 3 donde se emplearon modelos globales, elementales y combinación de ambos. De nuevo se hace necesario resolver un sistema de *stiff* ODEs asociado a la actividad química, para lo cual se emplea el método semi-implícito de Bulirsch-Stoer dados los buenos resultados conseguidos previamente [11].

El estudio formal de las detonaciones aparece a mediados del siglo XIX, exactamente en 1869 cuando Abel realiza la primera medición experimental de la velocidad de propagación de una detonación [12]. Sin embargo, ya desde el siglo XV se tenía conocimiento de que ciertos compuestos químicos desarrollaban violentas explosiones cuando se sometían a estímulos de origen mecánico [12]. En 1883 Mallard y Châtelier lograron obtener fotografías que mostraban la transición de una deflagración hacia una detonación, estos dos investigadores fueron los primeros en proponer que el frente detonante aparece como consecuencia de una fuerte compresión adiabática. La primera teoría para el estudio de las detonaciones fue propuesta de forma independiente por Chapman (1889), Jouguet (1904, 1905) y Mikelson (1890), cabe mencionar que el trabajo de Mikelson a pesar de ser uno de los pioneros en este campo ha sido poco difundido debido a que su tesis doctoral no fue conocida fuera de Rusia. De forma independiente Chapman, Jouguet y Mikelson proponen una teoría para las detonaciones que se fundamenta en el análisis de las ecuaciones de conservación a través del frente detonante, encontrando que existen dos posibles soluciones que convergen hacia una única cuando la velocidad del frente es mínima.

Una debilidad de la teoría de Chapman-Jouguet (CJ) es la falta de argumentos matemáticos y físicos fuertes que justifiquen el criterio de selección de la solución, en vista de esto muchos investigadores desde finales del siglo XIX hasta nuestros tiempos han utilizado diferentes argumentos para satisfacer dicho criterio. A pesar de que la teoría CJ es exitosa al predecir la velocidad de propagación además de las variaciones en  $p$ ,  $T$ ,  $\rho$  y  $u$  a través del frente, esta teoría no ofrece detalle alguno respecto a la estructura de la detonación. Fueron Zeldovich (1940), von Neumann (1942) Döring (1946) quienes propusieron el primer modelo de la estructura de una detonación plana el cual continúa siendo el más aceptado (comúnmente denominado modelo ZND).

## 5.1. Modos de combustión

Pueden manifestarse diferentes modos de combustión según las condiciones en las cuales se desarrolla el proceso. En general decidir el proceso dependerá de las condiciones iniciales, de borde, composición de los reactantes, grado de homogeneidad, nivel de turbulencia, configuración geométrica y características de ignición.

La zona de reacción también conocida como frente de llama, zona de llama u onda reactiva [8], se identifica como la zona en la que las reacciones tienen lugar produciendo una transformación exotérmica. De acuerdo a la configuración de los reactantes (combustible y oxidante) los procesos de combustión pueden dividirse en dos categorías:

- **Combustión pre-mezclada**  
El estado de mezcla entre oxidante y combustible es completamente homogéneo.
- **Combustión difusiva**  
El estado de mezcla está condicionado por los procesos de difusión experimentados por los reactantes, originalmente inyectados por separado.

Dependiendo de la velocidad a la que se desplaza la onda reactiva, en la combustión pre-mezclada se distinguen dos modos:

- **Deflagración**

- Detonación

Estos dos modos de combustión presentan propiedades completamente diferentes. En la figura Fig. 5.1 se puede observar una onda reactiva unidimensional que se desplaza de izquierda a derecha con velocidad constante  $u_d$ . Las condiciones en la zona de los gases no quemados (por delante de la onda) se identifican con el subíndice  $u$  y en la región de los gases quemados (por detrás de la onda) con el subíndice  $b$ .

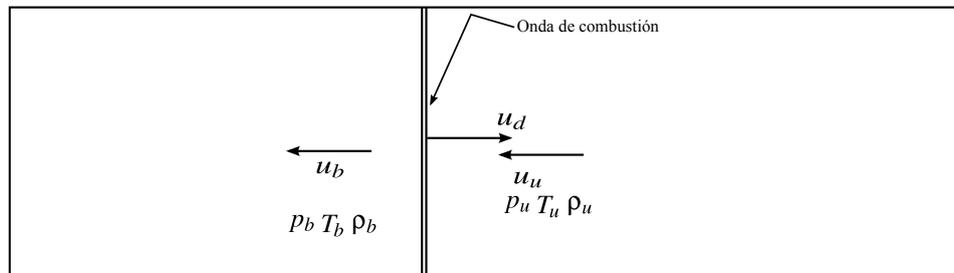


Fig. 5.1: Onda de combustión unidimensional

Hasta aquí sólo se mencionó que la onda observada en la Fig. 5.1 es una onda reactiva, que puede ser una **deflagración** o una **detonación** según su velocidad de propagación. En el contexto de la Fig. 5.1 las velocidades de los gases no quemados y quemados ( $u_u$  y  $u_b$ ) son relativas a la onda en un marco de referencia que se mueve con esta última, por lo tanto, la onda se considera estacionaria. De esta forma se puede considerar que los gases no quemados se aproximan hacia el frente con velocidad  $u_u$  mientras que los productos se alejan con velocidad  $u_b$ .

Si la velocidad de los gases no quemados ( $u_u$ ) por delante de la onda es del orden de  $\sim 0 - 100\text{m s}^{-1}$  la onda esquematizada en la Fig. 5.1 será una **deflagración**, su comportamiento es el de una onda de expansión y por lo tanto se observa una caída de presión y un aumento del volumen específico. La deflagración es una onda de combustión que se propaga a velocidades subsónicas. En procesos de combustión a bajas velocidades predominan los fenómenos difusivos sobre los convectivos. Entonces, los efectos turbulentos y de transporte difusivos determinan la velocidad de propagación. El principal mecanismo de ignición asociado a una deflagración es la transferencia de calor desde la zona reactiva [8].

Por otro lado, una detonación se propaga a velocidades supersónicas ( $\sim 2000\text{m s}^{-1}$ ), es una onda de compresión donde el frente se comporta como una onda de choque fuerte que comprime el gas produciendo un aumento de temperatura de tal magnitud que produce la autoignición de la mezcla. Debido a las escalas temporales involucradas, los efectos convectivos presentan mayor importancia que los difusivos [12]. Valores típicos de los diferentes parámetros a través de una detonación pueden observarse en la Tab. 5.2 [13].

	Detonación	Deflagración
$u_u/a_b$	5-10	0.0001-0.03
$u_b/u_u$	0.4-0.7	4-6
$p_b/p_u$	13-55	0.98
$T_b/T_u$	8-21	4-16
$\rho_b/\rho_u$	1.7-2.6	0.06-0.25

Tabla 5.2: Diferencias cuantitativas entre deflagraciones y detonaciones

## 5.2. La Líneas de Rayleigh y la curvas de Hugoniot: relaciones de Rankine-Hugoniot

A pesar de que el análisis presentado aquí puede ser encontrado en la bibliografía concerniente a la combustión, se considera pertinente incluirlo en vista de que los argumentos de la teoría de Chapman-Jouguet tienen un fuerte fundamento en lo descrito a continuación.

Utilizando las leyes de conservación es posible definir las líneas de Rayleigh y las curvas de Hugoniot. En el estudio de flujos gasdinámicos adiabáticos, es bien sabido que el diagrama  $p - v$  que pasa por el punto  $(p_1 p_0^{-1}, v_1 v_0^{-1}) = (1, 1)$  define la curva de Hugoniot que corresponde al lugar geométrico donde residen los valores detrás de una onda de choque con respecto de las condiciones no perturbadas  $(v_0, p_0)$  para una velocidad definida  $u_0$ . Al estudiar detonaciones se hace necesario considerar como punto de partida las curvas de Hugoniot y las líneas de Rayleigh debido a que ambas entidades definen sobre el diagrama  $p - v$  condiciones físicamente posibles y las diferencias entre detonaciones y deflagraciones.

### 5.2.1. Líneas de Rayleigh

Considerando a las ecuaciones de conservación de la masa y el momento en su forma unidimensional se puede obtener la relación:

$$p_b - p_u = (\rho_u u_u)^2 \left( \frac{1}{\rho_b} - \frac{1}{\rho_u} \right) = K^2 (v_b - v_u) \quad (5.1)$$

Si se definen

$$\hat{p} = \frac{p_b}{p_u} \quad \hat{v} = \frac{v_b}{v_u}$$

entonces, se puede obtener una relación entre los números de Mach de los reactantes y los productos tal que [1]:

$$M_b^2 = M_u^2 \frac{\hat{v}}{\hat{p}} \quad (5.2)$$

Utilizando la Ec. 5.2, es posible escribir a la Ec. 5.1 en términos de  $M_u$  o  $M_b$  como:

$$M_u^2 = - \frac{\hat{p} - 1}{\gamma(\hat{v} - 1)} \quad (5.3)$$

donde el producto  $\gamma M_u = K^2 / (p_u \rho_u)$  es un parámetro adimensional función del cuadrado del flujo de masa a través de la onda [1]. Al hacer un diagrama  $\hat{p} - \hat{v}$  y graficar la Ec. 5.3 las rectas que

pasan por  $(\hat{p}, \hat{v}) = (1, 1)$  son las **líneas de Rayleigh**, éstas tienen pendiente  $(-\gamma M_u^2)$  y debido a que el número de Mach de los reactantes debe ser mayor que cero ( $M_u > 0$ ), dichas líneas existen sólo para las condiciones:

$$(\hat{p} > 1) \wedge (\hat{v} < 1) \vee (\hat{p} < 1) \wedge (\hat{v} > 1) \tag{5.4}$$

Las líneas de Rayleigh (líneas rectas en el diagrama  $(p - v)$  definen el camino termodinámico por el que sucede la transformación  $(1, 1) \rightarrow (\hat{p}, \hat{v})$ .

### 5.2.2. Curvas de Hugoniot

Si se consideran las ecuaciones de conservación de la energía y la Ec. 5.1, es posible definir la relación:

$$h_b - h_u = \frac{1}{2} (v_b - v_u) (p_b - p_u) \tag{5.5}$$

la cual se conoce como la relación de Hugoniot, ésta es independiente de la ecuación de estado y por lo tanto del material por el cual se propaga la onda.

Introduciendo el aporte energético de la liberación de calor producto de la combustión  $\hat{\omega}_T$ , considerando  $c_p = cte$  y las definiciones de  $\hat{p}$  y  $\hat{v}$ , es posible obtener:

$$\left( \hat{p} + \frac{\gamma - 1}{\gamma + 1} \right) \left( \hat{v} + \frac{\gamma - 1}{\gamma + 1} \right) = \frac{4\gamma}{(\gamma + 1)^2} + 2\hat{\omega}_T \left( \frac{\gamma - 1}{\gamma + 1} \right) \tag{5.6}$$

donde  $\hat{\omega}_T = (\rho_u/p_u) \dot{\omega}_T$ . Las curvas que satisfacen a la Ec. 5.6 se denominan **Curvas de Hugoniot** y son hipérbolas con asíntotas  $\hat{p} \rightarrow \gamma^{-1}/\gamma+1$  y  $\hat{v} \rightarrow -\gamma^{-1}/\gamma+1$ . En condiciones no reactivas las curvas pasan por el punto  $(\hat{p}, \hat{v}) = (1, 1)$ , de lo contrario siempre se ubican por encima de dicho punto. Las ecuaciones Ec. 5.2 y Ec. 5.6 son las relaciones de **Rankine-Hugoniot** y sus implicaciones en lo que concierne a este capítulo se discuten a continuación.

### 5.2.3. Ondas de detonación y deflagración

Luego de manipular de forma apropiada las Ec. 5.2 y Ec. 5.6, se puede obtener:

$$\hat{v}_{\pm} - 1 = \frac{1 - M_u^2}{(\gamma + 1)M_u^2} \left[ 1 \pm \left( 1 - \frac{2(\gamma^2 - 1)}{\gamma} \frac{M_u^2}{(1 - M_u^2)^2} \hat{\omega}_T \right)^{\frac{1}{2}} \right] \tag{5.7a}$$

$$\hat{p}_{\pm} - 1 = \frac{(1 - M_u^2)\gamma}{(\gamma + 1)} \left[ 1 \pm \left( 1 - \frac{2(\gamma^2 - 1)}{\gamma} \frac{M_u^2}{(1 - M_u^2)^2} \hat{\omega}_T \right)^{\frac{1}{2}} \right] \tag{5.7b}$$

Las Ec. 5.7a y Ec. 5.7b muestran que el sistema está caracterizado por 3 parámetros,  $\gamma$ ,  $\hat{\omega}_T$  y  $M_u$ , los cuales representan la compresibilidad de la mezcla, el calor liberado por las reacciones y la velocidad de propagación de las ondas.

Las Ec. 5.7a y Ec. 5.7b definen dos posibles soluciones. Dichas soluciones presentan diferentes características para  $M_u > 1$  y  $M_u < 1$ . Los signos de  $\hat{v}_{\pm} - 1$  y  $\hat{p}_{\pm} - 1$  están determinados por el de  $(1 - M_u^2)$ . Por lo que es posible definir dos ramas:

- Rama supersónica: Si  $M_u > 1 \rightarrow$  **Detonaciones**
- Rama subsónica: Si  $M_u < 1 \rightarrow$  **Deflagraciones**

La Fig. 5.2 muestra un esquema en el que se pueden observar graficadas las posibles soluciones de acuerdo con las relaciones de Rankine-Hugoniot.

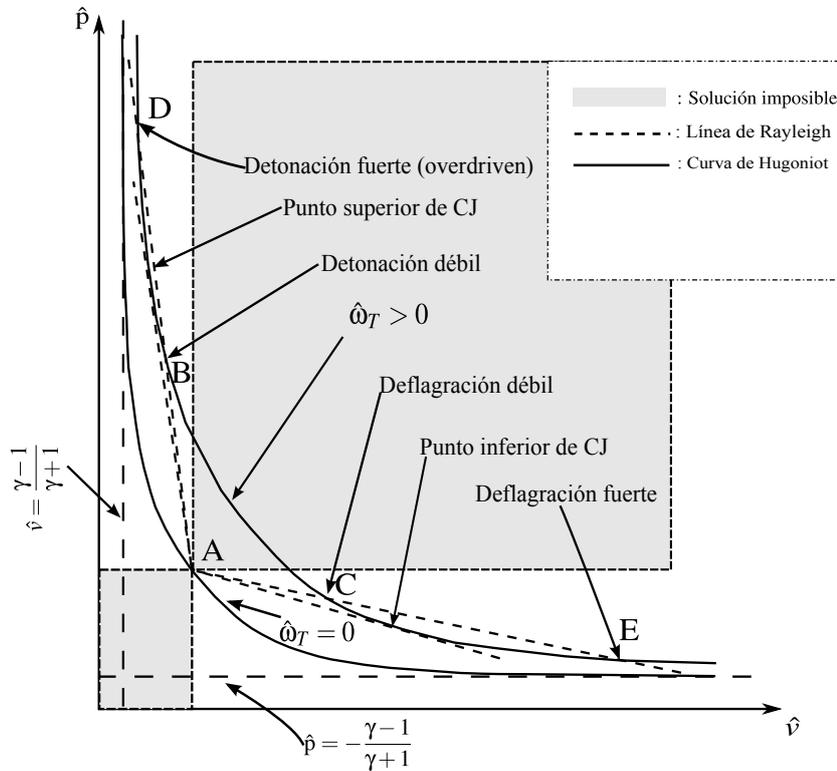


Fig. 5.2: Soluciones admisibles en el diagrama  $\hat{p} - \hat{v}$  (Rankine-Hugoniot)

Las ondas de detonación viajan a velocidades supersónicas, esto implica que a través de la onda la presión y la densidad aumentan, mientras que la velocidad disminuye ( $p_b > p_u, \rho_b > \rho_u, u_b < u_u$ ). El posible incremento en la presión está limitado por  $1 + (\gamma - 1)\hat{w}_T \leq \hat{p} \leq \infty$  y  $\hat{v} = 1$ , mientras que para la reducción en volumen se satisfacen las siguientes condiciones:  $(\gamma - 1)/(\gamma + 1) \leq \hat{v} \leq 1$  y  $p = \infty$ . Las soluciones con los valores más altos y bajos en cuanto al salto de presión se conocen respectivamente como **detonación fuerte** y **detonación débil** (Regiones entre los puntos A y D de la Fig. 5.2).

También se identifican dos puntos donde las líneas de Rayleigh son tangentes a las curvas de Hugoniot, estos puntos denominados **Punto superior de CJ** y **Punto inferior de CJ** son respectivamente donde tiene lugar la velocidad mínima de detonación (**punto superior de CJ**) y la velocidad máxima de deflagración (**punto inferior de CJ**). Luego de añadir el requisito de tangencia, se observa que las velocidades de propagación para los puntos superior e inferior de Chapman-Jouguet están definidas para valores dados de  $(\gamma, \hat{w}_T)$ , entonces, para evaluar las propiedades de las ondas de CJ se deben determinar las pendientes de las líneas de Rayleigh y de las curvas de Hugoniot, por lo tanto empleando Ec. 5.2 y Ec. 5.6 se puede demostrar que [1, 12]:

$$\frac{(\hat{p} - 1)\hat{v}}{\gamma(1 - \hat{v})\hat{p}} \geq 1 \quad (5.8)$$

Teniendo en cuenta la Ec. 5.2 y Ec. 5.3, se puede escribir a la Ec. 5.8 como:

$$M_b^2 \geq 1 \quad (5.9)$$

Esto implica condición sónica detrás de la onda, condición que fue usada por Jouguet para determinar la solución al problema. Por su parte, Chapman utilizó el criterio de mínima velocidad para llegar a la misma solución y en consecuencia ambos criterios resultan completamente equivalentes [12]. Cuando se tiene en cuenta la estructura de la onda se puede mostrar que detonaciones débiles en conjunto con reacciones exotérmicas son difíciles de observar. En general, en simulaciones numéricas y en la gran mayoría de montajes experimentales se logran observar detonaciones que se propagan con la velocidad de Chapman-Jouguet (Sección. 5.5). Cuando una detonación viaja con velocidad superior a la de CJ, se dice que es *overdriven*, no obstante se verifica que  $t \rightarrow \infty$ ,  $D \rightarrow D_{CJ}$ .

Utilizando las ecuaciones de continuidad y momento en forma 1D, se puede demostrar que el flujo másico por unidad de área está dado por:

$$\begin{aligned} \dot{m} &= \sqrt{\frac{P_b - P_u}{\rho_u^{-1} - \rho_b^{-1}}} \\ &= \sqrt{\frac{(\hat{p} - 1)}{(1 - \hat{v})}} P_u \rho_u \end{aligned} \quad (5.10)$$

A partir de la Fig. 5.2 se observa que para  $\hat{p} = 1$  y  $\hat{v} = 1$  son obtenidas las soluciones para presión y volumen constante respectivamente. También, en la misma figura se resaltan las zonas de solución imposible, dichas zonas están delimitadas por  $\hat{p} = cte$ ,  $\hat{v} = cte$ .

## 5.3. Ecuaciones de gobierno

En el Cap. 3 se presentaron las ecuaciones de transporte para un flujo químicamente activo en el que se tuvieron en consideración los efectos de la turbulencia. Aquí se presentan las ecuaciones para un flujo con reacciones químicas sin tener en cuenta ningún efecto difusivo, este conjunto de ecuaciones corresponde a las ecuaciones de Euler incluyendo las respectivas ecuaciones de transporte para las especies involucradas, los términos fuentes asociados a la producción/consumo de las especies y el que describe la liberación de calor en la ecuación de la energía.

### 5.3.1. Conservación de las especies

La ecuación de las especies se puede definir bien sea en función de la densidad parcial ( $\rho_i$ ) o de la fracción de masa ( $Y_i$ ) tal cual se utilizó en el Cap. 3 (Ec. 3.24). Aquí se hace uso de la misma formulación ignorando los términos difusivos, de acuerdo a esto es posible escribir

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho Y_k) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} Y_k) = \dot{\omega}_k \quad (5.11)$$

solamente se necesita resolver la Ec. 5.11 para  $N - 1$  especies, ya que la enésima especie se determina a partir de:

$$Y_N = 1 - \sum_{k=1}^{N-1} Y_k \quad (5.12)$$

### 5.3.2. Conservación de la masa y el momento

Como ya fue mencionado (Sección.3.2.3), la ecuación global de conservación de la masa y las de momento permanecen inalteradas ante la presencia de reacciones químicas, es decir que para el caso inviscido se puede escribir:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U}) = 0 \quad (5.13)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \mathbf{U}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \mathbf{U}) = -\nabla p \quad (5.14)$$

### 5.3.3. Conservación de la energía

A diferencia del Cap. 3 donde se formuló la ecuación de la energía en términos de la entalpía sensible, aquí resulta conveniente utilizar una formulación en términos de la energía total. La energía total se define como

$$E = e_s + \frac{1}{2} \|\mathbf{U}\|^2 \quad (5.15)$$

donde  $e_s$  es la energía sensible y el segundo término el aporte de la energía cinética. La energía sensible se relaciona con la entalpía sensible<sup>1</sup> a través de:

$$e_s = h_s - p\rho^{-1} \quad (5.16)$$

Utilizando las Ec. 5.15 y Ec. 5.16 es posible escribir a la energía total en términos de la entalpía sensible, la presión, la densidad y la velocidad [8]:

$$E = h_s - p\rho^{-1} + \frac{1}{2} \|\mathbf{U}\|^2 \quad (5.17)$$

A su vez la entalpía sensible es definida como:

$$h_s = \int_{T_0}^T C_{p,i} dT \quad (5.18)$$

Esta forma de definir la energía resulta útil ya que permite reutilizar la librería empleada en el Cap. 3 para actualizar las propiedades termofísicas en función de la entalpía sensible. De forma similar permite utilizar de nuevo la clase `thermo.H` para efectuar el cómputo de la temperatura a partir de la energía sensible (ver apartado final de Sección.3.2.2). Finalmente, la ecuación de transporte a resolver está dada por:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho E) + \nabla \cdot [\mathbf{U}(\rho E)] + \nabla \cdot \mathbf{q} + \nabla \cdot (p\mathbf{U}) = \dot{\omega}_T \quad (5.19)$$

Como se puede observar, dicha ecuación es similar a la ecuación de transporte para la energía utilizada en el Cap. 4(Ec. 4.10) con la diferencia que incluye un término asociado con las entalpías másicas de formación de las especies resultantes de la actividad química que define el calor entregado por el proceso de combustión ( $\dot{\omega}_T$ ).

<sup>1</sup>Aquí con  $e_s$  y  $h_s$  se designan a la energía y entalpía sensibles, respectivamente y éstas no contienen los términos vinculados con entalpías de formación de las especies. Estas entalpías están incluidas en el término fuente ( $\dot{\omega}_T$ ).

### 5.3.4. Ecuación de estado

Se considera que la mezcla reactiva está compuesta por  $N$  diferentes especies en estado gaseoso, las cuales se comportan como gases perfectos, por lo tanto la ecuación de estado para la especie  $k$  resulta

$$p_k = \rho_k \frac{R_u}{W_k} T \quad (5.20)$$

Para una mezcla de  $N$  gases la presión total es la suma de las presiones parciales:

$$p = \sum_{k=1}^N p_k \quad (5.21)$$

La concentración másica de la especie  $k$  puede ser escrita en función de la densidad de la mezcla y la fracción de masa como:

$$\rho_k = \rho Y_k \quad (5.22)$$

Al igual que en el caso de la presión, la densidad también se puede determinar como la suma de las concentraciones másicas parciales

$$\rho = \sum_{k=1}^N \rho_k \quad (5.23)$$

De esta forma es posible escribir la ecuación de estado para la mezcla de la forma:

$$\begin{aligned} p &= \rho \frac{R_u}{\bar{W}} T \\ &= \frac{\rho}{\psi} \end{aligned} \quad (5.24)$$

donde  $\bar{W}$  es el peso molecular medio de la mezcla, el cual puede ser definido en términos de concentraciones molares o fracciones másicas, según convenga<sup>2</sup> [8]:

$$\begin{aligned} \bar{W} &= \sum_{k=1}^N X_k W_k \\ \bar{W} &= \left( \sum_{k=1}^N \frac{Y_k}{W_k} \right)^{-1} \end{aligned}$$

## 5.4. Propiedades termofísicas y velocidad de propagación del sonido

Debido a que se considera flujo no viscoso, las únicas propiedades que se deben evaluar son el calor específico a presión constante ( $C_p$ ), la relación de calores específicos ( $\gamma$ ) y la constante de los gases para la mezcla ( $R$ ). Tal cual se mencionó en el Cap. 3, para evaluar el calor específico de cada especie se utilizan las Tablas JANAF [14], es decir, la actualización de  $C_{p,i}$  conforme el cálculo avanza se lleva a cabo con un polinomio de la forma:

$$C_{p,i}^{m,o} = R_u (a_{0k} + a_{1k}T + a_{2k}T^2 + a_{3k}T^3 + a_{4k}T^4) \quad (5.25)$$

<sup>2</sup>Es de hacer notar que el peso molecular medio es un promedio de los pesos moleculares de las especies ponderado bien sea por las fracciones molares o másicas

donde  $R_u = 8314.15 \text{ kJ/molK}$  es la constante universal de los gases, y  $a_{ik}$  para  $i = 0, 1 \dots 4$  son los coeficientes de ajuste del polinomio<sup>3</sup>. El cómputo del calor específico a presión constante en base molar  $C_{p,k}^{m,o}$  se realiza dentro del *software* con la subclase `Janaf.H`. El calor específico a presión constante de la mezcla se determina teniendo en cuenta los aportes de cada una de las especies:

$$C_p = \sum_{k=1}^N C_{p,k}^m W_k^{-1} Y_k = R_u \sum_{k=1}^N W_k^{-1} Y_k \left\{ \sum_{r=0}^4 a_{r,k} T^r \right\} \quad (5.26)$$

El calor específico a volumen constante a su vez se calcula de la siguiente forma:

$$C_v = C_p - \frac{R_u}{\bar{W}} \quad (5.27)$$

donde el segundo término del miembro derecho es la constante universal de los gases y el denominador de dicho término es el peso molecular medio de la mezcla ( $\bar{W}$ ). Para la construcción de los flujos numéricos, definidos por el esquema de Kurganov, es necesario conocer la velocidad del sonido en la interfaz, suponiendo que la mezcla se comporta como un gas ideal la velocidad de propagación del sonido está dada por:

$$a = \sqrt{\left( \frac{R_u}{\bar{W}} T \sum_{i=1}^N (\gamma_i Y_i) \right)} \quad (5.28)$$

Cualquier transformación necesaria de base molar a base másica se realiza utilizando la subclase `specieThermo.H`.

## 5.5. Teoría de Chapman-Jouguet

Tal cual se mencionó en la Sección. 5.2 el análisis de las líneas de Rayleigh y las curvas de Hugoniot ofrece importante información en lo que respecta a las ondas que se propagan en un medio reactivo y sus velocidades de propagación. La teoría de Chapman-Jouguet considera a la onda detonante como una discontinuidad que se propaga en un dominio unidimensional, ésta se deriva considerando las ecuaciones de transporte a través de una discontinuidad como la observada en la Fig. 5.1, sin embargo, resolver las ecuaciones de conservación aún para un conjunto apropiado de condiciones de borde, resulta ser insuficiente para determinar la velocidad de propagación de la onda [12]. La condición que cierra el sistema y posibilita la obtención de la solución es la condición de tangencia, la cual se discute a continuación.

Según lo expuesto en la Sección. 5.2 existen dos puntos de tangencia entre las líneas de Rayleigh y las curvas de Hugoniot que parten de  $(\hat{p}, \hat{v}) = (1, 1)$ , dichos puntos tienen lugar en su rama superior e inferior. Los puntos de tangencia se conocen como el punto superior (UCJ) e inferior (LCJ) de Chapman-Jouguet. Las soluciones de CJ pueden obtenerse a partir de las ecuaciones de conservación sin considerar ningún mecanismo de propagación para el frente de la onda reactiva, no obstante, que dicha solución sea físicamente aceptable o no, dependerá de qué tan bien concuerde con mediciones experimentales o en su defecto de consideraciones adicionales a las leyes de conservación supuestas [8, 12].

<sup>3</sup>Nótese que el polinomio para calcular  $C_{p,i}$  pueden incluir hasta 7 coeficientes, los dos restantes se utilizan para los cálculos de la entalpía y la entropía por medio de funciones polinómicas similares [15]

Para las detonaciones, soluciones numéricas han mostrado muy buena concordancia con las definidas por el punto superior de tangencia en donde se consigue la mínima velocidad de detonación. cabe mencionar que para el caso de las deflagraciones la solución de velocidad máxima en general no se observa, lo cual se debe a que en las deflagraciones los reactantes se ven influenciados por la dinámica de los productos de la combustión, la cual a su vez depende de la condición de borde aplicada sobre el contorno adyacente a dichos productos [12, 16].

Por definición<sup>4</sup>:

$$\left(\frac{d\hat{p}}{d\hat{v}}\right)_R^{CJ} = \left(\frac{d\hat{p}}{d\hat{v}}\right)_H^{CJ} \quad (5.29)$$

La ecuación que define una evolución isentrópica de los productos de la combustión está dada por:

$$pv^{\gamma_b} = \text{cte} \quad (5.30)$$

De forma que su pendiente resulta:

$$\left(\frac{d\hat{p}}{d\hat{v}}\right)_S = \frac{-\gamma_b \hat{p}}{\hat{v}} \quad (5.31)$$

La condición adicional para determinar la velocidad de propagación fue determinada de forma independiente tanto por Chapman como por Jouguet [17, 18]. En 1889 Chapman encontró que cuando una línea de Rayleigh es tangente a una curva de Hugoniot (punto superior de Chapman-Jouguet Fig. 5.2), la velocidad de la detonación es mínima (ver Sección. 5.2), posterior a esto en 1904 Jouguet de forma independiente formula que en el punto de tangencia  $M_b = 1$ .

Luego, se pueden relacionar la velocidad del sonido y la pendiente de la evolución isentrópica (Ec. 5.31):

$$\frac{d\hat{p}}{d\hat{v}} = -c_b^2 (p_u v_u \hat{v}^2)^{-1} \quad (5.32)$$

Teniendo en cuenta la Ec. 5.10 es posible definir la pendiente de la curva de Rayleigh de la forma

$$\frac{\hat{p}}{\hat{v}} = -u_b^2 (p_u v_u \hat{v}^2)^{-1} \quad (5.33)$$

Debido a la condición de tangencia (Ec. 5.29) se verifica:

$$u_b^{CJ} (c_b^{CJ})^{-1} = (M_b^{CJ})^2 = 1.0 \quad (5.34)$$

Con lo que se obtiene la condición utilizada por Jouguet para determinar la correcta velocidad de propagación de una detonación. Por otro lado, Chapman seleccionó la mínima velocidad de propagación como criterio de una solución físicamente posible (estos dos criterios corresponden a la denominada **condición de tangencia**). Es importante mencionar que existen condiciones bajo las cuales la condición sónica no corresponde al equilibrio químico, siendo el caso de las conocidas como **detonaciones patológicas**.

Por encima de esta velocidad mínima de detonación, para un valor finito de calor agregado ( $\omega_T$ ) la línea de Rayleigh intercepta dos veces a la rama superior de la curva de Hugoniot asociada a ( $\omega_T$ ), por lo que existen dos soluciones posibles: la **detonación fuerte** (*overdriven detonation*) (punto D en Fig. 5.2) y la **detonación débil** (punto B en Fig. 5.2).

Es de interés hacer notar que en el punto de CJ en la rama de las detonaciones se encuentra un mínimo para la entropía y además que para detonaciones débiles la entropía aumenta mientras

<sup>4</sup>Los subíndices  $H$  y  $R$  se refieren a tangencia con respecto a las curvas Hugoniot y líneas de Rayleigh respectivamente

que en el caso de las fuertes (*overdriven*) disminuye [12, 19]. Nótese que a pesar de la buena correspondencia con experimentos de la teoría CJ, no existen justificaciones teóricas firmes para la selección de los criterios de mínima velocidad o condición sónica, por lo que aún se realizan investigaciones con el propósito de encontrar una justificación más rigurosa.

La comunidad científica abocada al estudio de las detonaciones concuerda en que la detonación fuerte es altamente inestable para una propagación libre, es decir, que si bien un fuerte foco de liberación de energía puede generar una detonación fuerte, se verifica que:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} D(t) = D_{CJ} \quad (5.35)$$

en consecuencia, una detonación inicialmente en estado *overdriven*, siempre decaerá a la solución de mínima velocidad (solución de Chapman-Jouguet). Consideraciones de estabilidad basadas en el hecho de que el flujo es subsónico detrás del frente y las ondas de expansión pueden propagarse hacia la zona de reacción justifican la atenuación de la detonación inicial [20, 21].

Aunque la solución débil puede ser descartada, el análisis necesario resulta considerablemente más complejo que el aplicable al caso de la fuerte. Muchos investigadores han buscado diferentes argumentos para dicha justificación, Becker y Scoriah en (1922 y 1935 respectivamente), utilizaron argumentos basados en la entropía para justificar el criterio de CJ. Becker inicialmente consideró que dado que el cambio de entropía a través de una detonación fuerte es mayor que el resultante a través de una débil para una misma velocidad de propagación, entonces resultaría más probable la aparición de una detonación fuerte. No obstante, considerando el problema asociado a la estabilidad, Becker posteriormente concluye que la solución debe concordar con la condición sónica o de mínima velocidad contemplada por el criterio de CJ. Scoriah asocia la mínima velocidad de propagación con la mínima tasa de degradación posible para la energía disponible [12]. En 1950 Zeldovich refuta cualquier argumento termodinámico, postulando que dado un incremento de entropía, éste no es garantía de que una onda de choque tenga lugar [22]. El argumento más consistente y aceptado para la existencia de las detonaciones débiles fue formulado por von Neumann en 1942, von Neumann postula la existencia de curvas de Hugoniot para estados de reacción parcial, de esta forma dada una variable de progreso de la reacción  $n$ , existen curvas para cada  $n$  en el intervalo  $0 \leq n \leq 1$  (Fig. 5.3).

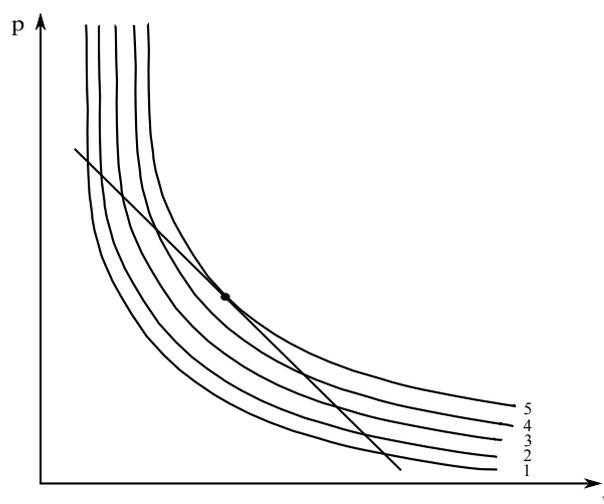


Fig. 5.3: Curvas de Hugoniot para diferentes estados de reacción parcial ( $n = [1, 2, 3, 4, 5]$ )

Una línea de Rayleigh que parte del estado inicial atravesará todas las curvas de reacción parcial hasta alcanzar el estado final, con lo que von Neumann mostró que sin la existencia de curvas de

reacción parcial que se crucen, las detonaciones débiles pueden ser descartadas. Esto se debe a que luego de que suceda el choque, el primer punto a lo largo de la línea de Rayleigh que se encontrará será el de la detonación fuerte y por lo tanto, una transición desde dicho estado hacia una detonación débil acarrearía una disminución en la entropía lo que violaría la segunda ley de la termodinámica (semejante a una expansión compresiva (ver Cap. 4)). En consecuencia, una detonación débil es posible para mezclas explosivas que tengan curvas de Hugoniot que se crucen entre sí, este tipo de detonaciones se conocen como **detonaciones patológicas** y el argumento para excluir a las detonaciones débiles parte de la suposición de que el frente induce la combustión mediante compresión adiabática, y las detonaciones patológicas tienen lugar en sistemas cuya cinética química procede inicialmente con una rápida reacción exotérmica seguida de una lenta reacción endotérmica, o en el que la reacción exotérmica inicial sea débil [12]. El argumento de von Neumann hasta ahora resulta ser el más plausible en cuanto se refiere a descartar la zona de solución débil, no obstante, se ha demostrado la existencia de detonaciones débiles en mezclas de  $H_2 + Cl_2$  (para información más detallada se recomiendan las referencias [22–24])

A pesar de que las detonaciones son inestacionarias y poseen estructuras altamente tridimensionales, el modelo de CJ que propone a la detonación como un proceso estacionario unidimensional con un frente de onda de espesor nulo suponiendo equilibrio termoquímico, proporciona una muy buena aproximación a los **parámetros estáticos de la detonación** [20, 25]:

- Velocidad de propagación
- Salto de presión
- Salto de temperatura
- Salto de densidad
- Composición en equilibrio

Entre los métodos utilizados para determinar los parámetros estáticos utilizando la teoría de Chapman-Jouguet, cabe mencionar a iterativos de prueba y error y de Newton-Raphson[8]. El procedimiento a seguir en lo que respecta a los métodos iterativos puede ser encontrado en la sección 4.1 de la referencia [8]. La calidad de los resultados obtenidos mediante dichos métodos de prueba y error son muy dependientes de la pericia del calculista, de manera que, son preferidos los métodos del tipo Newton-Raphson, dentro de estos métodos el desarrollado por Zeleznik y Gordon incluido en el código CEA (*Chemical Equilibrium with Applications*) es uno de los más eficientes hasta el momento [26] El código CEA<sup>5</sup> permite obtener las composiciones de equilibrio, las propiedades termofísicas de la mezcla quemada y la velocidad de detonación según Chapman-Jouguet [27]. Si la detonación se comporta según la teoría de CJ, entonces, su velocidad de propagación dependerá de la composición de los reactantes. En la Tab. 5.3 se observan datos experimentales para la velocidad de propagación de la detonación, presión y temperatura de los productos para diferentes mezclas reactivas[28, 29].

---

<sup>5</sup>la versión *online* del código CEA puede ser encontrada en [www.grc.nasa.gov/WWW/CEAWeb/](http://www.grc.nasa.gov/WWW/CEAWeb/)

Mezcla	$D_{CJ}[m/s]$	$p_b[atm]$	$T_b[K]$
$2H_2 + O_2$	2819	18.05	2819
$(2H_2 + O_2) + 5O_2$	1700	14.13	1700
$(2H_2 + O_2) + 5N_2$	1822	14.39	1822
$(2H_2 + O_2) + 4H_2$	3527	15.97	3527
$(2H_2 + O_2) + 5He$	3160	16.32	3160
$(2H_2 + O_2) + 5Ar$	1700	16.32	1700
$4H_2 + O_2$	3390	17.77	3439
$2H_2 + O_2$	2825	18.56	3679
$H_2 + 3O_2$	1663	14.02	2667
$CH_4 + O_2$	2528	31.19	3332
$CH_4 + 1.5O_2$	2470	31.19	3725
$0.7C_2N_2 + O_2$	2570	45.60	5210

Tabla 5.3: Datos experimentales de la velocidad de propagación de la detonación, presión y temperatura de productos para diferentes mezclas [ $p_u = 1 atm(101325 Pa)$ ,  $T_u = 298 K$ ]

## 5.6. Modelo ZND

Este modelo fue formulado por Zeldovich [22], von Neumann [30] y Döring [31], postula a la detonación como una onda de choque plana que se propaga a la velocidad de Chapman-Jouguet, generando aumentos de presión y temperatura, se diferencia de la teoría de CJ debido a que en lugar de considerar un proceso instantáneo de ignición, la actividad química de liberación de energía tiene lugar luego de un periodo de inducción [22].

A medida que el proceso reactivo evoluciona la temperatura se incrementa mientras que la presión y densidad caen hasta alcanzar el estado de CJ. En la figura Fig. 5.4 se muestran perfiles de una detonación en una mezcla estequiométrica de acetileno-oxígeno con una dilución en argón del 82 %. En la Fig. 5.4.a se observa el perfil típico de una detonación, donde se distingue el **pico de von Neumann** (vN) de presión máxima. A continuación se observa la zona de inducción donde se inicia el proceso reactivo el cual se caracteriza por la formación de radicales. Después del periodo de inducción se ubica la **zona de reacción** donde sucede la liberación máxima de energía.

El proceso reactivo inicia en el pico de von Neumann debido a la alta energía producto del arribo de la onda compresiva, luego evoluciona hasta alcanzar el estado de CJ. Durante el periodo de inducción el proceso sucede en un estado térmicamente neutro, dicho tiempo y su longitud característica son dependientes de la cinética química, una vez ha sucedido la ignición y el proceso ha evolucionado, si el gas adquiere velocidad sónica con respecto al frente detonante se dice que ha alcanzado el estado CJ. En una detonación plana el estado CJ se sitúa próximo a la onda y en dicho punto se supone que se alcanza el equilibrio químico [1]. El proceso de inducción puede ser aproximado como una explosión a volumen constante convectada con la velocidad del fluido relativa al frente detonante con condición CJ ( $V_{vN} = D - u_{vN}$ ), por lo tanto, la longitud de inducción puede ser determinada de acuerdo a

$$l_i = V_{vN}\tau_i(p_{vN}, T_{vN}) \quad (5.36)$$

donde  $\tau_i$  es el tiempo de inducción (este será discutido en la Sección. 5.10.3),  $p_{vN}$  y  $T_{vN}$  son la presión y la temperatura del pico de von Neumann. Para obtener la solución con el modelo ZND

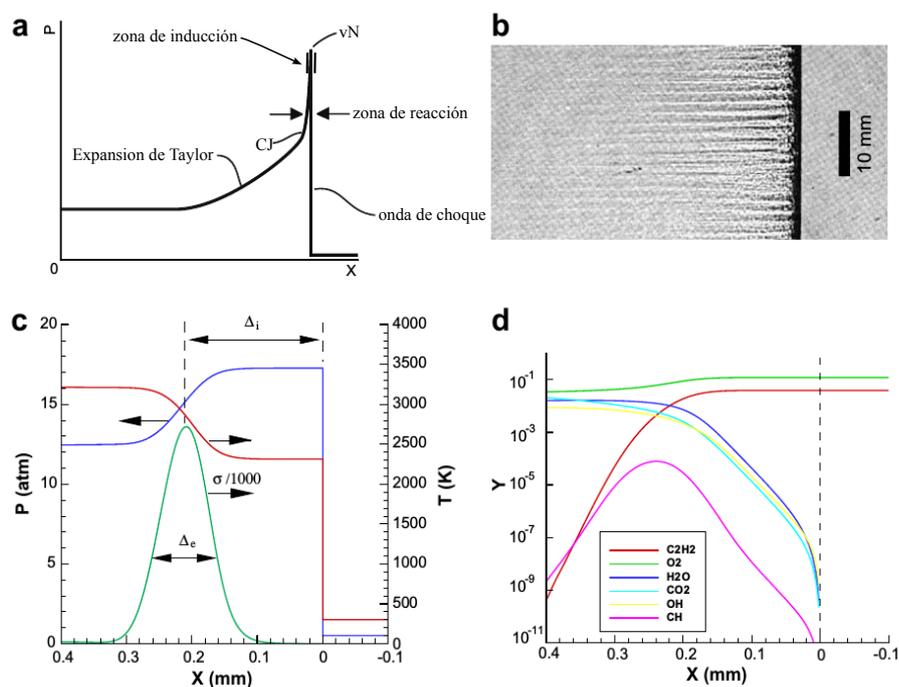


Fig. 5.4: Detonación plana de  $C_2H_2 : 3O_2 : 14Ar$  propagándose de izquierda a derecha a) Perfil producido por el movimiento del fluido por una detonación producida al extremo cerrado del conducto b) Imagen tipo Schlieren del frente reactivo c) Zona de reacción ideal (ZND): perfil de presión, temperatura y termicidad d) Zona de reacción ideal (ZND) distribución de las especies (Adaptada de [32])

se integran las ecuaciones de conservación tomando como condiciones iniciales a los valores de las variables de estado en el pico de von Neumann. Otra observación importante es que se puede demostrar que la velocidad de la detonación  $D_{CJ}$  en el caso unidimensional satisface la relación:

$$D_{CJ} = u_{b,CJ} + a_{b,CJ} \quad (5.37)$$

es decir, la velocidad de la detonación es igual a la suma de la velocidad de propagación del sonido y la del flujo de los gases quemados.

## 5.7. Estructura de las detonaciones en múltiples dimensiones

Las detonaciones 2D y 3D presentan estructuras altamente complejas, oscilaciones transversales a la dirección de propagación se superponen hasta formar conjuntos de ondas de presión (choques) que interactúan con el frente de la detonación. Estas interacciones dan origen a piernas de Mach por la reflexión de las ondas transversales desde el frente de la detonación. La estructura multidimensional fue estudiada por primera vez por Denisov y Troshin, quienes utilizaron una fina capa de carbón (*smoke foil technique*) para dejar en evidencia el patrón que surge a partir del paso de un frente detonante. La Fig. 5.5 muestra imágenes tipo Schlieren del frente de la detonación (izq.) e impresiones en capa de carbón de estructuras celulares observadas en mezclas reactivas con diferentes composiciones (der.) [32]. En dicha figura el frente se propaga de izquierda a derecha y se pueden observar diferentes regularidades en la estructura conseguida, siendo éstas más regulares en las mezclas diluidas con argón. La estructura de una detonación es discontinua e inestacionaria

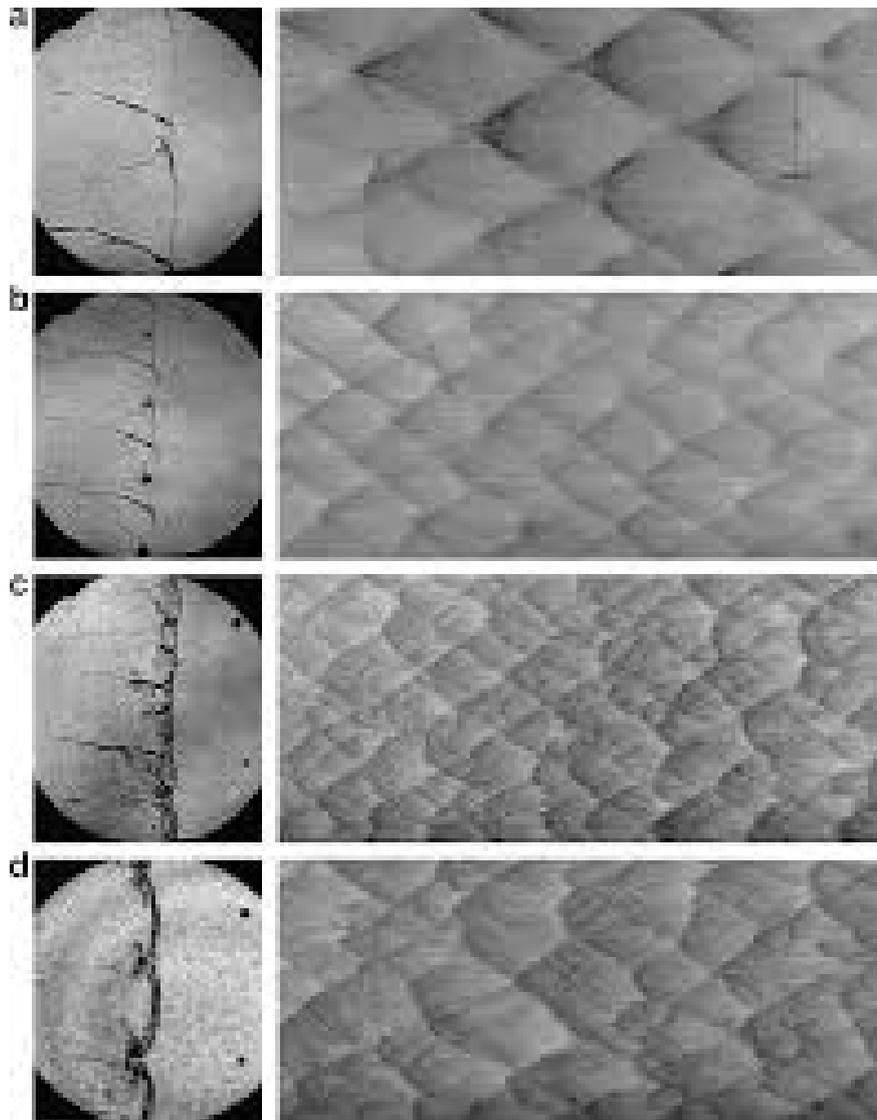


Fig. 5.5: Estructuras celulares observadas en diferentes mezclas reactivas: (a)  $2\text{H}_2 : \text{O}_2 : 17\text{Ar}$  (b)  $2\text{H}_2 : \text{O}_2 : 12\text{Ar}$  (c)  $\text{H}_2 : \text{N}_2\text{O} : 1.33\text{N}_2$  (d)  $\text{C}_3\text{H}_8 : 5\text{O}_2 : 9\text{N}_2$  [32]

debido a ondas transversales que se propagan oblicuas al frente, un ejemplo de dicha propagación se puede observar en la Fig. 5.6, en dicha figura se observa que el frente no es continuo ni plano, además, de las interacciones choque-choque que dan lugar a los puntos triples producto de las reflexiones que evolucionan en el tiempo e interactúan entre sí [1].

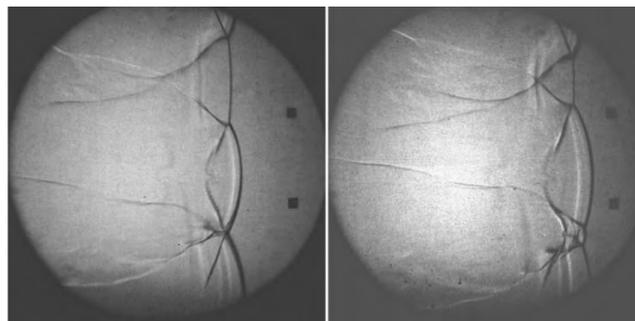


Fig. 5.6: Imágenes Schlieren de una detonación propagándose en una mezcla  $2\text{H}_2 + \text{O}_2 + 85\text{Ar}$  adaptada de [33]

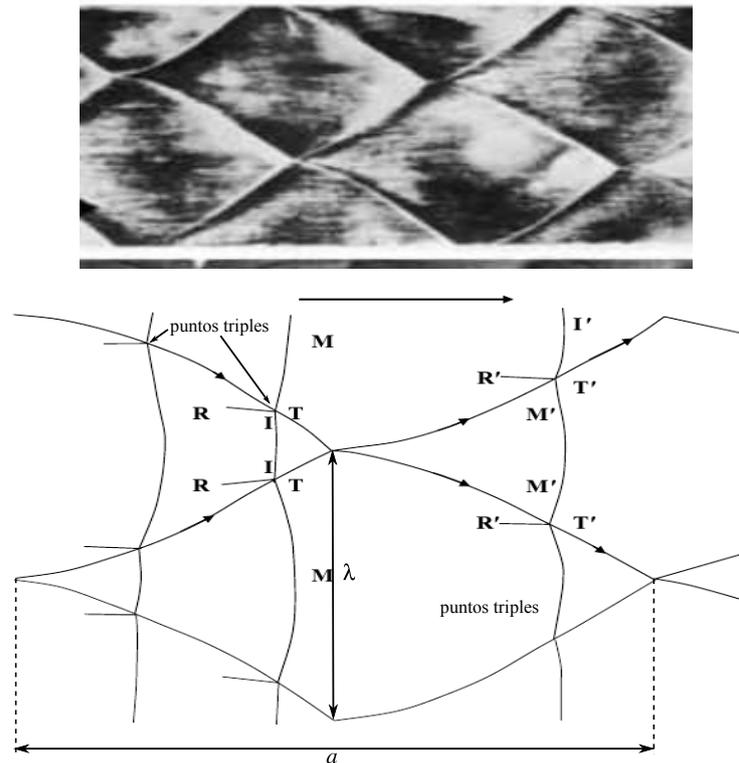


Fig. 5.7: Principales parámetros de la célula de la detonación (adaptada de [1])

En la parte superior de la Fig. 5.7 se puede observar un patrón celular de una mezcla hidrógeno-oxígeno estequiométrica diluida al 70% con argón. En la parte inferior un esquema muestra el patrón celular y la interacción entre los puntos triples que definen el contorno de la célula. En particular, se pueden apreciar dos configuraciones del tipo punto triple que se encuentran próximas a colisionar. Se observa que, dado que el choque  $TI$  tiene menor ángulo de incidencia que  $TM$  con respecto a la trayectoria del punto triple, entonces  $TI$  es el choque incidente en la configuración triple,  $TM$  la pierna de Mach y  $TR$  el choque reflejado. Luego de colisionar, los puntos triples  $T'$  se separan el uno del otro y dado que el ángulo de incidencia del choque  $T'I'$  es menor que el de  $T'M'$ , entonces,  $T'I'$  se convierte en el choque incidente mientras que  $T'M'$  toma el rol de pierna de Mach y  $T'R'$  de choque reflejado. Es importante notar que  $TM$  y  $T'I'$  son la misma onda debido a que esta no se ve afectada por la colisión y en consecuencia tienen la misma intensidad. Teniendo en cuenta que la pierna de Mach es más intensa que el choque incidente, se puede establecer la relación  $TI < TM = T'I' < T'M'$ , ésta indica que, en la transformación hacia  $T'M'$ , el choque  $TI$  aumenta su intensidad en repetidas ocasiones, dicho aumento de intensidad es particularmente fuerte en la presencia de reacciones químicas las cuales se ven favorecidas en la región aguas arriba de la pierna de Mach. En la Fig. 5.7 también se pueden observar las dimensiones características de la célula,  $\lambda$  **ancho o altura de la célula** y  $a$  **longitud de la célula**.

Es claro entonces que el proceso de formación de las células se debe a la interacción de los puntos triples durante la evolución del proceso de propagación. En general, las células dependen de diferentes factores: condiciones de la mezcla fresca, diámetro del tubo, condiciones de borde, etc [34]. Se ha demostrado que, a medida que una mezcla es más reactiva el patrón celular observado presenta dimensiones más pequeñas, debido a esto y a los grandes requerimientos computacionales para estudios numéricos han sido preferidas mezclas que describan patrones que mantengan acotado el costo computacional. Una de las más empleadas es la mezcla  $7\text{Ar} : 2\text{H}_2 : \text{O}_2$  que produce células cuyas dimensiones requieren de relativamente moderados niveles de refinamiento y tienden

a describir un patrón regular [34–37, 37–40].

A grandes rasgos el patrón celular es consecuencia de la interacción de ondas transversales con el frente de la detonación, la aparición de las ondas transversales es producto de inestabilidades, por lo que, a medida que una mezcla reactiva sea más inestable el patrón celular será más complicado [12]. Desde el punto de vista computacional los requerimientos para la simulación de patrones celulares resulta ser un factor determinante, en general se requiere de códigos que estén masivamente paralelizados e incluso contar con mallado adaptivo, esto se debe a que es necesario un mínimo de puntos por longitud de inducción química para lograr el apropiado nivel de resolución.

La no linealidad de las ecuaciones de gobierno admite la división de una detonación plana en ramales de un patrón celular. Sin embargo, en un contexto numérico una detonación plana permanecerá así a menos que tengan lugar perturbaciones que desencadenen la aparición de ondas transversales al frente. En simulaciones, el ruido numérico puede ser suficiente o no para desencadenar el proceso de división [34]. Sin embargo, esto dependerá de diferentes factores siendo uno de los más trascendentes el modelo cinético, no obstante, la producción de las perturbaciones desencadenantes pueden requerir largos tiempos de simulación. Por lo tanto, utilizar modelos cinéticos detallados puede ser contraproducente, por lo que se han propuesto diferentes maneras de introducir perturbaciones artificiales que promuevan el proceso de formación celular, dentro de estas perturbaciones se pueden mencionar:

- Porciones de mezcla sin reaccionar ubicadas en la zona adyacente al frente [35, 41]
- Perturbación *random* en la energía interna próximas al frente [39]
- Frente inicial inclinado respecto al flujo principal [42]
- Múltiples puntos de ignición con alta energía [43]
- Perturbación *random* en la densidad de la mezcla combustible sin quemar [44]

Otro factor condicionante en el modelado es la resolución espacial la cual es función de qué características del proceso se deseen o sea requerido capturar, esto será discutido cuando se introduzcan los modelos químicos.

## 5.8. Algoritmo de solución

El algoritmo de solución propuesto se basa en los esquemas centrados de Kurganov [5, 7]. La forma de discretizar los términos convectivos mediante dichos esquemas fue presentada y discutida en el Cap. 4 (Sección. 4.3.8). Por lo tanto aquí solamente se muestra el flujo numérico resultante a ser empleado para resolver las ecuaciones de Euler aplicables a flujos químicamente activos. El flujo numérico asociado a la cara  $f$  de una la celda  $V$  es computado:

$$\phi_f \Psi_f = \alpha_+ \phi_{f+} \Psi_{f+} + \alpha_- \phi_{f-} \Psi_{f-} + \omega_f (\Psi_{f-} - \Psi_{f+}) \quad (5.38)$$

donde  $\phi$  denota el flujo volumétrico ( $\phi_f = \mathbf{S} \cdot \mathbf{U}_f$ ),  $\Psi_f$  el valor de la variable transportada en la cara ( $f$ ),  $\alpha$  el factor de ponderación y  $\omega$  el flujo volumétrico que interviene en la discretización de cualquier término convectivo que haga parte de una derivada substancial. Los signos indican que los flujos son evaluados en las direcciones saliente y entrante a la cara. Así, el primer término

del lado derecho corresponde al flujo en la dirección  $+$  y el segundo al flujo en la dirección  $-$ . El tercer término, como se ha mencionado, sólo se incluye cuando el término convectivo a discretizar forma parte de una derivada sustancial, este flujo volumétrico  $\omega_f$  se basa en la máxima velocidad de propagación de alguna discontinuidad que puede existir en la cara y se encuentra en el intervalo de los valores interpolados en  $f^-$  y  $f^+$ . Las ecuaciones a considerar son:

- Sistema de  $N$  *stiff* ODEs por celda computacional asociado al modelo cinético.
- Ecuación de continuidad global.
- Una ecuación de momento por cada dimensión considerada.
- Ecuación de la energía y ecuación que relaciona a la energía con la temperatura media  $T$ .
- $N - 1$  ecuaciones de conservación de las especies con sus respectivos términos fuentes.
- Ecuaciones de estado de la mezcla reactiva.

El algoritmo de solución diseñado se resume a continuación:

---

#### Algoritmo 1 rhoCentralRF

---

```

1: Procedimiento:
2:   Lea las Condiciones de borde e iniciales de T, p, U y Yi
3:   Ensamble y resuelva las ODEs asociadas al modelo cinético
4:   Calcule las propiedades termofísicas.
5:   Calcule los términos fuentes
6:   Calcule los parámetros necesarios para computar los flujos  $c_f, phi, \phi_{f\pm}$ , etc.
7:   Ensamble y resuelva rhoEqn.H
8:   Ensamble y resuelva UEqn.H
9:   Ensamble y resuelva Eeqn.H
10:  for i=0;i<Y.size();i++
11:  {
12:  Ensamble y resuelva YEqn.N
13:  }
14:  Calcule  $Y_N = 1 - \sum Y_i$ 
15:  Calcule p

```

---

El pseudo código presentado en Algoritmo.1 resume el algoritmo de cómputo utilizado, el cual sigue los lineamientos de programación sugeridos por openFoam™. En consecuencia y en cuanto sea posible, cada ecuación se incluye en un archivo de cabecera (*header*) y luego desde el código principal (*rhoCentralRF*) se ensambla el procedimiento de solución en la forma mostrada. Primero se resuelve el sistema asociado a la química lo que implica la solución de un sistema de  $N$  ODEs generado a partir de una matriz estequiométrica con dimensiones  $N \times M$ . Una vez conseguidas las velocidades de reacción se actualizan las propiedades termofísicas, se determinan los términos fuentes de las ecuaciones de las especies y la energía. A continuación se resuelve la ecuación de continuidad global y con la densidad obtenida se computan los flujos numéricos. Posteriormente se resuelven las ecuaciones de momento, seguida de la de energía total de forma que una vez que se ha conseguido  $E$  se determina la entalpía sensible con el fin de computar la temperatura a partir de la Ec. 5.18.

Finalmente, se resuelven  $N - 1$  ecuaciones de convección para las especies y la enésima especie se determina restando la suma de las fracciones másicas de las especies restantes a la unidad. A medida que se resuelven cada una de las ecuaciones tienen lugar pasos intermedios, por ejemplo, la actualización de los valores en el contorno, lo cual se lleva a cabo luego de resolver el campo asociado a cada ecuación.

El algoritmo desarrollado permite seleccionar en tiempo de corrida a: el esquema de avance temporal, los procedimientos de reconstrucción y el esquema para los términos convectivos entre el de Kurganov & Tadmor y el de Kurganov-Noelle-Petrova (Sección.4.3.8).

## 5.9. Condiciones de borde e iniciales

En este capítulo se desarrollan simulaciones considerando dominios que asemejan a un tubo de choque, esto consiste en un conducto que bien puede estar cerrado en sus dos extremos o abierto en uno de ellos. De acuerdo a la simulación a desarrollar deberán seleccionarse las condiciones de borde que mejor representen al problema en cuestión.

Para los casos simulados basta con considerar dos tipos de condiciones de borde:

1. Pared impermeable
2. Inlet/Outlet

En lo que respecta a la pared impermeable esta corresponde a la conocida condición de deslizamiento, la cual en general implica:

$$\mathbf{U} \cdot \mathbf{n} = 0 \quad (5.39)$$

es decir, la componente normal de velocidad deberá ser nula. En el caso unidimensional esto se reduce a imponer velocidad nula sobre el contorno. La simulación de flujos supersónicos reactivos requiere un tratamiento apropiado de las condiciones de tipo *inlet* y *outlet*. Para una salida supersónica ( $M > 1$ ) todas las ondas viajan hacia el exterior del dominio y en consecuencia no se debe imponer el valor de ninguna variable. En la práctica en este tipo de contornos se utilizan condiciones de borde del tipo von Neumann (Cap. 2):

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{n}} = 0 \quad (5.40)$$

Por otro lado, cuando se imponen condiciones de borde en un *inlet*, en el que el flujo impuesto es supersónico, se debe proporcionar un valor a todas las variables que ingresan al dominio computacional.

En lo que respecta a las condiciones iniciales, éstas se imponen sobre los centroides de las celdas que se ven afectadas por dicha condición, por ejemplo, para un conducto lleno con una mezcla reactiva, los vectores que representa a cada especie se encontrarán llenos en  $t = 0$  con los valores correspondientes a la respectiva fracción de masa inicial de cada especie que intervenga en la mezcla.

## 5.10. Términos fuentes debidos a la actividad química: modelos cinéticos

Los términos fuentes ( $\dot{\omega}_k$ ) y ( $\dot{\omega}_T$ ) de las ecuaciones de las especies y energía respectivamente requieren conocer las velocidades de reacción de las especies. Para la especie  $k$ , la tasa o velocidad de consumo/formación por una reacción  $i$  se puede escribir:

$$\dot{\omega}_{k,i} = W_k \dot{C}_{k,i} \quad (5.41)$$

donde  $W_k$  es la masa molecular de la especie  $k$  y  $\dot{C}_k$  su velocidad de reacción. El calor liberado por la combustión ( $\dot{\omega}_T$ ) en la ecuación de la energía (Ec. 3.34) puede ser determinado a partir de

$$\dot{\omega}_T = \sum_{k=1}^N \Delta h_{f,k}^{\circ} \dot{\omega}_k \quad (5.42)$$

donde  $\Delta h_{f,k}^{\circ}$  es el calor de formación de la especie  $k$ . Vale la pena recordar que en la ecuación de la energía  $\dot{\omega}_T$  debe expresarse en  $J m^{-3} s^{-1}$ .

Para obtener ambos términos ( $\dot{\omega}_{k,i}$ ) y ( $\dot{\omega}_T$ ) es necesario conocer las velocidades de reacción de los reactantes y los productos. Esto implica resolver un sistema de  $N$  ODEs que está asociado a una matriz estequiométrica con dimensiones  $N \times M$ , donde las filas representan a las especies y las columnas a las reacciones involucradas.

La forma de evaluar las velocidades de reacción se explica en detalle en Sección.3.4.2 y por lo tanto no se considera necesario repetirlo aquí, no obstante, es importante recordar que nuevamente se utiliza el método SIBS [11] para obtener las velocidades de reacción. Las constantes de reacción se determinan mediante la formula de Arrhenius:

$$k_A = AT^n \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) \quad (5.43)$$

$$AT^n \exp\left(-\frac{T_a}{T}\right)$$

La tasa o velocidad de reacción de la especie  $k$  por la reacción  $i$  está dada por

$$\dot{\omega}_{k,i}/W_k = \dot{C}_{k,i} = \left(\frac{dC_k}{dt}\right)_i = \left(\sum_{k=1}^N \epsilon_{ji}[C_J]\right) (\nu''_{ki} - \nu'_{ki}) \left[ k_i^f \prod_{k=1}^N (C_k)^{\nu'_{ki}} - k_i^b \prod_{k=1}^N (C_k)^{\nu''_{ki}} \right] \quad (5.44)$$

Nótese que a diferencia de la expresión introducida en el Cap. 3 (Ec. 3.63), aquí se incluyen las **eficiencias del tercer cuerpo**  $\epsilon_{ji}$  de la especie  $j$  para la reacción  $i$

### 5.10.1. Modelos de Jachimowski para la combustión Hidrógeno-Aire

A continuación se presentan dos de los modelos cinéticos utilizados en las simulaciones efectuadas en este capítulo. Son dos modelos para la cinética química de la combustión hidrógeno aire elaborados por Jachimowski, consideran 13 especies y 33 reacciones elementales. Las diferencias entre ambos se presentan en algunas de las reacciones y en los parámetros de Arrhenius utilizados para determinar las constantes de avance y retroceso [45, 46]. Además, existen diferencias entre las especies consideradas como tercer cuerpo y sus respectivas eficiencias.

Especies: N<sub>2</sub> H H<sub>2</sub> H<sub>2</sub>O H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> HNO HO<sub>2</sub> N NO NO<sub>2</sub> O O<sub>2</sub> OH

Las reacciones definidas por el modelo de 1988 (con sus respectivos parámetros de Arrhenius) están listadas en la Tab. 5.5.

Reac.	A	n	Ea
(1) $\text{H}_2 + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{OH} + \text{OH}$	1.7e13	0.0	48000
(2) $\text{H} + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{OH} + \text{O}$	2.6E+14	0.0	16800
(3) $\text{O} + \text{H}_2 \rightleftharpoons \text{OH} + \text{H}$	1.8E+10	1.0	8900.0
(4) $\text{OH} + \text{H}_2 \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O} + \text{H}$	2.2E+13	0.0	5150.0
(5) $\text{OH} + \text{OH} \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O} + \text{O}$	6.3E+12	0.0	1090.0
(6) $\text{H} + \text{OH} + \text{M} \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O} + \text{M}$	2.2E+22	-2.0	0.0000
(7) $\text{H} + \text{H} + \text{M} \rightleftharpoons \text{H}_2 + \text{M}$	6.4E+17	-1.0	0.0000
(8) $\text{H} + \text{O} + \text{M} \rightleftharpoons \text{OH} + \text{M}$	6.0E+16	-0.6	0.0000
(9) $\text{H} + \text{O}_2 + \text{M} \rightleftharpoons \text{HO}_2 + \text{M}$	2.10E+15	0.0	-1000.0
(10) $\text{HO}_2 + \text{H} \rightleftharpoons \text{H}_2 + \text{O}_2$	1.30E+13	0.0	0.0000
(11) $\text{HO}_2 + \text{H} \rightleftharpoons \text{OH} + \text{OH}$	1.40E+14	0.0	1080.0
(12) $\text{HO}_2 + \text{H} \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O} + \text{O}$	1.00E+13	0.0	1080.0
(13) $\text{HO}_2 + \text{O} \rightleftharpoons \text{O}_2 + \text{OH}$	1.5E+13	0.0	950.00
(14) $\text{HO}_2 + \text{OH} \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O} + \text{O}_2$	8.0E+12	0.0	0.0000
(15) $\text{HO}_2 + \text{HO}_2 \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O}_2 + \text{O}_2$	2.0E+12	0.0	0.0000
(16) $\text{H} + \text{H}_2\text{O}_2 \rightleftharpoons \text{H}_2 + \text{HO}_2$	1.4E+12	0.0	3600.0
(17) $\text{O} + \text{H}_2\text{O}_2 \rightleftharpoons \text{OH} + \text{HO}_2$	1.4E+13	0.0	6400.0
(18) $\text{OH} + \text{H}_2\text{O}_2 \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O} + \text{HO}_2$	6.1+E12	0.0	1430.0
(19) $\text{H}_2\text{O}_2 + \text{M} \rightleftharpoons \text{OH} + \text{OH} + \text{M}$	1.2E+17	0.0	45500
(20) $\text{O} + \text{O} + \text{M} \rightleftharpoons \text{O}_2 + \text{M}$	6.0e+17	0.0	-1800.0
(21) $\text{N} + \text{N} + \text{M} \rightleftharpoons \text{N}_2 + \text{M}$	2.8E+17	-0.75	0.0000
(22) $\text{N} + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{NO} + \text{O}$	6.4E+9	1.0	6300.0
(23) $\text{N} + \text{NO} \rightleftharpoons \text{N}_2 + \text{O}$	1.6E+13	0.0	0.0000
(24) $\text{N} + \text{OH} \rightleftharpoons \text{NO} + \text{H}$	6.3E+11	0.5	0.0000
(25) $\text{H} + \text{NO} + \text{M} \rightleftharpoons \text{HNO} + \text{M}$	5.4E+15	0.0	-600.00
(26) $\text{H} + \text{HNO} \rightleftharpoons \text{NO} + \text{H}_2$	4.8E+12	0.0	0.0000
(27) $\text{O} + \text{HNO} \rightleftharpoons \text{NO} + \text{OH}$	5.0E+11	0.5	0.0000
(28) $\text{OH} + \text{HNO} \rightleftharpoons \text{NO} + \text{H}_2\text{O}$	3.6E+13	0.0	0.0000
(29) $\text{HO}_2 + \text{HNO} \rightleftharpoons \text{NO} + \text{H}_2\text{O}_2$	2.0E+12	0.0	0.0000
(30) $\text{HO}_2 + \text{NO} \rightleftharpoons \text{NO}_2 + \text{OH}$	3.4E+12	0.0	-260.00
(31) $\text{H} + \text{NO}_2 \rightleftharpoons \text{NO} + \text{OH}$	3.5E+14	0.0	1500.0
(32) $\text{O} + \text{NO}_2 \rightleftharpoons \text{NO} + \text{O}_2$	1.0E+13	0.0	600.00
(33) $\text{NO}_2 + \text{M} \rightleftharpoons \text{NO} + \text{O} + \text{M}$	1.16E+16	0.0	66000

Tabla 5.4: Modelo cinético hidrógeno-aire (Jachimowski 1988, unidades: segundos, moles,  $\text{cm}^3$ , calorías y  $K$ )

Las correspondientes eficiencias de tercer cuerpo para el modelo de Jachimowski de 1988 (Tab. 5.4) relativas a  $\text{N}_2 = 1$  son:  $R_6(\text{H}_2\text{O})$  6.0,  $R_7(\text{H}_2)$  2.0,  $R_7(\text{H}_2\text{O})$  6.0,  $R_8(\text{H}_2\text{O})$  5.0,  $R_9(\text{H}_2)$  2.0,  $R_9(\text{H}_2\text{O})$  16.0 y  $R_{19}(\text{H}_2\text{O})$  15.0. En la Tab. 5.5 se listan las reacciones del modelo de 1992 con sus respectivos parámetros.

Reac.	A	N	Ea
(1) H <sub>2</sub> + O <sub>2</sub> ⇌ HO <sub>2</sub> + H	7.0e13	0.0	56800.0
(2) H + O <sub>2</sub> ⇌ OH + O	2.20E+14	0.0	16800.0
(3) O + H <sub>2</sub> ⇌ OH + H	5.06E+4	2.67	6290.0
(4) OH + H <sub>2</sub> ⇌ H <sub>2</sub> O + H	2.16e+8	1.51	3430.0
(5) OH + OH ⇌ H <sub>2</sub> O + O	1.50E+9	1.14	0.0000
(6) H + OH + M ⇌ H <sub>2</sub> O + M	8.62E+21	-2.0	0.0000
(7) H + H + M ⇌ H <sub>2</sub> + M	7.3E+17	-1.0	0.0000
(8) H + O + M ⇌ OH + M	2.6E+16	-0.6	0.0000
(9) O + O + M ⇌ O <sub>2</sub> + M	1.10E+17	-1.0	0.0000
(10) H + O <sub>2</sub> + M ⇌ HO <sub>2</sub> + M	2.30E+18	-1.0	0.0000
(11) HO <sub>2</sub> + H ⇌ OH + OH	1.50E+14	0.0	1000.0
(12) HO <sub>2</sub> + O ⇌ O <sub>2</sub> + OH	2.00E+13	0.0	0.0000
(13) HO <sub>2</sub> + OH ⇌ H <sub>2</sub> O + O <sub>2</sub>	2.0E+13	0.0	0.0000
(14) HO <sub>2</sub> + HO <sub>2</sub> ⇌ H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> + O <sub>2</sub>	2.0E+12	0.0	0.0000
(15) H + H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> ⇌ H <sub>2</sub> + HO <sub>2</sub>	1.7E+12	0.0	3780.0
(16) H + H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> ⇌ OH + H <sub>2</sub> O	1.0E+13	0.0	3580.0
(17) O + H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> ⇌ OH + HO <sub>2</sub>	2.8E+13	0.0	6400.0
(18) OH + H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> ⇌ H <sub>2</sub> O + HO <sub>2</sub>	7.0E+12	0.0	1435.0
(19) OH + OH + M ⇌ H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> + M	1.6E+22	-2.0	0.0000
(20) N + N + M ⇌ N <sub>2</sub> + M	2.8e+17	-0.8	0.0000
(21) N + O <sub>2</sub> ⇌ NO + O	6.4E+9	1.0	6300.0
(22) N + NO ⇌ N <sub>2</sub> + O	1.6E+13	0.0	0.0000
(23) N + OH ⇌ NO + H	6.3E+11	0.5	0.0000
(24) H + NO + M ⇌ HNO + M	5.4E+15	0.0	-600.0
(25) H + HNO ⇌ NO + H <sub>2</sub>	4.8E+12	0.0	0.0000
(26) O + HNO ⇌ NO + OH	5.0E+11	0.5	0.0000
(27) OH + HNO ⇌ NO + H <sub>2</sub> O	3.6E+13	0.0	0.0000
(28) HO <sub>2</sub> + HNO ⇌ NO + H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	2.0E+12	0.0	0.0000
(29) HO <sub>2</sub> + NO ⇌ NO <sub>2</sub> + OH	3.4E+12	0.0	-260.0
(30) HO <sub>2</sub> + NO ⇌ HNO + O <sub>2</sub>	2.0E+11	0.0	1000.0
(31) H + NO <sub>2</sub> ⇌ NO + OH	3.5E+14	0.0	1500.0
(32) O + NO <sub>2</sub> ⇌ NO + O <sub>2</sub>	1.0E+13	0.0	600.0
(33) NO <sub>2</sub> + M ⇌ NO + O + M	1.16E+16	0.0	66000

Tabla 5.5: Modelo cinético hidrógeno-aire (Jachimowski 1992, unidades: segundos, moles,  $cm^3$ , calorías y  $K$ )

Las eficiencias de los terceros cuerpos para las reacciones 6, 7, 8, 9, 10, 19, 20 y 24 del modelo de Jachimowski de 1992 son: (H<sub>2</sub>O) 16.0 y (H<sub>2</sub>) 2.5

### 5.10.2. Modelo cinético de Marinov 1996 para la combustión $H_2 : O_2 : Ar$

El modelo de Marinov de 1996 propone el uso de únicamente 10 especies y 25 reacciones [47]:

Especies:  $H_2$   $H$   $O_2$   $O$   $OH$   $HO_2$   $H_2O_2$   $H_2O$   $Ar$   $N_2$

En la Tab. 5.6 se listan las reacciones del modelo (con sus correspondientes parámetros para la ecuación de Arrhenius).

Reac.	A	N	Ea
(1) $OH + H_2 \rightleftharpoons H + H_2O$	2.14E+08	1.52	3449.0
(2) $O + OH \rightleftharpoons O_2 + H$	2.02E+14	-0.4	0.0
(3) $O + H_2 \rightleftharpoons OH + H$	5.06E+04	2.67	6290.0
(4) $H + O_2(+M) \rightleftharpoons HO_2(+M)$	4.52E+13	0.0	0.0
(4) $H + O_2(+N_2) \rightleftharpoons HO_2(+N_2)$	4.52E+13	0.0	0.0
(6) $H + O_2(+H_2) \rightleftharpoons HO_2(+H_2)$	4.52E+13	0.0	0.0
(7) $H + O_2(+H_2O) \rightleftharpoons HO_2(+H_2O)$	4.52E+13	0.0	0.0
(8) $OH + HO_2 \rightleftharpoons H_2O + O_2$	2.13E+28	-4.827	3500.0
(8b) $OH + HO_2 \rightleftharpoons H_2O + O_2$	9.10E+14	0.0	10964.0
(9) $H + HO_2 \rightleftharpoons OH + OH$	1.50E+14	0.0	1000.0
(10) $H + HO_2 \rightleftharpoons H_2 + O_2$	8.45E+11	0.65	1241.0
(11) $H + HO_2 \rightleftharpoons O + H_2O$	3.01E+13	0.0	1721.0
(12) $O + HO_2 \rightleftharpoons O_2 + OH$	3.25E+13	0.0	0.0
(13) $OH + OH \rightleftharpoons O + H_2O$	3.57E+04	2.4	-2112.0
(14) $H + H + M \rightleftharpoons H_2 + M$	1.00E+18	-1.0	0.0
(15) $H + H + H_2 \rightleftharpoons H_2 + H_2$	9.20E+16	-0.6	0.0
(16) $H + H + H_2O \rightleftharpoons H_2 + H_2O$	6.00E+19	-1.25	0.0
(17) $H + OH + M \rightleftharpoons H_2O + M$	2.21E+22	-2.0	0.0
(18) $H + O + M \rightleftharpoons OH + M$	4.71E+18	-1.0	0.0
(19) $O + O + M \rightleftharpoons O_2 + M$	1.89E+13	0.0	-1788.0
(20) $HO_2 + HO_2 \rightleftharpoons H_2O_2 + O_2$	4.20E+14	0.0	11982.0
DUP (20a) $HO_2 + HO_2 \rightleftharpoons H_2O_2 + O_2$	1.30E+11	0.0	-1629.0
DUP (21) $OH + OH(+M) \rightleftharpoons H_2O_2(+M)$	1.24E+14	-0.37	0.0
(22) $H_2O_2 + H \rightleftharpoons HO_2 + H_2$	1.98E+06	2.0	2435.0
(23) $H_2O_2 + H \rightleftharpoons OH + H_2O$	3.07E+13	0.0	4217.0
(24) $H_2O_2 + O \rightleftharpoons OH + HO_2$	9.55E+06	2.0	3970.0
(25) $H_2O_2 + OH \rightleftharpoons H_2O + HO_2$	2.40E+00	4.042	-2162.0

Tabla 5.6: Modelo cinético  $H_2/O_2/Ar/$  (Marinov 1996, unidades: segundos, moles,  $cm^3$ , calorías y  $K$ )

Para este modelo, las eficiencias de tercer cuerpo son:  $R(17, 18)$   $[H_2O]$  6.4. Además es de destacar que este modelo incluye reacciones dependientes de la presión, por ejemplo  $R(21)$ .

### 5.10.3. Verificación de los modelos químicos

En la simulación numérica de las detonaciones, el tiempo de inducción químico guarda una intrínseca relación con la cantidad de celdas necesarias en la malla computacional para describir correctamente las propiedades físicas y termoquímicas que caracterizan el flujo detonante. Por otra parte, es usual desarrollar verificaciones del modelo químico sin resolver por completo el sistema fluido-dinámico, para lo cual se consideran dos procesos evolutivos típicos, el de volumen constante o el de presión constante. En fenómenos de combustión es común considerar el de volumen constante, aunque esta hipótesis puede parecer cuestionable en análisis de procesos detonantes. No obstante, resulta de utilidad en cuanto concierne a la verificación del modelo químico.

Analizar un proceso reactivo como aquí se propone, permite determinar el tiempo de inducción, este tiempo, de ahora en más designado por  $\tau_i$ , suele definirse como el tiempo necesario para que se genere suficiente concentración de radicales que den inicio a las cadenas reactivas, que continúan con las de propagación, ramificación y terminan en el proceso exotérmico. Las simulaciones de los procesos químicos con el *solver* chemFoam han sido realizadas utilizando los tres modelos descritos en las Sección.5.10.1 y Sección.5.10.2, es decir, Jachimowski (1988 y 1992) y Marinov (1996), y aplicados a la combustión  $H_2$  : Aire ( $\phi = 2.0$ ). Típicos resultados se muestran en la Fig. 5.8

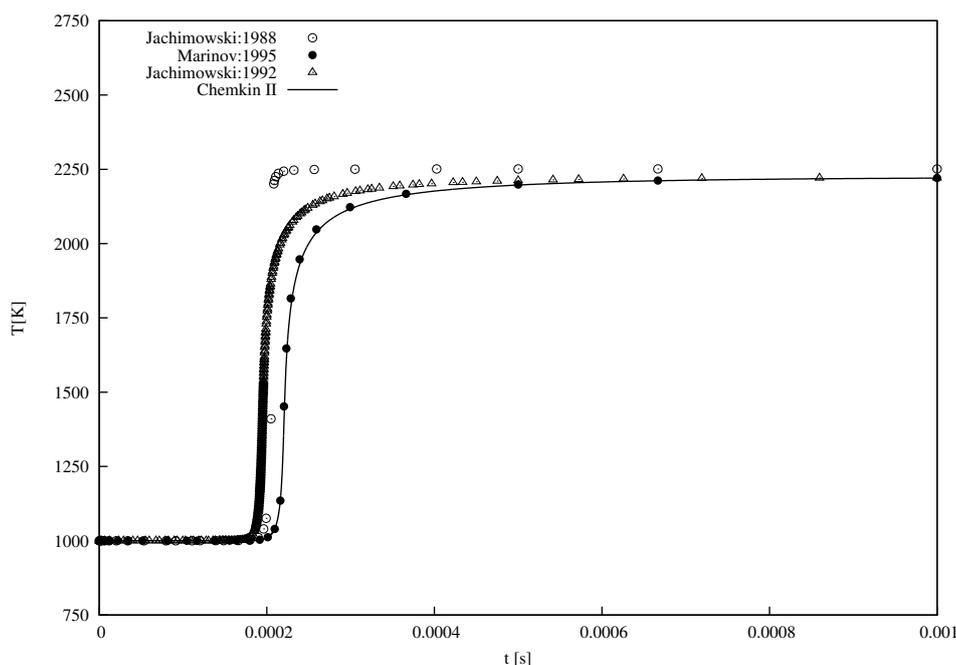


Fig. 5.8: Verificación de los modelos químicos: Perfil de temperatura para la mezcla  $H_2$ -Aire ( $\phi = 2$ )

En la figura Fig. 5.8, también se incluye el perfil provisto por la solución de referencia del código CHEMKIN [48]. Es de hacer notar que el modelo de Marinov es el que mejor se ajusta a los valores de la referencia, además, de ser el más conveniente desde el punto de vista computacional al involucrar menos especies y reacciones.

Por practicidad, los tiempos de inducción  $\tau_i$  han sido aproximados con leyes basadas en criterios empíricos descriptivos del proceso y así prescindir del análisis cinético. En ciertos casos, se asocia el tiempo de inducción con un porcentaje pre-establecido (p.ej, 5 %) de incremento respecto

del valor inicial y en otros, con el punto de inflexión de la temperatura cuando se incrementa desde su valor inicial hasta el de equilibrio. También se han fijado criterios basados en cambios de la presión inducidos por el proceso de volumen constante supuesto. El tiempo para que la especie OH alcance un valor máximo ha sido, con frecuencia, interpretado como un tiempo de inducción, habida cuenta de que la condición de equilibrio presupone una disminución de la concentración de OH.

Entre los datos experimentales, son particularmente notables los obtenidos con tubos de choque (*shock tubes*), y presentados en la Fig. 5.9. Estos datos fueron obtenidos con mezclas reactivas  $H_2 : O_2 : Ar : N_2$  (es común considerar a las especies Ar y  $N_2$  como diluentes inertes  $0\% < Ar/N_2 < 100\%$ ), el intervalo de temperatura abarca los valores  $700K < T < 2700K$ , el de presión  $0.015Mpa < p < 8.7Mpa$ , y la relación de equivalencia cubre el rango  $0.06 < \phi < 9.0$ .

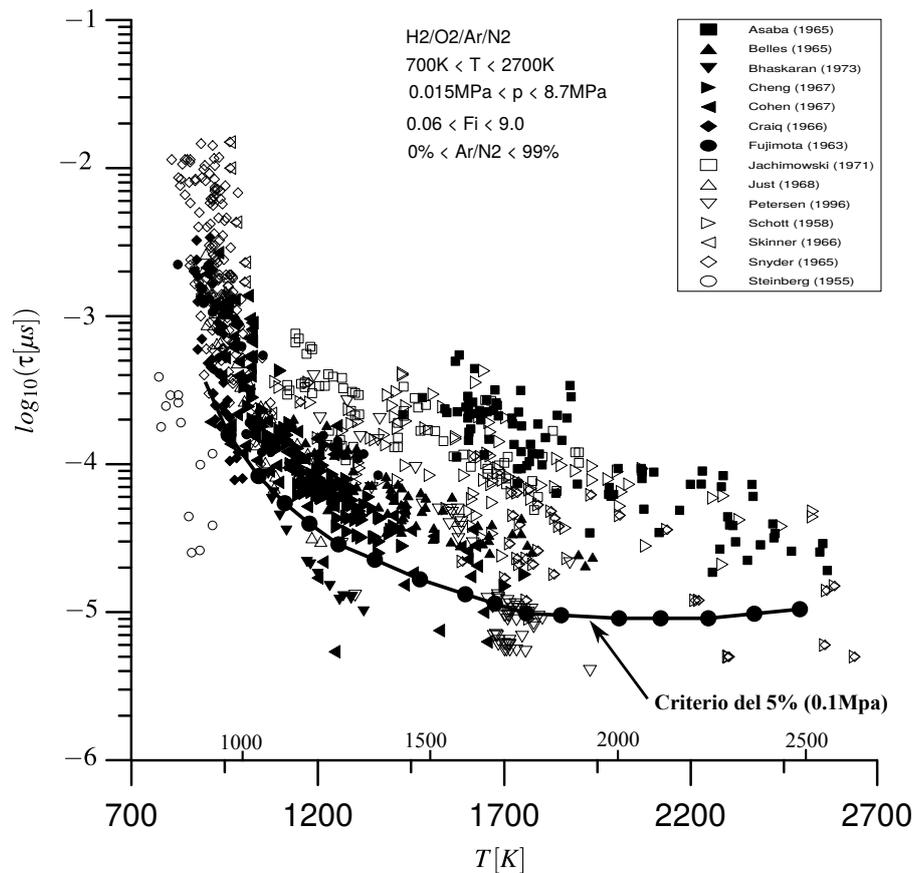


Fig. 5.9: Tiempos de inducción para la oxidación del hidrógeno en función de la temperatura: Experimentos en tubos de choque y ajuste del criterio 5 % (figura adaptada de [49])

En la Fig. 5.10 valores del tiempo de inducción  $\tau_i$  evaluados con base en el incremento del 5 % sobre la temperatura inicial de la mezcla estequiométrica  $2H_2 : O_2 : 7Ar$ , se comparan con datos provistos por las referencias [50, 51]. Se puede afirmar que los tiempos de inducción obtenidos mediante el criterio establecido para el incremento de la temperatura concuerdan satisfactoriamente con los datos de referencia al menos para valores iniciales de  $T \leq 1300 K$  y  $p = 131729 Pa$ . Dada dicha coincidencia, se puede aceptar que los valores  $\tau_i$  a obtenerse con temperaturas iniciales más altas también resultarían apropiados, por lo tanto, se incluyen en la Fig. 5.10 valores de  $\tau_i$  para temperaturas  $1300 K \leq T \leq 2500 K$ . Además se han añadido en la Fig. 5.10 tiempos de inducción relacionados con el valor máximo de OH. Aunque su propósito es más referencial que útil, también se incluyen los tiempos necesarios para alcanzar el 95 % de la temperatura de equilibrio

térmico. Cuando se supera este valor cualquiera sea el criterio adoptado, este no será cuestionable sino inválido.

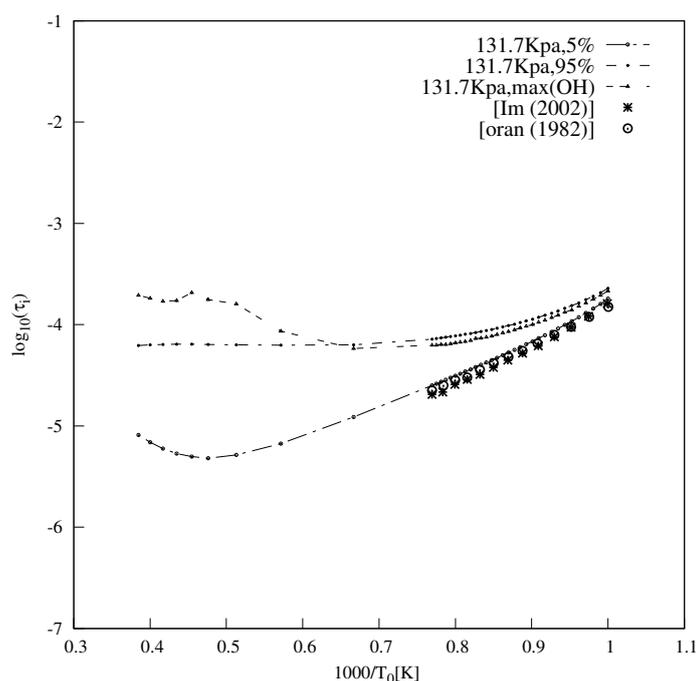


Fig. 5.10: Tiempos de inducción vs. temperatura inicial ( $2\text{H}_2 : \text{O}_2 : 7\text{Ar}$ ,  $p_0 = 131.7 \text{ kPa}$ ,  $\phi = 1.0$ )

Diferentes estudios se han realizado para determinar la cantidad mínima de puntos, Sharpe (2001) recomienda 20 puntos por longitud de inducción. Hu (2004) indica que la mínima cantidad de puntos por longitud de inducción debe estar entre 8-64. Por su parte Sharpe y Quirk (2008) recomiendan 32 puntos por longitud media de reacción. Deiterding (2003) encuentra que para capturar especies intermedias se requieren como mínimo 5 puntos por longitud de inducción [38, 39, 52–56]. En general no existe una regla para definir la cantidad de puntos necesaria, por lo que aquí se adopta considerar valores que se encuentren acorde con los recomendados en estudios previos.

## 5.11. Casos de validación y verificación

Con la finalidad de validar el *solver* rhoCentralRF se simulan a continuación diferentes casos de prueba. Estos casos cuentan ya sea con soluciones analíticas, datos experimentales y/o soluciones numéricas de referencia.

### 5.11.1. Tubo de choque con dos especies no reactivas

Debido a que se consideran flujos con diferentes especies, como primer caso de prueba se propone resolver el tubo de choque considerando dos especies con las mismas propiedades termodinámicas, pero etiquetadas de forma diferente. Esto hará que el código interprete al problema

como un flujo en el que intervienen dos especies pero cuya solución será totalmente equivalente a la exacta del tubo de choque con una especie. Para este caso se selecciona como gas de trabajo al nitrógeno y la geometría del dominio que se puede apreciar en la Fig. 5.11. En dicha figura se observa la nomenclatura que se utilizará cada vez que se resuelva un caso que presente geometría similar. Vale la pena recordar que debido a que openFoam™ requiere del uso de mallas definidas con geometrías tridimensionales, aquí sobre los contornos Back, Front, Tside y Bside se aplica la condición *empty* definida en el Cap. 2.



Fig. 5.11: Dominio de cálculo tubo de choque

En este caso sobre los contornos laterales, se aplican para todas las variables condiciones de borde del tipo de interpolación desde el interior del dominio hacia el contorno. El avance temporal se lleva a cabo utilizando el esquema de Euler y como función limitadora en todos los casos se aplica la de van Leer. El diafragma se encuentra ubicado en la mitad del dominio y las condiciones iniciales están dadas en la Tab. 5.7.

Var.	Driver	Driven
$p$	2MPa	0.1MPa
$T$	2500K	300K
$U$	(0, 0, 0)	(0, 0, 0)
$N_2$	1.0	0.0
$N_2^2$	0.0	1.0

Tabla 5.7: Condiciones iniciales: caso  $N_2 - N_2^2$

El caso se corre utilizando 1000 celdas imponiendo un número de Courant de 0.1 y los resultados que se obtienen para  $t = 2\text{ms}$  se presentan en la Fig. 5.12 se observa que las distribuciones obtenidas a partir de la simulación numérica muestran una muy buena aproximación a la solución analítica.

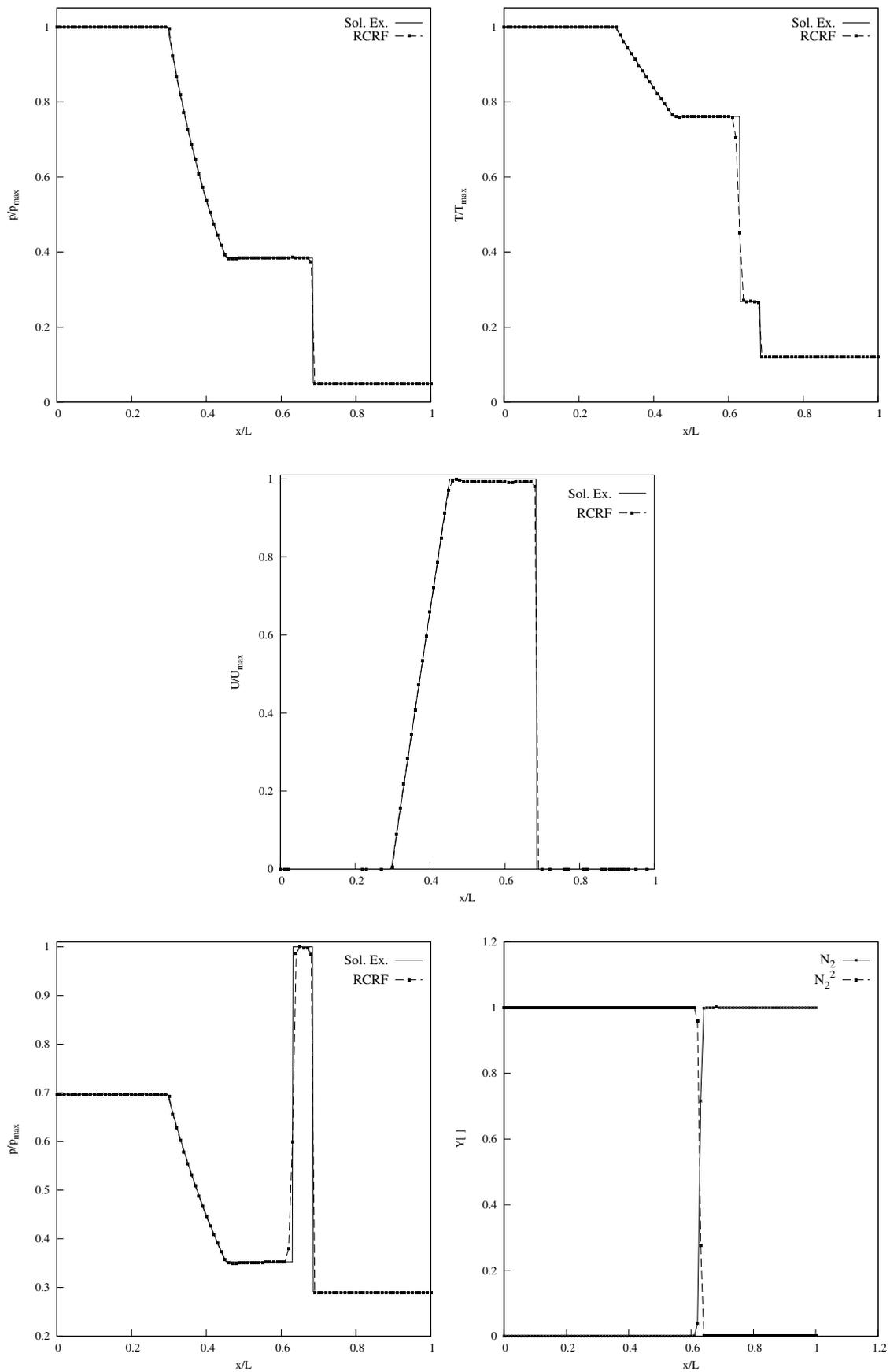


Fig. 5.12: Distribuciones de presión, temperatura, velocidad, densidad, velocidad del sonido y fracciones másicas: tubo de choque con dos especies no reactivas

### 5.11.2. Detonación plana unidimensional hidrógeno-aire (mezcla estequiométrica)

En la Sección.5.10.3 se verificaron numéricamente los funcionamientos de los modelos químicos de Jachimowski y Marinov, y se constató que los términos fuentes de las ecuaciones de las especies (Ec. 5.11), y también la de la energía (Ec. 5.19), son evaluados correctamente. En la Sección.5.11.1 se verificó el funcionamiento de los esquemas fluidodinámicos sin considerar efectos químicos. Continuando con las verificaciones, se propone como primer caso de prueba, evaluar la calidad de la simulación de una detonación plana comparando los resultados obtenidos con el ejecutable construido (`rhoCentralRF`), con los proporcionados por el código `Flow-Two` [57]. La geometría del dominio computacional seleccionado para la comparación, guarda similitud con la que se muestra en Fig. 5.11. Su longitud total es de  $0.5\text{ m}$  y el denominado *Driver* se ubica a la izquierda del conducto cuya longitud ocupa el 1 % del total (Fig. 5.13). La composición y propiedades del gas contenido en el *Driver* y en el resto del tubo (denominado *Driven*) se presentan en Tab. 5.8. La mezcla reactiva es  $\text{H}_2$  : aire en proporciones estequiométricas y el gas del *Driver* es 100 % helio a altas temperatura y presión. Con estos valores sería factible crear una onda de choque suficientemente fuerte como para inducir el inicio de la detonación en la mezcla combustible.

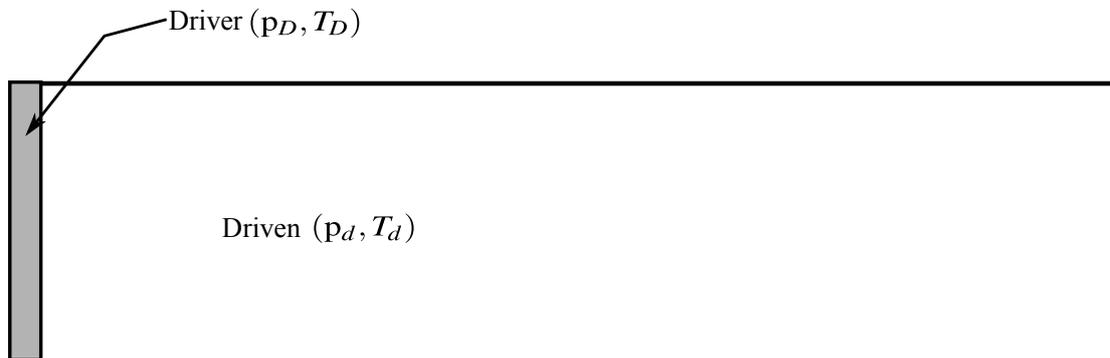


Fig. 5.13: Dominio de cálculo y configuración inicial: detonación plana

Var.	Driver	Driven
$p$	2MPa	0.02Mpa
$T$	3000.0	300
$U$	(0, 0, 0)	(0, 0, 0)
$N_2$	0.0	0.7452
$H_2$	0.0	0.0283
$H_e$	1.0	0.0
$O_2$	0.0	0.2265

Tabla 5.8: Condiciones iniciales: caso  $\text{H}_2$  - aire ( $\phi = 1.0$ )

Las simulaciones se desarrollan considerando una malla con 1000 celdas ( $0.5\text{ mm}$  por celda), el avance temporal se lleva a cabo empleando el esquema de Euler, las reconstrucciones involucradas en la evaluación de los términos convectivos se llevan a cabo utilizando la función limitadora de van Leer. El número de Courant máximo impuesto es 0.25. Se realizan 3 simulaciones, una por cada modelo químico. (Sección.5.10.1 y Sección.5.10.2)

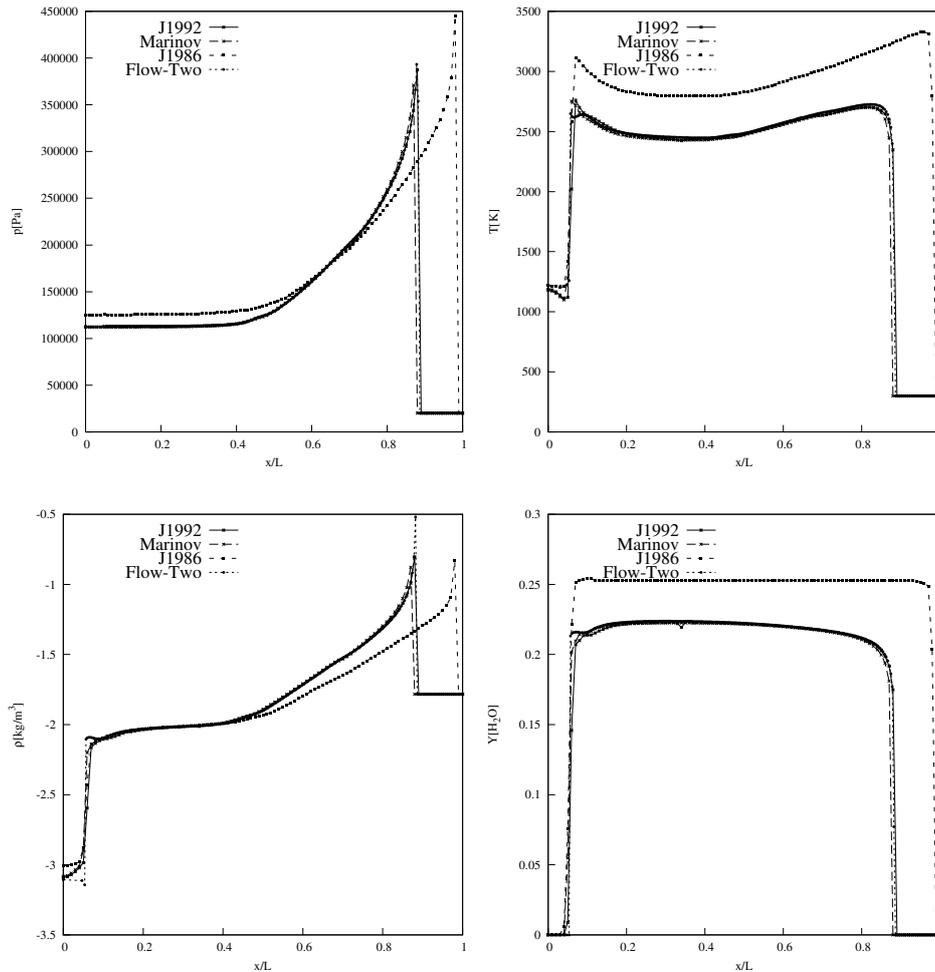


Fig. 5.14: Distribuciones de  $p$ ,  $T$ ,  $\log_{10}(\rho)$ ,  $Y [H_2O]$  modelos químicos: Jachimowski 1988-1992 y Marinov 1996 ( $t = 228.4\mu s$ ) (detonación plana  $H_2$  – aire)

Las simulaciones llevan en promedio un tiempo de cálculo de  $3hr$  utilizando 4 procesadores, el paso de tiempo se ajusta en función del número de Courant y se registra un paso de tiempo medio de  $3.07942 \times 10^{-9} s$ . La Fig. 5.14 muestra las distribuciones de presión, temperatura, densidad y la formación de agua para cada uno de los modelos químicos considerados. Se observa que los modelos de Jachimowski (1992) y el de Marinov (1996) describen comportamientos similares, mientras que los resultados obtenidos con el modelo de Jachimowski (1988) difieren substancialmente. Es de hacer notar que el código `Flow-Two` utiliza el modelo de Jachimowski 1992, por lo cual es de esperar que las predicciones efectuadas con dicho modelo describan una adecuada aproximación.

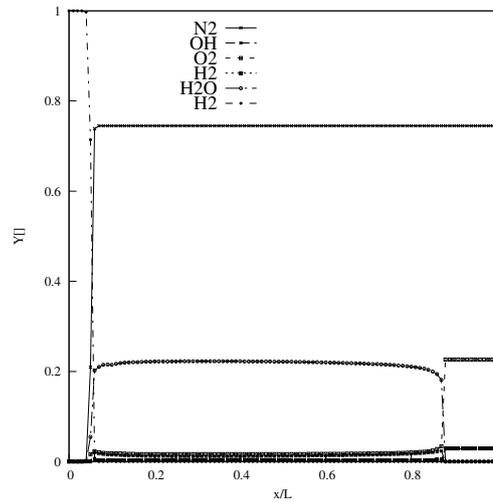


Fig. 5.15: Distribución de fracciones másicas de ( $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{H}_2$ ,  $\text{O}_2$  y  $\text{He}$ ) obtenidas con el modelo de Marinov en ( $t = 228.4\mu\text{s}$ ) (detonación plana  $\text{H}_2$  – aire)

La Fig. 5.15 muestra las distribuciones de agua, hidrógeno, oxígeno y helio sobre el dominio de cálculo, se observa que el helio pasa de estar confinado en el 1% al 2% de la longitud del dominio. Además se puede ver que la posición de la onda detonante coincide con la disminución de  $\text{O}_2$  y la creación de  $\text{H}_2\text{O}$ , por lo tanto la liberación de energía por la reacción exotérmica garantiza la propagación de la onda detonante.

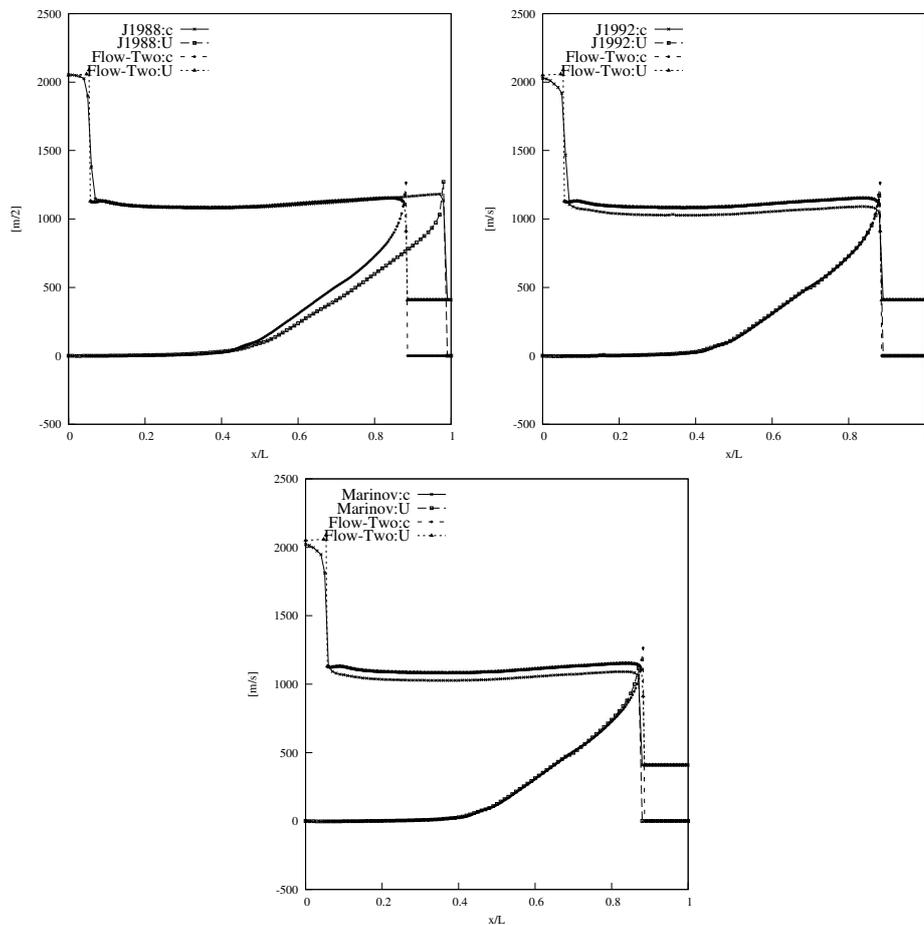


Fig. 5.16: Velocidad del flujo y velocidad del sonido (Jachimowski 1988-1992 y Marinov 1996) ( $t = 228.4\mu\text{s}$ ) (detonación plana  $\text{H}_2$  – aire)

Las Fig. 5.16 muestra la velocidad del sonido y la velocidad obtenida para cada uno de los modelos químicos, nuevamente se observa que los modelos de Jachimowski (1992) y Marinov (1996) entregan mejores predicciones en comparación con el modelo de Jachimowski (1988). Finalmente, empleando el código CEA es posible llevar a cabo el cálculo de equilibrio y determinar la velocidad de la detonación dada por la teoría de Chapman-Jouguet, la cual para la mezcla dada resulta ser  $D^{CJ} = 1933.8 m/s$ . En la Tab. 5.9 se observan los valores obtenidos con cada modelo químico y el porcentaje de error.

M. Químico	D	%Error
Jachimowski-1988	2145.6	10.4
Jachimowski-1992	1926.7	0.37
Marinov-1996	1904.8	0.5

Tabla 5.9: Porcentaje de error con respecto a  $D_{CJ}$  (detonación plana H<sub>2</sub>-aire,  $\phi = 1.0$ )

### 5.11.3. Velocidad de la detonación en función de la relación de equivalencia para una mezcla H<sub>2</sub>-Aire

La velocidad de propagación de la detonación depende directamente de la composición de la mezcla en la que se propaga, por lo tanto resulta relevante verificar que los resultados obtenidos con `rhoCentralRF` logran reflejar el cambio en la velocidad a medida que se varía la relación de equivalencia en la mezcla.

Empleando la misma configuración geométrica de los casos anteriores se ajusta la composición de la mezcla reactiva en función de la relación de equivalencia, las simulaciones numéricas se realizan para  $\phi = [0.25, 1.5]$  con  $\Delta\phi = 0.25$ , utilizando cada uno de los modelos cinéticos descritos en la Sección.5.10. De esta forma se construyen 18 casos los cuales se corren en el *cluster* Piluso. Las simulaciones se desarrollan utilizando 1000 celdas, se utilizan 4 procesadores por caso. Las composiciones se determinan de la siguiente manera [8]:

$$Y_{fuel} = \frac{1}{1 + (4.762n_{O_2})_{st}\phi^{-1}} W_f \bar{W}^{-1} \quad (5.45a)$$

$$Y_{air} = 1 - Y_{fuel} \quad (5.45b)$$

$$Y_{O_2} = \frac{Y_{air} W_{O_2}}{4.762 W_{air}} \quad (5.45c)$$

$$Y_{N_2} = Y_{air} - Y_{O_2} \quad (5.45d)$$

Los valores de dichas composiciones están dadas en la Tab. 5.10.

$\phi$	$Y_{H_2}$	$Y_{O_2}$	$Y_{N_2}$
0.25	0.00728	0.231	0.761
0.5	0.01446	0.229	0.756
0.75	0.02153	0.227	0.750
1.0	0.02851	0.226	0.745
1.25	0.03538	0.224	0.739
1.5	0.04216	0.223	0.734

Tabla 5.10: Composición en fracciones másicas: mezcla combustible H<sub>2</sub>-aire en función de  $\phi$  ( $n_{O_2} = 0.5$ )

Con las simulaciones efectuadas se consiguen los datos graficados en la Fig. 5.17, estos se comparan con resultados de referencia bajo la hipótesis de equilibrio químico calculados con el código CEA [58]. En dicha figura se pueden apreciar las velocidades de propagación obtenidas con `rhoCentralRF` en puntos discretos y los valores de referencia en una línea continua. Se observa que a partir de  $\phi \geq 0.75$  no se aprecia marcada diferencia entre el modelo de Marinov y el de Jachimowski (1992), sin embargo, el modelo de Jachimowski (1988) únicamente arroja buenos resultados para  $\phi = 1.25$  y  $\phi = 1.5$ . Se puede afirmar que en general el modelo de Marinov (1996) describe una mejor aproximación con respecto a los resultados obtenidos con el CEA, y debido a que ha sido demostrado que los cálculos en equilibrio tienen muy buena correlación con respecto a datos experimentales, se puede decir que el código desarrollado arroja muy buenas predicciones para este importante aspecto del proceso detonante.

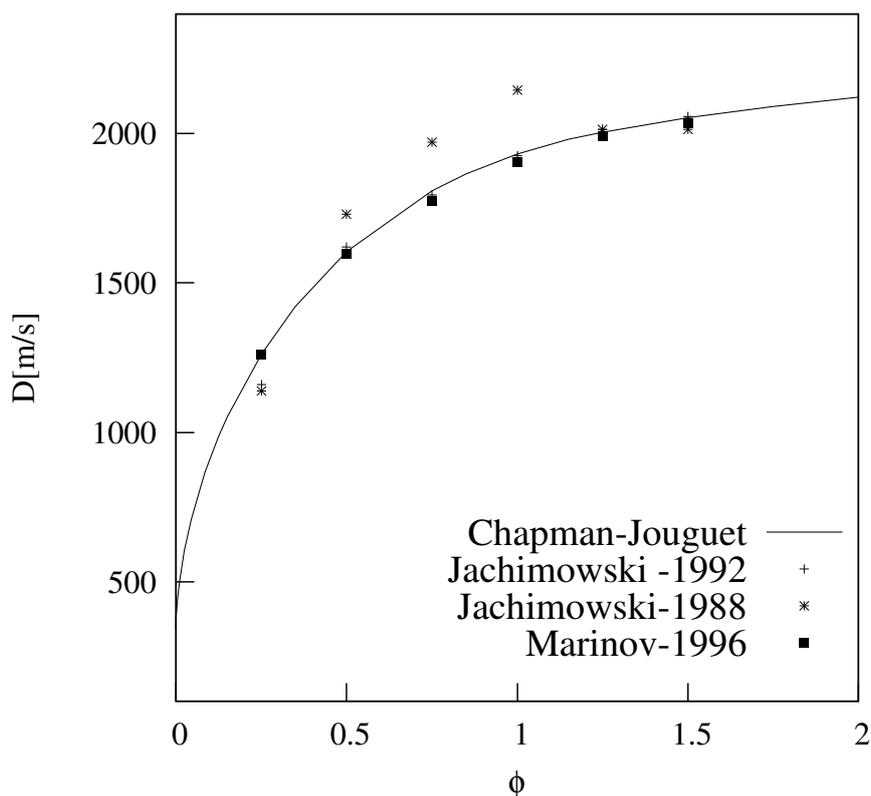


Fig. 5.17: Velocidad de la detonación ( $D$ ) en función de  $\phi$  mezcla  $H_2$ -aire para los modelos químicos Jachimowski 1988-1992 y Marinov 1996) ( $t = 228.4\mu s$ )

#### 5.11.4. Sobre la estructura de una detonación plana que cumple con la condición de Chapman Jouguet

Una buena aproximación a la estructura de la detonación plana es una onda de choque seguida por una deflagración, lo cual es físicamente razonable. En efecto, la onda de choque aumenta la temperatura de la mezcla combustible hasta un valor tal que se producen reacciones químicas exotérmicas y lo hacen a una tasa, que es suficiente para que la subsiguiente deflagración se propague tan rápido como el choque. Este modelo es nominado ZND por haber sido propuesto por Zeldovich, von Neumann y Döring [22, 30, 31].

La solución corriente abajo de la onda detonante está representada por una deflagración con apreciable energía cinética, pero los procesos de transporte difusivos (viscosidad, conducción de calor y difusión másica) son muy pequeños. Por lo tanto, esta deflagración difiere totalmente de las normalmente estudiadas como tales. La diferencia es consecuencia de que para transportar flujos difusivos comparables con los convectivos se necesitarían enormes gradientes, los cuales no pueden ser producidos por la actividad química existente. No obstante, el modelo ZND mediante la construcción de diagramas típicos, permite analizar con un esquema 1D la probable estructura de la detonación en la condición de CJ.

Cuando se excede la condición de CJ la onda detonante es calificada como fuerte y el análisis puede realizarse asumiendo que la dinámica de ondas de choque móviles fuertes es aplicable, al menos hasta que se inicie la fase reactiva. Con esta hipótesis pueden formularse las siguientes

ecuaciones [1]

$$p_{vN} = \frac{2}{\gamma_u + 1} \rho_u u_u^2$$

$$\rho_{vN} = \frac{\gamma_u + 1}{\gamma_u - 1} \rho_u$$

$$T_{vN} = \frac{\frac{\gamma_u + 1}{\gamma_u - 1} + \frac{p_{vN}}{p_u}}{\frac{\gamma_u + 1}{\gamma_u - 1} + \frac{p_u}{p_{vN}}} T_u$$

El subíndice  $vN$  se aplica a los picos de Neumann, localizados inmediatamente detrás de la onda de choque. Las condiciones de la mezcla combustible sin quemar son:  $2H_2 : O_2 : 7Ar$ ,  $p_u = 6670.0 Pa$  y  $T_u = 298.0 K$ . La relación de calores específicos de la mezcla combustible ha sido estimada en  $\gamma_u = 1.5565$ , valor más próximo al de  $5/3$  del Ar como era de esperar. Para estimar la cantidad de celdas en la malla computacional, se necesita determinar la longitud de inducción ( $L_i$ ). Esta longitud se evalúa, al menos en primera instancia, considerando que la velocidad  $D$  de la onda detonante es la de CJ correspondiente a la mezcla combustible, es decir  $D = 1616.3 m/s$ . Computados los valores de  $p_{vN}$  y  $T_{vN}$ , se obtiene:

$$p_{vN} = 173613.6 Pa \quad T_{vN} = 1967 K$$

Utilizando el procedimiento desarrollado en la Sección.5.10.3 se determina el tiempo de inducción con el criterio del 5%, resultando  $\tau_i = 3.73 \mu s$ . Por otra parte, en un sistema de referencia fijo respecto del cual la detonación se propaga con velocidad  $D$ , la velocidad del fluido inmediatamente detrás del pico de von Neumann vale  $u_{vN} = 1264.5 m/s$ . Ahora bien, la velocidad del fluido relativa al frente detonante es calculada por:

$$\begin{aligned} V_{vN} &= D - u_{vN} \\ &= 351.83 m/s \end{aligned}$$

por lo tanto, la longitud de ignición se puede estimar  $L_i = V_{vN} \cdot \tau_i = 1.312 mm$ . Este resultado es próximo al dado por Oran et al.  $L_i = 2 mm$ , [35] y por Deiterding que reporta  $L_i = 1.4 mm$  [37]. Entonces, se propone utilizar 13 en vista del valor aquí estimado de  $L_i$ , en consecuencia para el dominio computacional  $1D$  de  $0.6 m$  se necesitan 5945 celdas, número que se ajusta a 6000 (10000 celdas por metro de longitud).

Los resultados de la solución numérica 1D se presentan en la Fig. 5.18, donde se grafican la presión ( $p[Pa]$ ) y la suma de velocidades ( $(u + a)[m/s]$ ), siendo  $u$  la velocidad de las partículas y  $a$  la del sonido de los productos detrás de la onda, en función de la distancia  $x(m)$ .

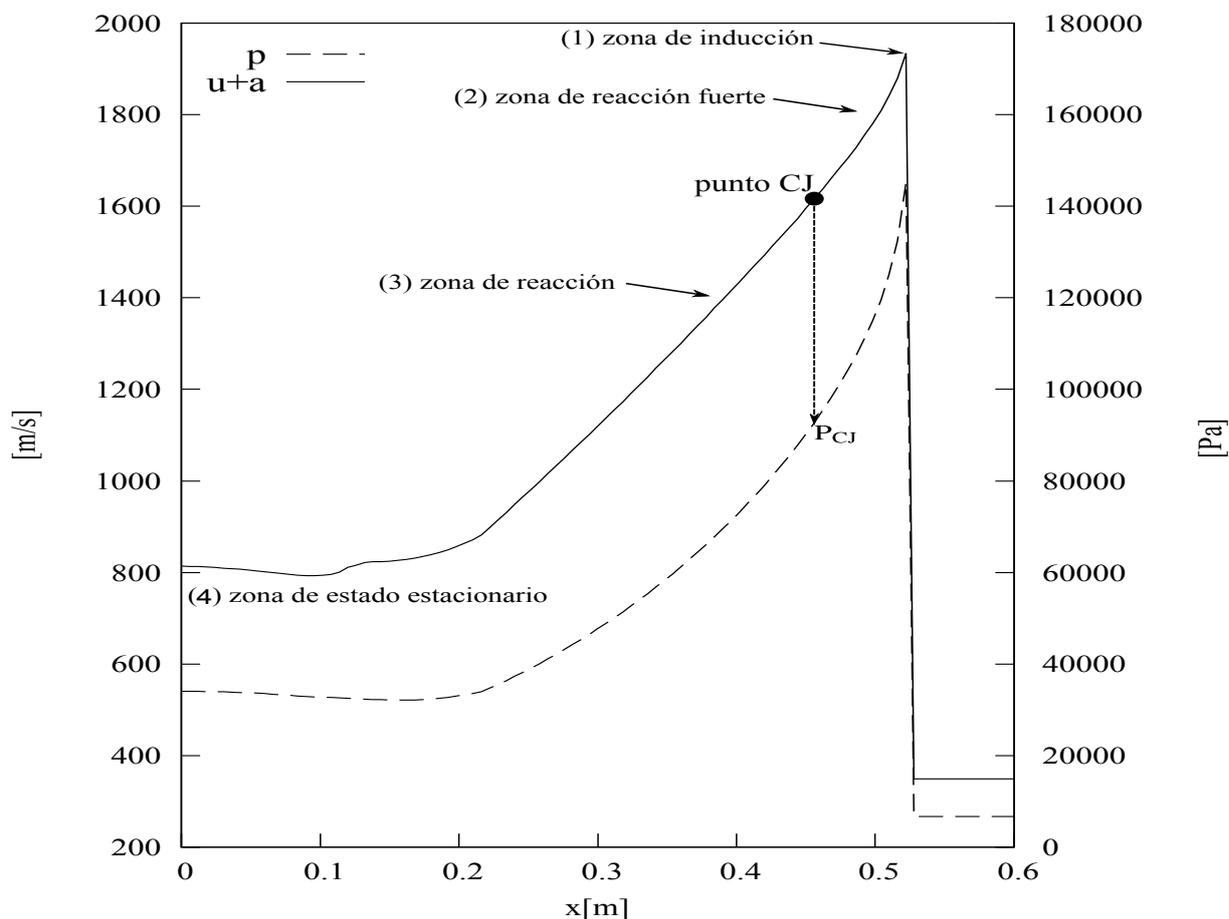


Fig. 5.18: Perfiles  $p$  y  $u + a$  detonación plana ( $2\text{H}_2 : \text{O}_2 : 7\text{Ar}$ )

En la Fig. 5.18 se pueden diferenciar cuatro zonas: (1) la correspondiente a la longitud de inducción; (2) donde se producen las reacciones químicas exotérmicas conducentes al equilibrio térmico del estado de CJ; (3) la de continuación de reacciones químicas pero mucho menos intensas que las que tienen lugar en la zona (2), aunque suficientes para formar un nuevo estado de equilibrio; (4) zona de estado estacionario, donde todas las propiedades del flujo alcanzan el estado de equilibrio. La composición de equilibrio supuestamente alcanzada en la zona (2) se puede determinar con el código CEA [58, 59], específicamente desarrollado para el cálculo del estado de equilibrio químico de múltiples especies, prescindiendo de aspectos fluido dinámicos o con el código rhoCentralRF que utiliza tasa finitas. Los resultados obtenidos con ambos códigos se presentan en la Tab. 5.11 y se observan discrepancias importantes en ciertas especies (H y O), lo cual evidencia que todavía no se ha alcanzado el equilibrio térmico.

$Y_i$	CEA	rhoCentralRF
$\text{O}_2$	0.0108	0.0154
$\text{H}_2$	0.00193	0.0023
$\text{H}_2\text{O}$	0.0871	0.0801
H	0.000429	0.00085
O	0.000268	0.0047
OH	0.01118	0.01059
Ar	0.88589	0.88589

Tabla 5.11: Composición en equilibrio por detrás del frente detonación plana  $7\text{Ar} : 2\text{H}_2 : \text{O}_2$

Se sabe que en un sistema de coordenadas que mantiene al choque detonante estacionario, el Mach donde se cumplen las condiciones de CJ detrás del choque debe ser unitario, lo cual implica que  $u_2 + a_2 = D_{CJ}$ . Como se ha supuesto  $D_{CJ} = 1616.3m/s$  puede determinarse a partir de la Fig. 5.18, la distancia  $x$  donde se verifica que  $u_2 + a_2 = 1616.3m/s$ . Con este valor de  $x$  se entra en el gráfico  $p$  vs.  $x$  (Fig. 5.18) y se obtiene el valor de la presión que le corresponde. Se encuentra  $p = 92722Pa$ , que es un valor muy aceptable cuando se lo compara con el valor experimental  $94000Pa$  de Lefevbre et. al. Ahora bien, el pico de presión de von Neumann resulta ser  $p_{vN} = 1.6 p_{CJ}$ , mientras que el analítico del modelo ZND es  $1.8 p_{CJ}$ .

### 5.11.5. Convergencia hacia la velocidad de Chapman-Jouguet

Sea una detonación producida por una zona de alta energía ubicada en el extremo izquierdo de un conducto (Fig. 5.13). Las condiciones de dicha fuente (*Driver - DR*) son:  $p_{DR} = 1.5Mpa$ ,  $T_{DR} = 3800K$ ,  $L_{DR} = 1\% L$ , con  $L = 0.6m$ . La energía del *driver* es suficiente para generar una detonación *overdriven*, es decir  $D/D_{CJ} > 1$ . La detonación *overdriven* es calculada, como se venía haciendo, con tasas finitas y de la Fig. 5.19 se puede observar que a medida que el tiempo se incrementa  $D/D_{CJ} \rightarrow 1$ . En 2012 en [57] verificaron que de no mediar fuentes de ignición muy particulares, la velocidad de propagación de la detonación *overdriven* siempre converge hacia la de Chapman-Jouguet.

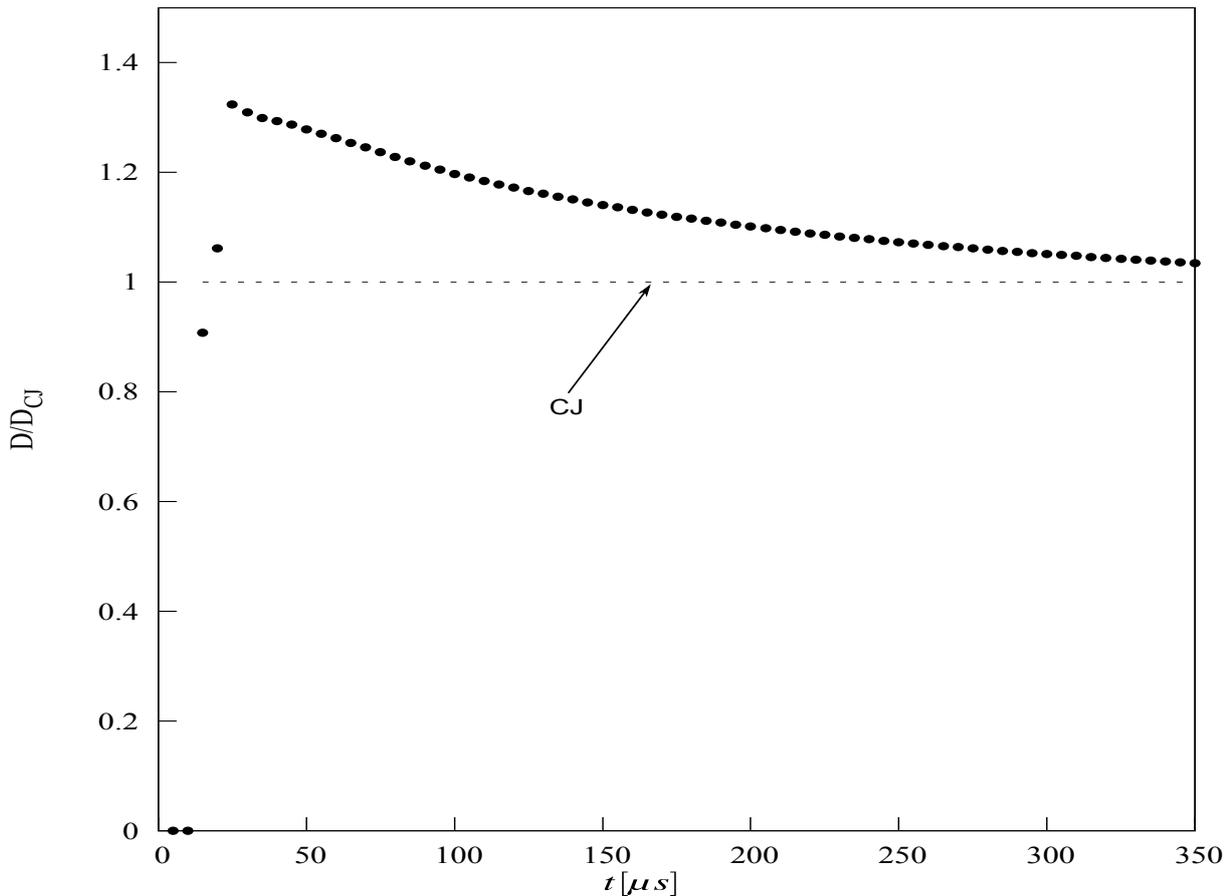


Fig. 5.19: Convergencia hacia la velocidad de Chapman-Jouguet detonación plana ( $2H_2 : O_2 : 7Ar$ )

En las Fig. 5.20 y Fig. 5.21, se muestran diagramas  $t$  vs.  $x$  que describen la formación y pro-

pagación de detonaciones planas inducidas por una fuente 100 % productos de combustión de la mezcla  $2\text{H}_2 : \text{O}_2 : 7\text{Ar}$  y por otra 100 % helio, ambas con presiones y temperaturas iniciales de  $1.5\text{MPa}$  y  $3800\text{K}$ . Con helio se visualiza muy claramente hasta donde se expande la fuente de ignición y luego, permanecer prácticamente estacionaria. En lo que respecta a recursos computacionales las simulaciones efectuadas consumieron en promedio  $4084.26\text{ s}$  corriendo en 16 procesadores de los nodos equipados con procesadores Intel Xeon E5-2680 del *cluster* Mendieta del centro de computación de alto desempeño de la UNC.

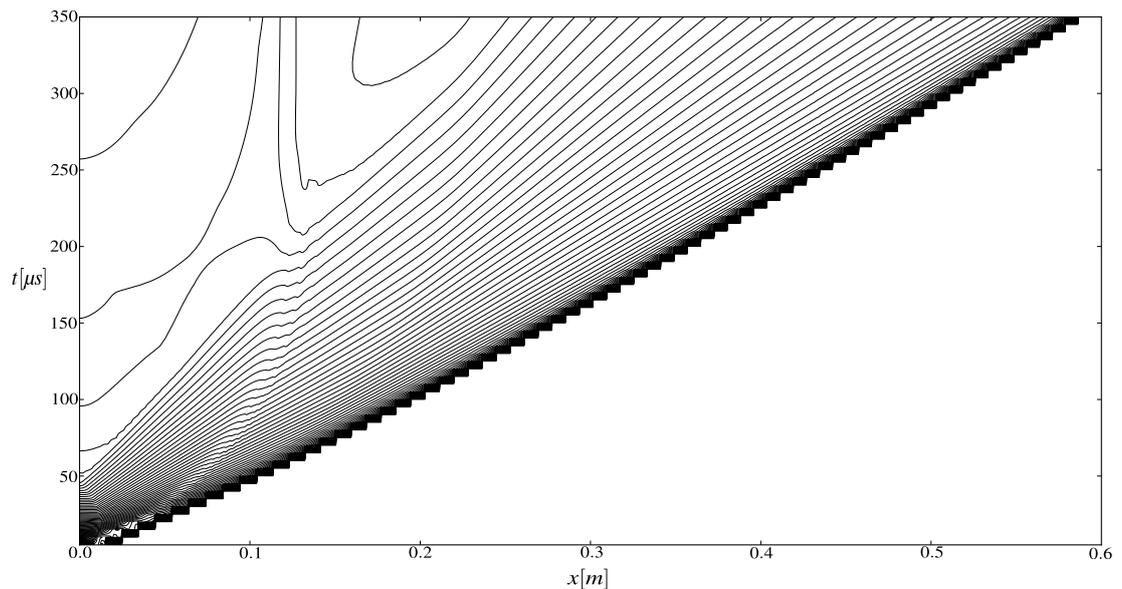


Fig. 5.20: Diagrama  $x$  vs.  $t$  detonación plana  $2\text{H}_2 : \text{O}_2 : 7\text{Ar}$

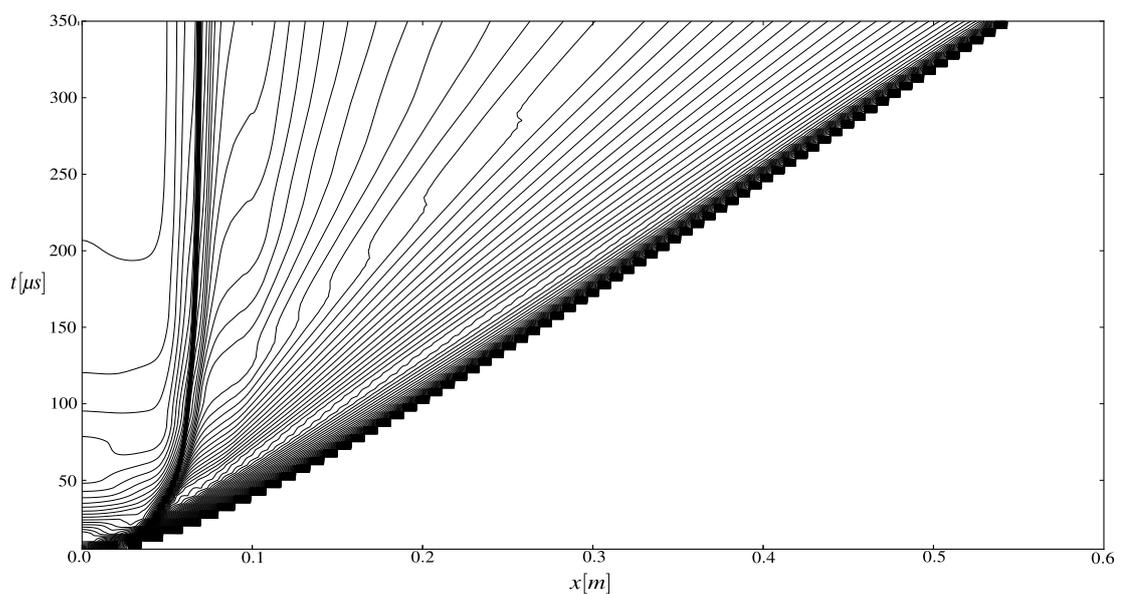


Fig. 5.21: Diagrama  $x$  vs.  $t$  detonación plana  $2\text{H}_2 : \text{O}_2 : 7\text{Ar}$  (Driver: He)

### 5.11.6. Ignición por reflexión de una onda de choque

En esta sección se simula en forma 1D, el problema de una onda de choque móvil que se desplaza por un conducto que contiene un medio combustible sin que se produzca la ignición, debido a que el incremento de temperatura inducido por el paso de la onda no alcanza el valor de autoignición. Esta onda que viaja de derecha a izquierda encuentra el extremo izquierdo del conducto cerrado, por lo tanto, la onda de choque que impacta en este extremo se refleja y genera otra onda de choque más intensa que ahora viaja hacia la derecha, elevando tras su paso la presión y la temperatura. La temperatura ahora, puede adquirir valores que produzcan la ignición de la mezcla reactiva. Este proceso que usa la onda reflejada para iniciar la combustión ha sido y continúa siendo empleado para medir tiempos de inducción en diferentes mezclas combustibles [50, 60–63]. Strehlow y Cohen [64] describen el proceso de ignición que transcurre luego de la reflexión y definen dos regímenes: el fuerte, que se origina desde la pared misma luego de un intervalo dado y el débil, que con temperaturas menores se caracteriza por producir múltiples focos de ignición que luego podrían converger en un frente común [65]. Aquí se considera el caso fuerte porque existen resultados experimentales y numéricos con los cuales se pueden efectuar comparaciones.

El caso a ser analizado corresponde a una onda incidente que al desplazarse en la mezcla combustible ( $H_2 : O_2 : 7Ar$ ), genera las condiciones de flujo listadas en la Tab. 5.12. También se incluyen las condiciones post-reflexión desde una pared sólida.

Var.	Choque incidente	Choque reflejado (valores de referencia)
$p$ [Pa]	36679.65	131820
$T$ [K]	624	1036
$u$ [m/s]	-478.5	0
$C_{O_2}, C_{H_2}, C_{Ar}$	1, 2, 7	

Tabla 5.12: Condiciones iniciales: Ignición por reflexión de una onda de choque

Las condiciones expuestas en la Tab. 5.12 son factibles si la mezcla combustible en reposo tiene una presión de  $p_u = 6670$  Pa y una temperatura de  $T_u = 298.0$  K. El esquema de la onda incidente y de la reflejada, se muestran en la Fig. 5.22.

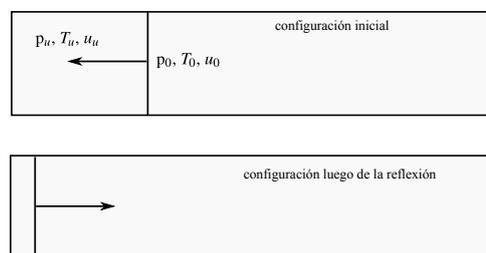


Fig. 5.22: Configuración inicial: Ignición por reflexión de una onda de choque

Nótese que las condiciones del flujo entre la pared y la onda reflejada son condiciones de impacto porque la velocidad del flujo es nula, aunque la onda reflejada sea móvil. Si a la mezcla reactiva con temperatura de  $1036K$  y presión de  $131820Pa$  se le aplica el criterio  $T(\tau_i) = (1 + 0.05)T_i$  y se considera que el proceso es de volumen constante se obtiene, según el procedimiento expuesto en la Sección. 5.10.3 un tiempo de inducción  $\tau_i = 119\mu s$ . En la Fig. 5.23, se presentan

evoluciones temporales de simulaciones numéricas (Im et al. [51]; Fig. 5.23-b.), y experimentales (Oran et al. [50]; Fig. 5.23-a y d). Los obtenidos en este trabajo, se grafican en la Fig. 5.23-c. Se observa que el valor de  $119\mu s$  concuerda muy satisfactoriamente con los datos de referencia, aún cuando las cinéticas químicas son diferentes. La escala logarítmica en el tiempo y las unidades de la presión se mantienen análogos a las usadas en las referencias para facilitar las comparaciones<sup>6</sup>.

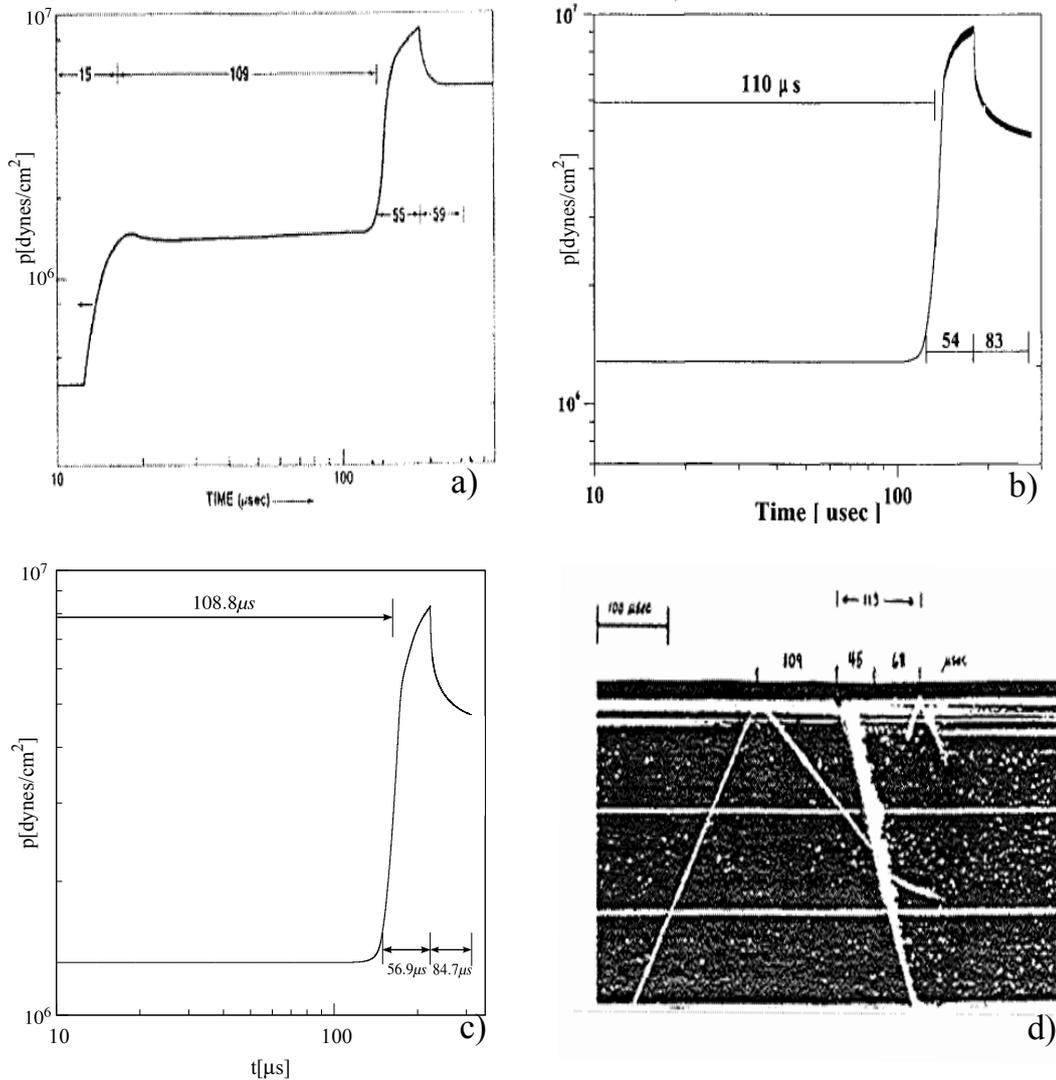


Fig. 5.23: Evolución temporal de la presión máxima ignición por reflexión de un choque a) Numéricos Oran [50] b) Numéricos Im [51] c) rhoCentralRF d) Experimentales Oran [50]

Los tiempos presentados en la Fig. 5.24 corresponden no solamente al de inducción, sino también al de formación de la onda reactiva identificado con el pico de presión. Esta onda reactiva, producida por la autoignición de la mezcla combustible, se desplaza hacia la derecha y eventualmente se convierte en una detonación. El proceso de formación de la detonación puede observarse en el diagrama  $x$  vs.  $t$  de la Fig. 5.24. Se ve en esta figura, como la onda reactiva interactúa con la onda de choque reflejada y da origen a una detonación que se propaga por la mezcla combustible y que continúa desplazándose hacia la izquierda. Nuevamente se muestra la imagen experimental tipo Schlieren dado que esta verifica la buena aproximación de la simulación numérica al proceso real.

<sup>6</sup> $10 \text{ dyn/cm}^2 = 1 \text{ Pa}$

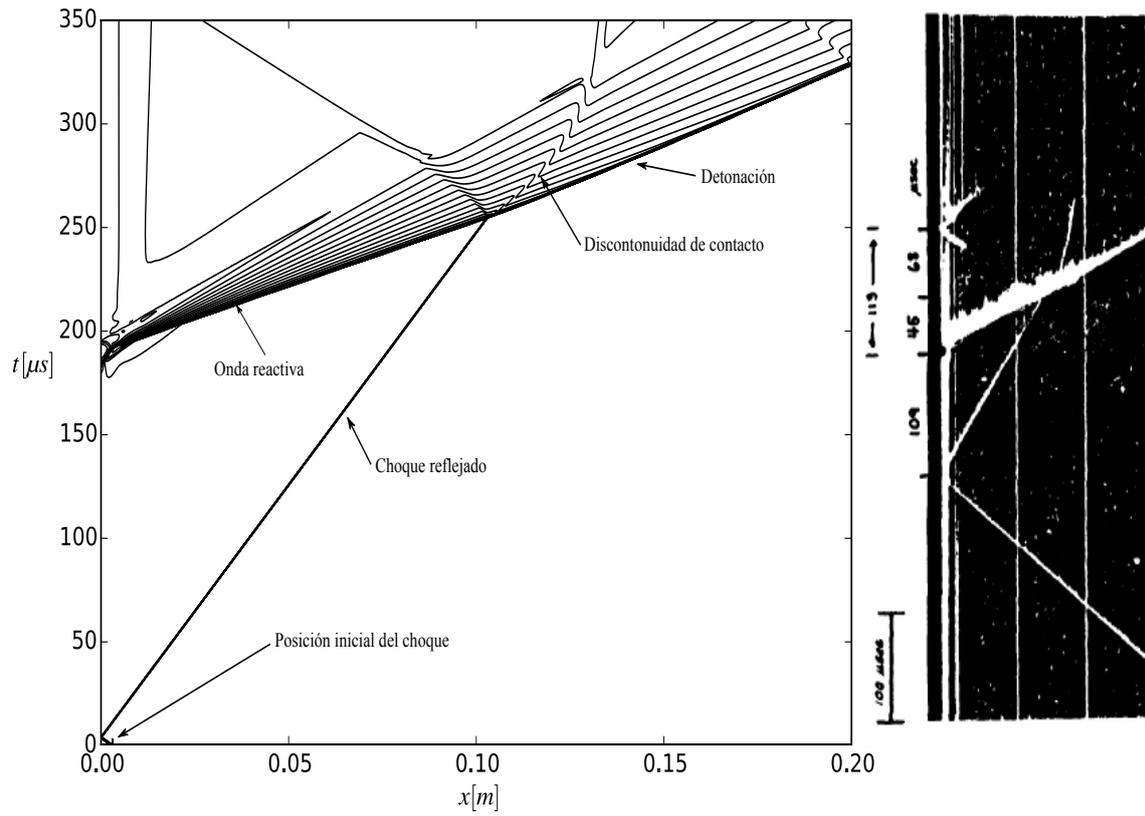


Fig. 5.24: Proceso de formación de la detonación, interacción de la onda reactiva con el choque reflejado

### 5.11.7. Múltiples reflexiones inducidas por una detonación plana, comparación con el caso no reactivo ( $2\text{H}_2 : \text{O}_2 : 7\text{Ar}$ )

En esta sección se estudia el problema de una detonación que dentro de un conducto cerrado en sus dos extremos, se propaga inicialmente desde el extremo izquierdo al derecho. La detonación se inicia mediante una zona de alta energía cuyas características son:  $L_{DR} = 0.005\text{m}$ ,  $p_{DR} = 1.8\text{Mpa}$  y  $T_{DR} = 3800\text{K}$ . La composición de la mezcla reactiva en el *driven* ( $L_{DN} = 0.10 - 0.005\text{m}$ ) del conducto es nuevamente,  $2\text{H}_2 : \text{O}_2 : 7\text{Ar}$  y su presión y temperatura son  $p_{DN} = 6670\text{Pa}$  y  $T_{DN} = 298\text{K}$  respectivamente. En cuanto concierne al caso no reactivo, las condiciones iniciales (*driver* y *driven*) son las mismas del caso reactivo pero se inhibe cualquier actividad química en el *driven*.

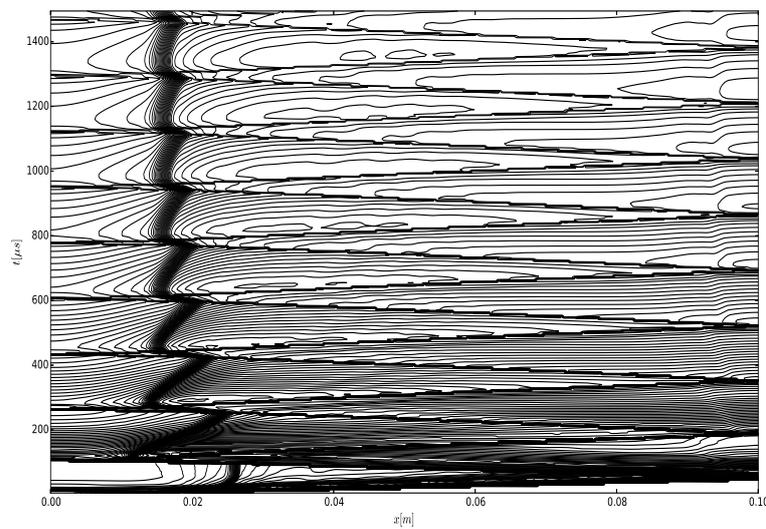


Fig. 5.25: Diagrama  $x$  vs.  $t$ : múltiples reflexiones de una detonación plana ( $2\text{H}_2 : \text{O}_2 : 7\text{Ar}$ )

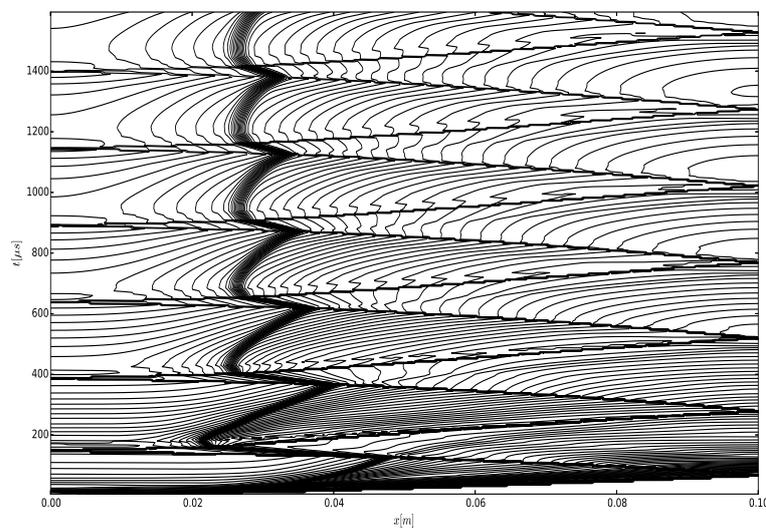


Fig. 5.26: Diagrama  $x$  vs.  $t$ : múltiples reflexiones de una onda de choque plana ( $2\text{H}_2 : \text{O}_2 : 7\text{Ar}$ )

En la Fig. 5.25 se presenta un diagrama  $x$  vs.  $t$  de la simulación del caso reactivo. La detonación viaja hacia la derecha e impacta con la pared que limita al conducto. Se produce el rebote de la detonación incidente pero lo hace como una onda de choque que se propaga hacia la izquierda donde únicamente existen gases quemados. Por lo tanto, la actividad química de las sucesivas ondas incidentes sobre el extremo derecho del conducto y reflejadas, será muy reducida si se la compara con la detonación inicial. Se podría afirmar que solamente es la necesaria para alcanzar la condición de equilibrio que para  $x = 0.05m$ , muestran los resultados de las Fig. 5.27, Fig. 5.28 y Fig. 5.29 para el caso reactivo.

En la Fig. 5.26 se presenta un diagrama  $x$  vs.  $t$  de la simulación del caso no reactivo. Existen únicamente ondas de choque inducidas por diferencias de presiones y temperaturas (no por procesos exotérmicos). La evolución temporal de la presión, temperatura y velocidad en función del tiempo para  $x=0.05m$ , también se muestran en las Fig. 5.27, Fig. 5.28 y Fig. 5.29. De la comparación entre resultados del caso reactivo y el no reactivo que se puede realizar con estas figuras, se deduce que la aproximación al estado de equilibrio es más rápida en el caso reactivo. Esto es consecuencia de que a igualdad de tiempos, los ciclos onda incidente-onda reflejada son más numerosos en el caso reactivo. Obviamente, los valores de equilibrio correspondientes a la presión y la temperatura son mucho más altos para el caso reactivo. Las Fig. 5.25 y Fig. 5.26 permiten apreciar las diferentes expansiones que experimentan las zonas de alta energía, según den inicio a una detonación o a una onda de choque no reactiva.

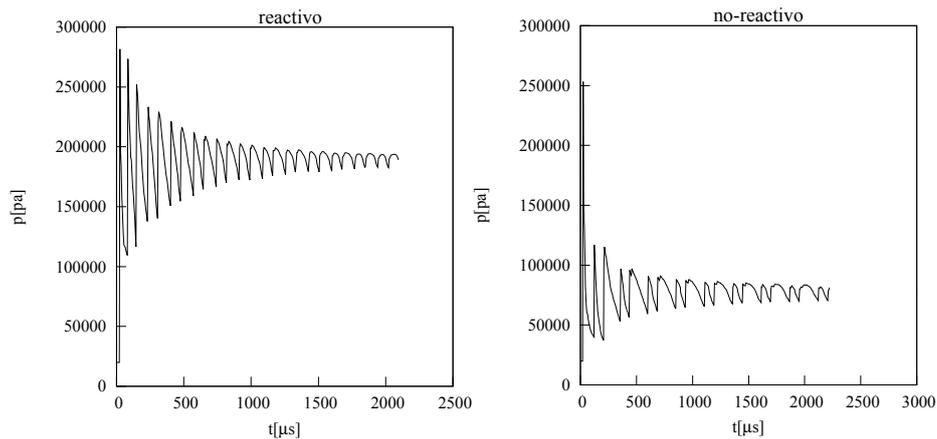


Fig. 5.27: Evolución temporal de la presión en  $x = 0.05 m$  (múltiples reflexiones)

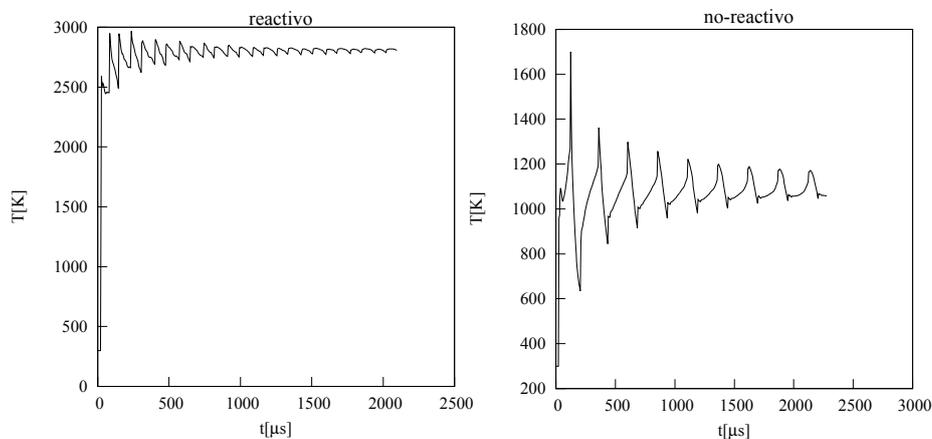


Fig. 5.28: Evolución temporal de la temperatura en  $x = 0.05 m$  (múltiples reflexiones)

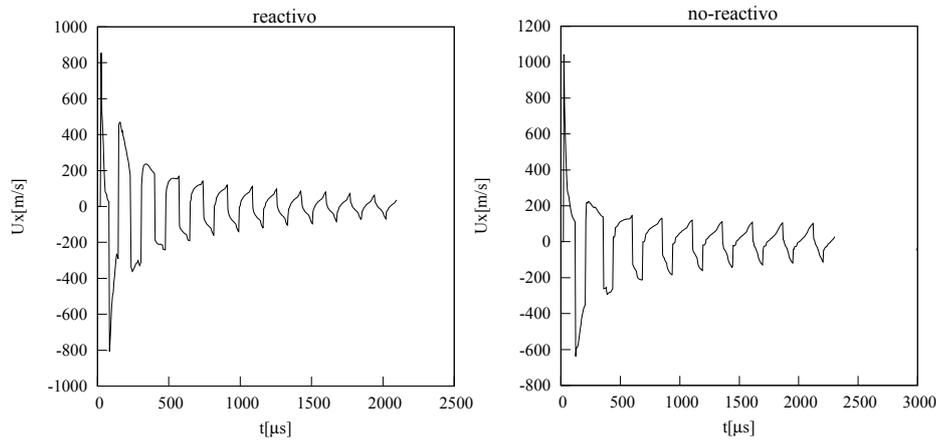


Fig. 5.29: Evolución temporal de la velocidad en  $x = 0.05 m$  (múltiples reflexiones)

### 5.11.8. Simulación bidimensional de la estructura celular de una detonación originada por puntos de alta energía en una mezcla $2H_2 : O_2 : 7Ar$

Aquí se busca mostrar que el código implementado (`rhoCentralRF`) cuenta con la capacidad de desarrollar simulaciones 2D que predicen de forma adecuada la estructura celular del proceso detonativo. Con este objetivo se propone simular un caso de prueba que es muy utilizado en el estudio de las detonaciones que se propagan en un conducto (2D) que contiene una mezcla  $2H_2 : O_2 : 7Ar$ . Esta mezcla reactiva  $7Ar : 2H_2 : O_2$  ha sido utilizada en diferentes estudios previamente y por lo tanto se cuenta con patrones de comparación. Las condiciones iniciales de la mezcla son:

$$p_u = 6670 Pa$$

$$T_u = 298 K$$

$$U_u = (0, 0, 0) m/s$$

Como se observó en la Sección.5.7, la aparición de las células en un proceso detonante se asocia a interacciones de las diferentes ondas presentes en el campo de flujo, sin embargo, para desencadenar dicho proceso de formación en simulaciones numéricas es necesario recurrir a perturbaciones artificiales que simulen de alguna forma, inestabilidades presentes en el campo de flujo. Tales perturbaciones pueden originarse, por ejemplo, considerando múltiples puntos de ignición con alta energía.

En la Sección.5.11.5 al estudiar las detonaciones planas se observó que con un *driver* cuya energía era muy superior a la necesaria para producir la detonación de CJ, se conseguía una onda detonante *overdriven*. No obstante, con el transcurso del tiempo la detonación *overdriven* tiende a abandonar este estado y converge hacia el de CJ. Esto indicaría que cualquiera sea la fuente de ignición la velocidad de propagación de la onda detonante depende de las condiciones iniciales y eventualmente alcanzará el valor dado por CJ, en consecuencia, si la fuente de ignición no es plana (p.ej, varios focos de ignición), se inducirán perturbaciones las cuales estarían presentes en la onda detonante desde su iniciación. Esta manera de perturbar la onda detonante es considerada más apropiada que muchas de las propuestas en otros estudios [42].

Las simulaciones de este caso de prueba se efectuaron utilizando el *cluster* Mendieta seleccionando los nodos de cómputo de acuerdo a los requerimientos de cada situación (Apéndice B).

El objetivo final es mostrar que a partir de cálculos con `rhoCentralRF` se producen resultados comparables con datos experimentales y que concuerdan con simulaciones efectuadas en otros estudios.

Se selecciona como caso de referencia el presentado por Kirillov [43] que ha sido muy estudiado [35, 41, 66–68]. La selección de este caso se debe en principio a que ambos utilizan el mismo modelo químico lo cual facilita la comparación de los resultados. Considérese la configuración mostrada en la Fig. 5.30 la cual reproduce la utilizada por Kirillov. El dominio posee una longitud y altura de  $0.3082\text{ m}$  y  $0.0616\text{ m}$  respectivamente. Se pueden observar las etiquetas dadas a cada uno de sus contornos y a tres zonas de ignición que se distribuyen de forma equidistante sobre el contorno izquierdo. Las dimensiones de cada elemento de ignición son  $0.003072 \times 0.0088\text{ m}$  y en cada uno de ellos la presión y temperatura es:

$$p_I = 1000p_u$$

$$T_I = 25T_u$$

Las condiciones de borde se pueden observar en la Tab. 5.13<sup>78</sup>:

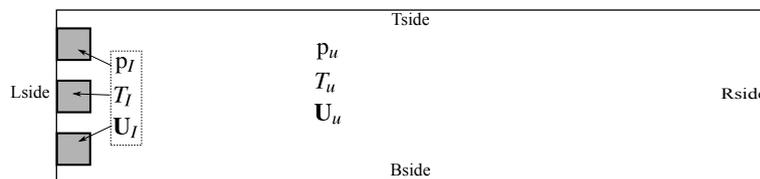


Fig. 5.30: Configuración inicial y dominio de cómputo para la simulación bidimensional de la estructura celular

contorno	p	$T$	$\mathbf{U}$	$Y_i$
Tside/Bside	zeroGradient	zeroGradient	slip	zeroGradient
Lside	zeroGradient	zeroGradient	slip	zeroGradient
Rside	zeroGradient	zeroGradient	zeroGradient	zeroGradient

Tabla 5.13: Condiciones de borde para la simulación de la estructura celular

La simulación se efectúa utilizando el modelo cinético de Marinov. Según fue descrito previamente Sección. 5.10.3 y Sección. 5.11.5, existe una relación entre la resolución apropiada y la longitud de inducción. Con la longitud de inducción aquí estimada ( $L_i = 1.312\text{ mm}$ ), el malla del dominio computacional tendría 2245 celdas según  $x$  y 273 según  $y$ , es decir un total de 612885 celdas, lo que da una resolución de  $0.03097\text{ mm}^2$ . La simulación se desarrolla imponiendo un número de Courant máximo de 0.1 y utilizando un nodo completo del *cluster* Mendieta (16 procesadores). El dominio computacional se distribuye dividiendo en dos franjas en la dirección  $x$  y 8 en  $y$  así se tienen 38303 celdas en promedio por procesador. Se registra un tiempo de cómputo de  $53.93\text{ hr}$ , lo que implica  $3.2\text{ Gb}$  de datos para el tiempo de simulación  $t = 103.68\mu\text{s}$  (Apéndice B)

Para visualizar de forma apropiada la estructura celular se utiliza la máxima presión en el tiempo, es decir que lo que se ve es un ensamble temporal de máximas presiones. De esta forma se genera un campo escalar  $p_{\max}$  el cual contiene tantos valores como los definidos por las celdas de la malla y refleja la trayectoria de los puntos triples fluidodinámicos a medida que el proceso avanza.

<sup>7</sup>Es de hacer notar que como es requisito en `openFoam`<sup>TM</sup> el dominio es tridimensional, y en la dirección normal se aplica la condición de borde `empty`

<sup>8</sup>Se supone que la condición de borde sobre Lside son las aplicables a una pared sólida

La Fig. 5.31 muestra una comparación entre la estructura que resulta luego de  $t = 81\mu s$  y la computada por Kirillov para el mismo tiempo. A primera vista se observan claras similitudes de las ondas y sus interacciones. En la Fig. 5.31.(A) se identifican 6 regiones (a-f) las cuales guardan muy buena correspondencia con las presentadas por la referencia.

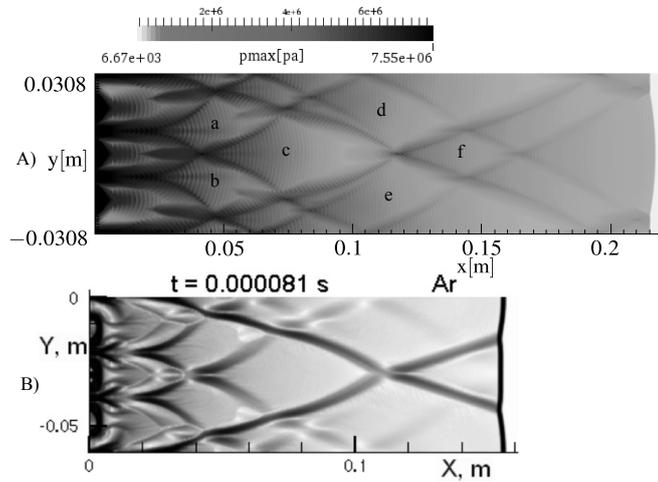


Fig. 5.31: Visualización de la estructura celular (presión máxima hasta  $t = 81\mu s$ ) (comparación con los datos de [43])

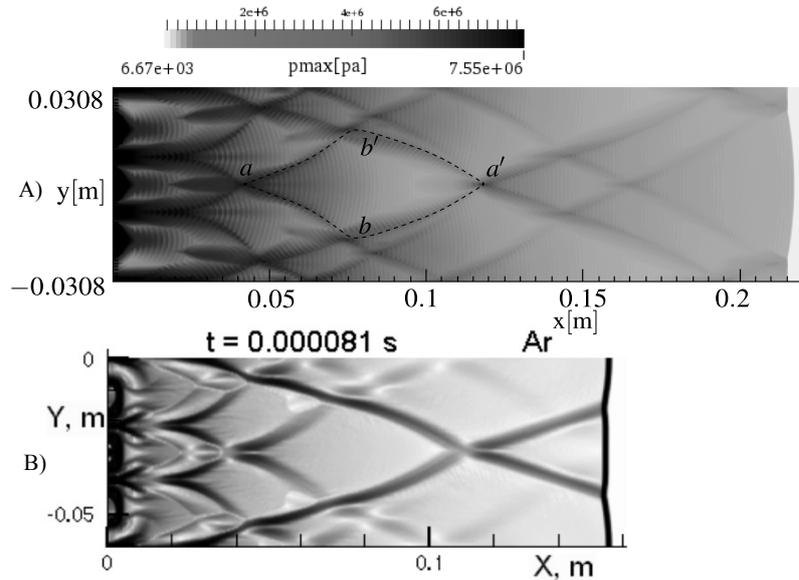


Fig. 5.32: Visualización de la célula temprana (presión máxima hasta  $t = 81\mu s$ ) (comparación con los datos de [43])

La estructura  $c$  en Fig. 5.31 corresponde a la formación de una célula en etapa temprana ( $t = 81\mu s$ ). Alrededor de la misma se pueden observar células deformadas ( $a, b, d, e$ ) y en la sección de salida aproximadamente en  $x = 0.17$  m se inicia la formación de un nuevo patrón que tiempo después convergerá hacia una única célula que abarcará todo el ancho del conducto. Un acercamiento de la célula  $c$  se muestra en la Fig. 5.32, donde se identifican los vértices de la célula temprana ( $a, b', a', b$ ). Las dimensiones características son:

$$\{a, a'\} \rightarrow a$$

$$\{b', b\} \rightarrow \lambda$$

Al medir la altura y la longitud de la célula obtenida con la simulación de rhoCentralRF se obtiene:

$$a = 0.03261 m \quad \lambda = 0.07414 m$$

Con fines de comparación se introduce la relación de aspecto de la célula ( $c^{ar} = \frac{\lambda}{a}$ ). Esto se hace porque dicha relación a diferencia de lo que ocurre con las dimensiones características de la célula, se mantiene relativamente inalterada lo cual facilita la comparación con resultados de estudios similares pero que difieren en varios aspectos (modelo químico, dimensiones del arreglo experimental, etc) [68]. En la Tab. 5.14 se presentan además del resultado propio otros valores extraídos de referencias y se observa que en términos de comparaciones cuantitativas se registran diferencias de hasta un 25 %, mientras que con el dato experimental la diferencia es del 19 %.

Ref.	$a$	$\lambda$	$c^{ar}$	Modelo cinético
rhoCentralRF	0.074	0.032	0.43	Marinov
Kirillov et al.[43]	0.078	0.033	0.42	Marinov
Eckett [68]	0.054	0.03	0.55	8 especies/24 reacciones
Oran et al. [35]	0.055	0.03	0.54	8 especies/24 reacciones
Lefevre & Oran [66]	0.077	0.03	0.42	Modelo simplificado dos pasos
Lefevre et al. (experimental) [67]	0.17	0.09	0.52	[ <i>smoke foil</i> ]

Tabla 5.14: Comparación dimensiones características de la célula  $2H_2 : O_2 : 7Ar$

La pregunta que puede formularse ahora es si la estructura celular tan próxima al sistema de ignición y por ende tan temprana, se conserva cuando se extiende el dominio de cálculo en la dirección  $x$ . Para dar una respuesta, se expande el dominio de cálculo a  $0.5 m$  y se realiza una nueva simulación, en la cual se trata de mantener un mallado que garantice la conservación del número de celdas en que se particiona la longitud de inducción. Por consiguiente, en número de celdas para el nuevo dominio pasa a ser 994298, que dan una resolución de  $\sim 0.0309 mm^2$ .

Los resultados del nuevo cómputo se pueden observar en la Fig. 5.33. En la etapa temprana de la iniciación del proceso se reproduce lo mostrado previamente. No obstante, las celdas que se producen para  $x > 0.25 m$  presentan mayor longitud que la formada en la etapa temprana. Estas celdas poseen una longitud alrededor de  $0.127 m$  ( $c^{ar} = 0.48$ ) lo que se aproxima mejor al dato experimental [67] que es una imagen tipo *smoke foil* (Sección. 5.7) la cual se puede observar en la Fig. 5.34. La reproducibilidad de la estructura celular que se observa en la Fig. 5.33 puede interpretarse como tendencia de la estructura final a ser independiente de las condiciones iniciales.

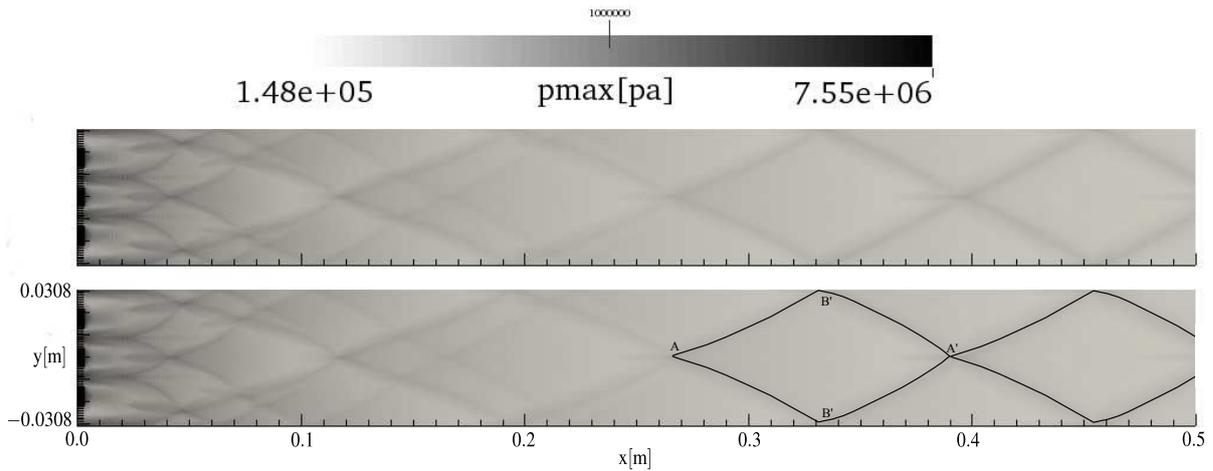


Fig. 5.33: Visualización de la estructura celular ( $2\text{H}_2 : \text{O}_2 : 7\text{Ar}$ , dominio extendido  $L_d = 0.5 \text{ m}$ )

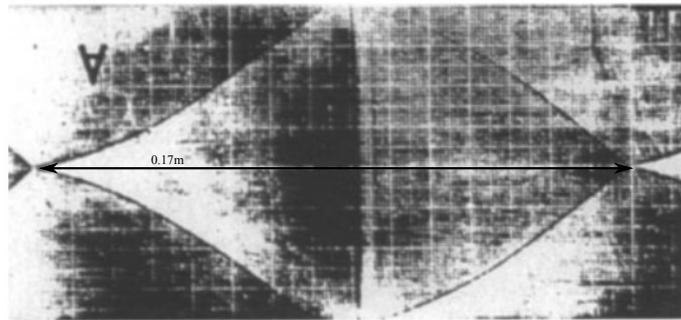


Fig. 5.34: Visualización experimental (*smoke foil*) estructura celular  $2\text{H}_2 : \text{O}_2 : 7\text{Ar}$  [66]

Los resultados mostrados hasta ahora evidencian que el código `rhoCentralRF` posee la capacidad de captar la estructura celular de la detonación. La etapa de post-proceso del último cómputo mostrado debió ser desarrollada en el *cluster* Mendieta ya que las PC con mayor capacidad de vídeo y memoria ram a las que se tenía acceso presentaban problemas al tratar de procesar el volumen de datos necesario. ( $16\text{Gb}$  para  $350\mu\text{s}$  de tiempo físico). El tiempo computacional para 3 nodos completos de Mendieta (54 procesadores) fue  $57.63 \text{ hr}$ .

Con el propósito de mejorar la visualización de la formación de la estructura celular, se recurrió a la utilización de un Schlieren numérico [69]. Dicho Schlieren se construye utilizando funciones del tipo:

$$F = k_1 \exp \left( k_2 \frac{\nabla f}{(\nabla f)_{max}} \right) \quad (5.47)$$

donde el campo  $f$  seleccionado es la densidad. En la Fig. 5.35 se visualiza la imagen obtenida para la densidad ( $t = 81 \mu\text{s}$ ). Se observan las ondas que forman un punto triple y cómo el frente de la detonación se ve afectado. La continua formación de puntos triples a medida que la onda detonante se propaga define el contorno de la célula y a su vez crea las perturbaciones que inicia la formación de nuevos puntos triples.

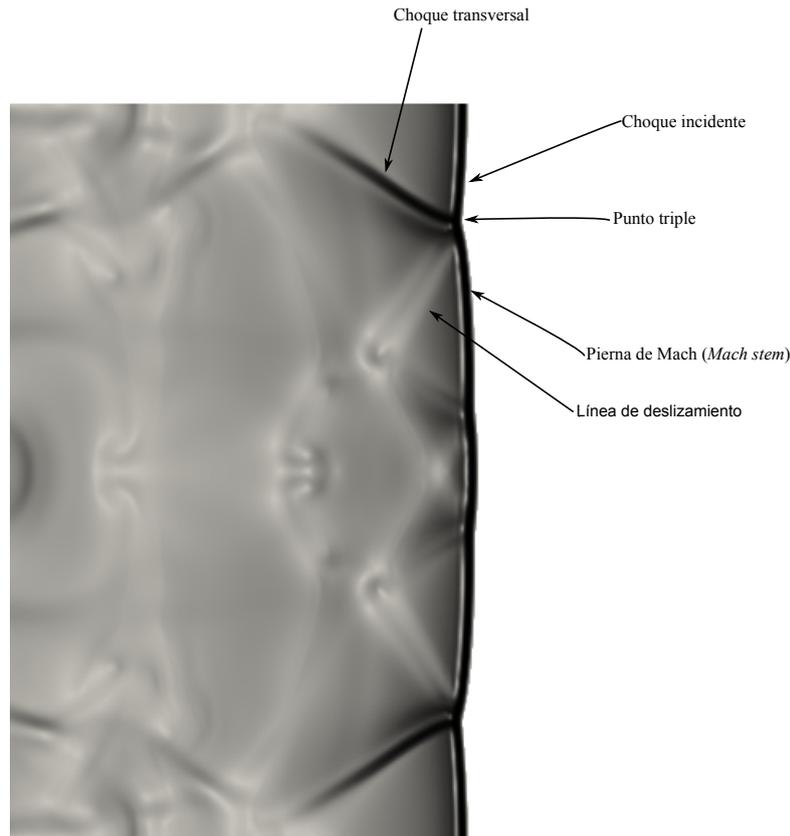


Fig. 5.35: Schlieren numérico de la interacción de las ondas en el punto tripe ( $t = 81\mu s$ ,  $2H_2 : O_2 : 7Ar$ )

Las ondas transversales que aparecen debido a las perturbaciones interactúan con el frente en forma similar a una reflexión irregular, la onda transversal adopta el rol de la onda reflejada, el frente se bifurca, aparecen una onda de choque incidente y la pierna de Mach (ver Sección.5.7, Fig. 5.7). Estas tres ondas interactúan en el punto triple donde también se observa una línea de deslizamiento ubicada entre el flujo afectado por la onda transversal y la pierna de Mach.

En la Fig. 5.36 se presentan imágenes generadas con el Schlieren numérico que muestran la continua formación de los puntos triples y cómo sus desplazamientos con el tiempo van configurando el contorno de las células. Así en  $t = 13.6\mu s$  (Fig. 5.36-d), se detecta la formación de puntos triples sobre el frente detonante. Luego en  $t = 22.7\mu s$  (Fig. 5.36-f) los puntos triples se han desplazado desde su posición anterior y aparecen otros, producto de la interacción de nuevas ondas reactivas con el frente. En  $t = 54.4\mu s$  (Fig. 5.36-I), se pueden distinguir configuraciones débiles en la parte superior e inferior del conducto y como en la zona central confluyen dos puntos triples. En el intervalo  $[t = 103.6 - 54.4\mu s]$ , se observa cómo el movimiento de los puntos triples está limitado por la altura del conducto 2D y por lo tanto alcanzan su distancia de separación máxima.

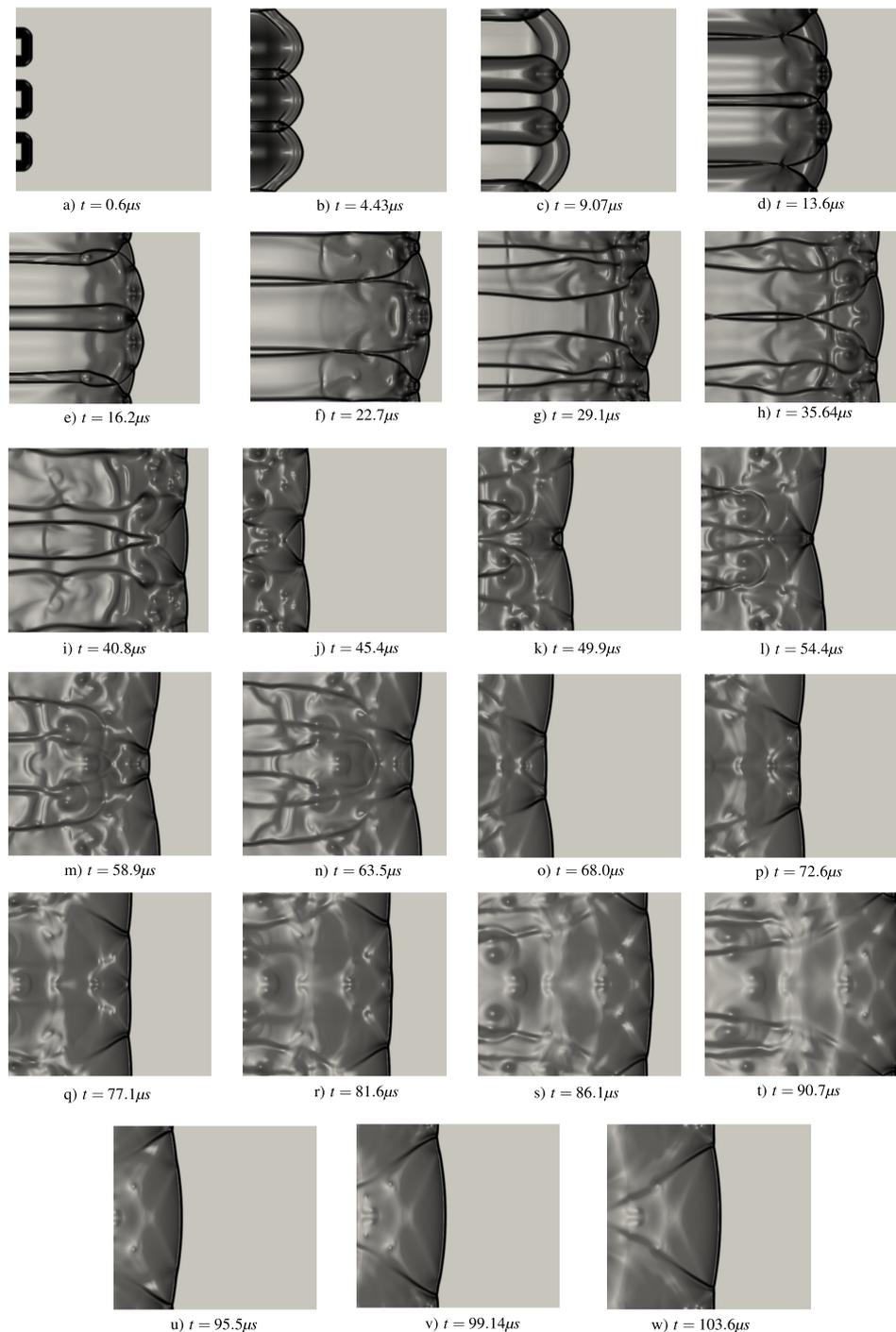


Fig. 5.36: Schlieren numérico de la densidad del proceso de formación de la estructura celular ( $2H_2 : O_2 : 7Ar$ )

En la Fig. 5.37 se muestran tres figuras de contornos isobáricos correspondientes a los instantes  $t = 16.2\mu$ ,  $t = 27.8\mu$  y  $t = 48.6\mu$ . La primera configuración corresponde al punto triple central que define el inicio de la célula temprana, el segundo corresponde al instante en que los puntos triples alcanzan su máxima separación definiendo la altura  $\lambda$  de la célula. El último de los contornos isobáricos muestra la convergencia de los puntos triples hacia el eje de simetría cerrando así el contorno de la célula temprana. En la Fig. 5.36-m ( $t = 58.9\mu s$ ) se observa que los puntos triples ya se han separado del eje de simetría e inician la formación de otra célula.

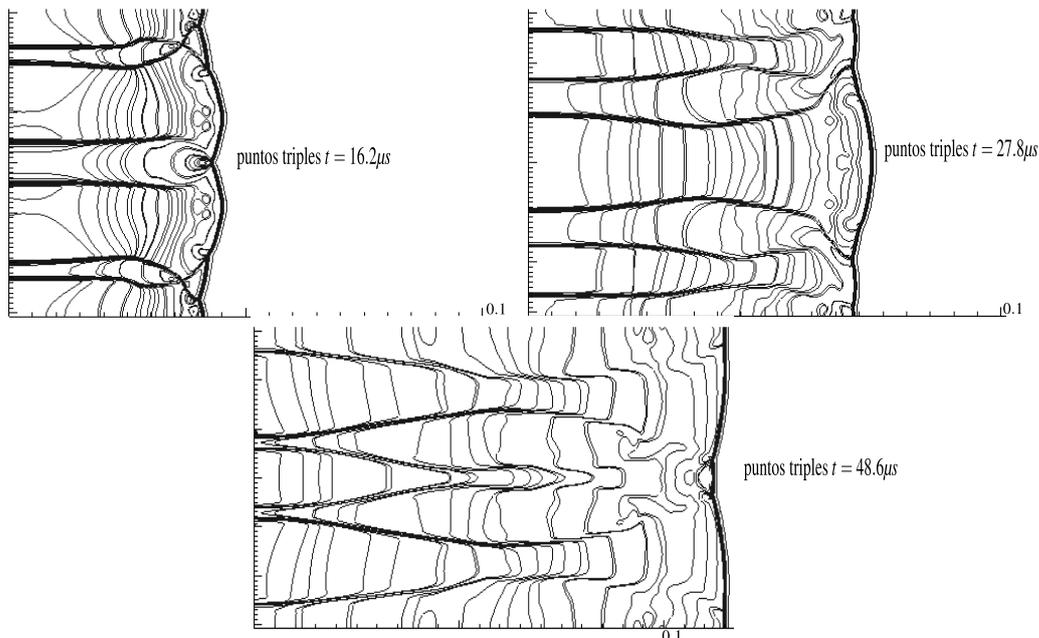


Fig. 5.37: Isobaras del proceso de formación de la célula temprana ( $2H_2 : O_2 : 7Ar$ )

Con lo expuesto en esta sección se corrobora que el código desarrollado (`rhoCentralRF`) posibilita el estudio de la estructura celular de las detonaciones obteniéndose resultados de calidad comparable a los mostrados en otros estudios numéricos y también con buen nivel de aproximación a los datos experimentales disponibles. Sin embargo, dados los altos requerimientos computacionales necesarios para desarrollar tanto las simulaciones numéricas como el post-proceso de los datos se hace evidente la necesidad de acoplar al menos, la técnica de mallado adaptivo de forma tal de acotar la relación resolución/costo computacional.

## Referencias capítulo 5

- [1] **C. K. Law**, *Combustion physics*, Cambridge University Press, 2006.
- [2] **C. J. Chapman**, *High speed flow*, vol. 23, Cambridge University Press, 2000.
- [3] **J. Anderson**, *Hypersonic and High-Temperature Gas Dynamics*, AIAA Education Series, American Institute of Aeronautics and Astronautics, 2006.
- [4] **A. Kurganov** y **E. Tadmor**, *New high-resolution central schemes for nonlinear conservation laws and convection-diffusion equations*, *Journal of Computational Physics*, vol. 160(1):pp. 241–282, 2000.
- [5] **A. Kurganov**, **S. Noelle** y **G. Petrova**, *Semidiscrete Central-Upwind Schemes for Hyperbolic Conservation Laws and Hamilton–Jacobi Equations*, vol. 23, 2001.
- [6] **A. Kurganov** y **G. Petrova**, *A third-order semi-discrete genuinely multidimensional central scheme for hyperbolic conservation laws and related problems*, *Numerische Mathematik*, vol. 88(4):pp. 683–729, 2001.
- [7] **C. Greenshields**, **H. Weller**, **L. Gasparini** y **J. Reese**, *Implementation of semi-discrete, non-staggered central schemes in a colocated, polyhedral, finite volume framework, for high-*

- speed viscous flows*, *International journal for numerical methods in fluids*, vol. 63(1):pp. 1–21, 2010.
- [8] **K. K. Kuo.**, Principles of Combustion, John Wiley & Sons, Inc., 2nd ed., 2005.
- [9] **K. Kuo y R. Acharya**, Fundamentals of Turbulent and Multi-Phase Combustion, Wiley, 2012.
- [10] **L. F. Gutiérrez Marcantoni, J. Tamagno y S. Elaskar**, *Application of kurganov central schemes to planar detonation waves with detailed chemistry*, *Computer & Fluids*, vol. Submitted(-):pp.–, 2015.
- [11] **G. Bader y P. Deuffhard**, *A semi-implicit mid-point rule for stiff systems of ordinary differential equations*, *Number. Math.*, vol. 41:pp. 373–398, 1983.
- [12] **J. H. Lee**, The detonation phenomenon, vol. 2, Cambridge University Press Cambridge, 2008.
- [13] **R. Friedman**, *American rocket society*, 1953.
- [14] **D. R. Stull y H. Prophet**, JANAF Thermochemical Tables, 2nd Edition. US National Bureau of Standards. NSRDS-NBS 37, 1971.
- [15] **D. R. Stull y H. Prophet**, JANAF Thermochemical Tables, US National Bureau of Standards, 1971.
- [16] **A. Oppenheim**, Dynamics of Combustion Systems, Springer Berlin Heidelberg, 2008.
- [17] **D. L. Chapman**, *Phil. mag*, vol. 104:pp. 47,90, 1889.
- [18] **E. Jouguet**, *Phil. mag*, vol. 104:p. 1211, 1904.
- [19] **W. Fickett y W. C. Davis**, Detonation: theory and experiment, Courier Corporation, 2012.
- [20] **J. H. Lee**, *Dynamic parameters of gaseous detonations*, *Annual review of fluid mechanics*, vol. 16(1):pp. 311–336, 1984.
- [21] **M. A. Nettleton**, Gaseous detonations: their nature, effects and control, Springer Science & Business Media, 1987.
- [22] **Y. B. Zeldovich**, *On the theory of the propagation of detonation in gaseous systems*, vol. 1261, 1950.
- [23] **F. Zhang**, Shock Waves Science and Technology Library, Vol. 6: Detonation Dynamics, Shock Wave Science and Technology Reference Library, Springer Berlin Heidelberg, 2012.
- [24] **J. Dionne, R. Duquette, A. Yoshinaka y J. Lee**, *Pathological detonations in h2-ci2*, *Combustion science and technology*, vol. 158(1):pp. 5–14, 2000.
- [25] **A. A. Vasil'ev**, *Dynamic parameters of detonation*, in Shock Waves Science and Technology Library, Vol. 6, pp. 213–279, Springer, 2012.
- [26] **F. J. Zeleznik y S. Gordon**, *Calculation of detonation properties and effect of independent parameters on gaseous detonations*, *ARS Journal*, vol. 32(4):pp. 606–615, 1962.

- [27] **S. Gordon y B. J. McBride**, *Computer program for calculation of complex chemical equilibrium compositions, rocket performance, incident and reflected shocks, and chapman-jouguet detonations*, 1971.
- [28] **B. Lewis y G. von Elbe**, *Combustion, Flames and Explosives of Gases*, Academic Press, 1961.
- [29] **R. A. Strehlow**, *Combustion fundamentals*, McGraw-Hill College, 1984.
- [30] **J. von Neumann**, *Theory of detonation waves, osrd rep*, 1942.
- [31] **W. Döring**, *On detonation processes in gases*, *Ann. Phys*, vol. 43(421-436):p. 9, 1943.
- [32] **J. Shepherd**, *Detonation in gases, Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 32(1):pp. 83–98, 2009.
- [33] **J. M. Austin**, *The role of instability in gaseous detonation*, Ph.D. thesis, California Institute of Technology, Pasadena Ca., 2003.
- [34] **V. N. Gamezo, D. Desbordes y E. S. Oran**, *Formation and evolution of two-dimensional cellular detonations*, *Combustion and Flame*, vol. 116(1):pp. 154–165, 1999.
- [35] **E. S. Oran, J. W. Weber, E. I. Stefaniw, M. H. Lefebvre y J. D. Anderson**, *A numerical study of a two-dimensional  $h \sim 2/o \sim 2/ar$  detonation using a detailed chemical reaction model*, *Combustion and Flame*, vol. 113(1):pp. 147–163, 1998.
- [36] **V. N. Gamezo, D. Desbordes y E. Oran**, *Two-dimensional reactive flow dynamics in cellular detonation waves*, *Shock Waves*, vol. 9(1):pp. 11–17, 1999.
- [37] **R. Deiterding**, *Numerical structure analysis of regular hydrogen-oxygen detonations*, in Proc. of Fall Meeting of Western States Section. The Combustion Institute, 2003.
- [38] **H. D. Ng**, *The effect of chemical reaction kinetics on the structure of gaseous detonations*, vol. 68, 2005.
- [39] **X. Hu, B. Khoo, D. Zhang y Z. Jiang**, *The cellular structure of a two-dimensional  $h \sim 2/o \sim 2/ar$  detonation wave*, *Combustion Theory and Modelling*, vol. 8(2):pp. 339–359, 2004.
- [40] **B. Taylor, D. Kessler, V. Gamezo y E. Oran**, *Numerical simulations of hydrogen detonations with detailed chemical kinetics*, *Proceedings of the combustion Institute*, vol. 34(2):pp. 2009–2016, 2013.
- [41] **K. Kailasanath, E. Oran, J. Boris y T. Young**, *A computational method for determining detonation cell size*, in American Institute of Aeronautics and Astronautics, Aerospace Sciences Meeting, 23 rd, Reno, NV, p. 1985, 1985.
- [42] **J. Choi, F. Ma y V. Yang**, *Some numerical issues on simulation of detonation cell structures*, *Combustion, Explosion, and Shock Waves*, vol. 44(5):pp. 560–578, 2008.
- [43] **I. Kirillov, M. Strelkova, A. Panasenko y D. Roekaerts**, *Sensitivity to detonation and detonation cellular structure of  $h_2$ - $O_2$ -air- $h_2O_2$  gas mixtures*, in First International Conference on Hydrogen Safety, Pisa, Italy, pp. 8–10, 2005.

- [44] **M. Short, C. B. Kiyanda, J. J. Quirk y G. J. Sharpe**, *The role of cellular structure on increasing the detonability limits of three-step chain-branching detonations*, Tech. rep., Los Alamos National Laboratory (LANL), 2011.
- [45] **C. J. Jachimowski**, *An analysis of combustion studies in shock expansion tunnels and reflected shock tunnels*, vol. 3224, Citeseer, 1992.
- [46] **C. J. Jachimowski**, *An analytical study of the hydrogen-air reaction mechanism with application to scramjet combustion*, vol. 2791, National Aeronautics and Space Administration, Scientific and Technical Information Division, 1988.
- [47] **M. N. Marinov, C. K. Westbrook y W. J. Pitz**, *Detailed and global chemical kinetics model for hydrogen*, *Transport phenomena in combustion*, vol. 1:p. 118, 1996.
- [48] **R. J. Kee, F. M. Rupley y J. A. Miller**, *Chemkin-ii: A fortran chemical kinetics package for the analysis of gas-phase chemical kinetics*, Tech. rep., Sandia National Labs., Livermore, CA (USA), 1989.
- [49] **M. Elhsnawi y A. Teodorczyk**, *Validation of detailed reaction mechanisms for simulations of combustion systems with gas injection*, *Journal of KONES*, vol. 9(1-2), 2002.
- [50] **E. Oran, T. Young, J. Boris y A. Cohen**, *Weak and strong ignition. i. numerical simulations of shock tube experiments*, *Combustion and Flame*, vol. 48:pp. 135–148, 1982.
- [51] **K.-S. Im, C. Kim, S. Yu, S.-C. Chang y P. C. Jorgenson**, *Application of the cese method to detonation with realistic finite-rate chemistry*, *AIAA*, vol. 1020:p. 2002, 2002.
- [52] **R. Deiterding**, *Parallel adaptive simulation of multi-dimensional detonation structures*, dissertation. de, 2003.
- [53] **A. Bourlioux y A. J. Majda**, *Theoretical and numerical structure for unstable two-dimensional detonations*, *Combustion and Flame*, vol. 90(3):pp. 211–229, 1992.
- [54] **M. Short y J. J. Quirk**, *On the nonlinear stability and detonability limit of a detonation wave for a model three-step chain-branching reaction*, *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 339:pp. 89–119, 1997.
- [55] **G. Sharpe y J. Quirk**, *Nonlinear cellular dynamics of the idealized detonation model: Regular cells*, *Combustion Theory and Modelling*, vol. 12(1):pp. 1–21, 2008.
- [56] **Z. Liang y L. Bauwens**, *Cell structure and stability of detonations with a pressure-dependent chain-branching reaction rate model*, *Combustion Theory and Modelling*, vol. 9(1):pp. 93–112, 2005.
- [57] **J. P. Tamagno, S. A. Elaskar y J. O. García**, *A numerical study of planar detonations*, *Latin American applied research*, vol. 42(2):pp. 161–166, 2012.
- [58] **Z. M. J. McBride, B.J. y S. Gordon**, *Chemical equilibrium with applications*, 2005, URL <http://www.grc.nasa.gov/WWW/CEAWeb/>.
- [59] **B. J. McBride y S. Gordon**, *Computer program for calculation of complex chemical equilibrium compositions and applications: Ii. users manual and program description*, *NASA reference publication*, vol. 1311:pp. 84–85, 1996.
- [60] **A. Burcat, K. Scheller y A. Lifshitz**, *Shock-tube investigation of comparative ignition delay times for c 1-c 5 alkanes*, *Combustion and Flame*, vol. 16(1):pp. 29–33, 1971.

- [61] **R. R. Craig**, *A shock tube study of the ignition delay of hydrogen-air mixtures near the second explosion limit*, Tech. rep., DTIC Document, 1966.
- [62] **S. Fujimoto**, *Chemical reaction in a shock wave. i. the ignition delay of a hydrogen-oxygen mixture in a shock tube*, *Bulletin of the Chemical Society of Japan*, vol. 36(10):pp. 1233–1236, 1963.
- [63] **G. B. Skinner** y **G. H. Ringrose**, *Ignition delays of a hydrogen—oxygen—argon mixture at relatively low temperatures*, *The Journal of Chemical Physics*, vol. 42(6):pp. 2190–2192, 1965.
- [64] **R. A. Strehlow** y **A. Cohen**, *Initiation of detonation*, *Physics of Fluids (1958-1988)*, vol. 5(1):pp. 97–101, 1962.
- [65] **V. Voevodsky** y **R. Soloukhin**, *Tenth symposium (international) on combustion*, *The Combustion Institute*, p. 279, 1965.
- [66] **M. Lefebvre** y **E. Oran**, *Analysis of the shock structures in a regular detonation*, *Shock Waves*, vol. 4(5):pp. 277–283, 1995.
- [67] **M. Lefebvre**, **J. Weber** y **E. Oran**, *Numerical simulations of a marginal detonation: Wave velocities and transverse wave structure*, in *IUTAM Symposium on Combustion in Supersonic Flows*, pp. 347–358, Springer, 1997.
- [68] **C. A. Eckett**, *Numerical and analytical studies of the dynamics of gaseous detonations*, Ph.D. thesis, Citeseer, 2000.
- [69] **L. A. Yates**, *Interferograms, schlieren, and shadowgraphs constructed from real-and ideal-gas, two-and three-dimensional computed flowfields*, National Aeronautics and Space Administration, 1992.

# Capítulo 6

## Conclusiones, aportes y trabajo futuro

### Síntesis de las tareas realizadas en la tesis

En esta tesis se abordaron desde problemas típicos de la dinámica de gases hasta problemas relacionados con la generación y propagación de detonaciones. La presentación de la tesis se hizo de forma tal que primero se trató la combustión difusiva de baja velocidad (Cap. 3), con simulación RANS de la turbulencia y modelando la interacción química-turbulencia con el concepto PaSR. Cuando el número de Mach del flujo tiende a ser nulo, el uso de la ecuación de continuidad no es la más indicada para el cálculo de la densidad, por consiguiente, una nueva ecuación de transporte resultante de acoplar la presión con la velocidad es formulada. Con estas primeras tareas se comprobó que las librerías de openFoam™ y la concepción estructural de sus “solvers” permitían tratar problemas con múltiples facetas de manera eficiente y obtener resultados válidos en situaciones complejas. Además, provee utilidades para la generación de mallas, el procesamiento de datos y de resultados. La discretización del dominio computacional debe hacerse con volúmenes finitos que pueden o no, ser estructurados.

En un capítulo siguiente, (Cap. 4) con algoritmos numéricos y códigos computacionales provistos por openFoam™ (en particular rhoCentralFoam, sonicFoam y dbnsFoam) se ejecutaron simulaciones numéricas de problemas fluido-dinámicos supersónicos externos e internos considerados de vital importancia en la ingeniería aeroespacial moderna, particularmente cuando la capacidad experimental con que se cuenta no es la adecuada o no existe. Los flujos numéricos utilizados en estas simulaciones fueron generados según la técnica propuesta por Kurganov y Tadmor (2000). Esta técnica, en cuanto concierne a eficiencia y precisión en capturar discontinuidades (ondas de choque, superficies de contacto y/o de deslizamiento), ha mostrado ser competitiva cuando se la compara con las tradicionalmente usadas basadas en solvers de Riemann. Además, el costo computacional en simulaciones de flujos supersónicos es inferior.

Por último (Cap. 5), se trataron flujos químicamente activos solucionando simultáneamente las ecuaciones de Euler con las de conservación de las especies e imponiendo condiciones iniciales apropiadas para generar flujos detonantes planos y bidimensionales. Con los flujos detonantes 2D, se prestó especial atención a la estructura celular resultante de perturbaciones impuestas al frente de onda. Cabe hacer notar que la actividad química de mezclas combustibles  $H_2$  : Aire y  $H_2$  :  $O_2$  : Ar, se describe en base a la incorporación en openFoam™ de modelos cinéticos que pueden tener hasta 14 especies y 33 reacciones elementales. La dependencia exponencial de las tasas cinéticas de la temperatura, hace que las ODE's necesarias para determinar los términos

fuentes de las ecuaciones de las especies tengan un comportamiento *stiff*, entonces, para garantizar la estabilidad del cómputo se emplea un algoritmo numérico apropiados extraído de las librerías de openFoam™. Combinando códigos fuentes provistos por openFoam™ y otros propios, se pueden generar ejecutables útiles para las simulaciones del problema reactivo en cuestión.

Si bien en el texto descriptivo de los casos de estudio que integran esta Tesis, ciertos resultados específicos y sus correspondientes conclusiones ya fueron analizadas y discutidas, aquí vuelven a ser referidos y se dan a conocer otros con el propósito de formular el conjunto de conclusiones finales a las que condujo la presente tesis.

## Capítulo 2: Descripción general de las técnicas numéricas

En este capítulo, se presentan descripciones de diversos tópicos de las técnicas numéricas utilizadas durante el desarrollo de la Tesis, tratando de exponer de forma sucinta y clara los aspectos más relevantes de cada una de ellas. Aun cuando el contenido de este capítulo no constituye un aporte original, se estima es de interés debido a que trata de presentar de manera puntual diferentes técnicas y esquemas incluidos en los códigos de cómputo utilizados, discutiendo sus propiedades, ventajas y desventajas. Por lo tanto, su contribución debe ser evaluada en términos de la información recopilada a partir de un gran número de fuentes consultadas durante el desarrollo de la Tesis.

## Capítulo 3: Combustión difusiva turbulenta

En la simulación de la combustión difusiva  $\text{CH}_4$  : Aire (tipo “free jet”), de baja velocidad y controlada por tasas finitas, las formas discretas de las ecuaciones de conservación (masa total, cantidad de movimiento, energía y fracciones de masa de las especies-reactantes y productos), los esquemas numéricos, las utilidades para preparar los datos y presentar los resultados, todos provistos por openFoam™, son utilizados para construir el ejecutable de las simulaciones. Ecuaciones de conservación no estacionarias y turbulentas según Favre, son usadas. La turbulencia se trata con el modelo  $k - \varepsilon$  y la interacción química-turbulencia con el concepto PaRS. Mecanismos globales de un paso, dos y hasta cuatro, han sido considerados al describir la oxidación del  $\text{CH}_4$ . Para garantizar la convergencia y exactitud de las soluciones en un flujo compresible de baja velocidad pero altas temperaturas, se emplea la técnica conocida como PISO [1]. La obtención de los términos fuentes en las ecuaciones de las especies, exige la integración de sistemas de ODEs *stiffs* y para asegurar la estabilidad del cálculo, el método numérico SIBS [2] ha sido seleccionado.

De la comparación entre resultados de las simulaciones numéricas y experimentales obtenidos con el *benchmark* llama D [1998-2007], se puede concluir que todos los mecanismos cinéticos simplificados propuestos ofrecen comportamientos aceptables en zonas de la llama “D” donde la difusión de las especies es determinante del proceso, mientras que en zonas donde la actividad química y por consiguiente el calor liberado son más intensos, se detectan importantes discrepancias (hasta un 18 % de diferencia entre la temperatura calculada y la experimental). Pareciera que en esta región de la llama, los modelos cinéticos simplificados no son suficientes para describir correctamente la actividad química y por ende, el proceso exotérmico. Téngase presente que un mecanismo de la oxidación del  $\text{CH}_4$  con aire necesitaría aproximadamente 53 especies y 800 reacciones elementales [3], para ser detallado adecuadamente. En cuanto concierne a las pérdidas por

radiación, es de indicar que las cinéticas químicas aquí empleadas no contemplan la formación de todos los emisores y por lo tanto, la emisividad desde la zona reactiva es de bajo impacto, aun con la hipótesis de que el medio es totalmente transmisor.

Según Marzouk et al. [4], los simples modelos cinéticos utilizados serían la razón principal de las diferencias entre simulaciones numéricas y experimentos. Es de esperar entonces, que con el uso de modelos cinéticos más realistas se dé un primer paso hacia la reducción de dichas diferencias. De no ser así, se tendría que comenzar a pensar en sustituir la metodología tradicional RANS por métodos basados en ecuaciones de transporte con distribuciones probabilísticas (*JPDF-Joint Probability Density Functions*). También habría que considerar que quizás métodos eulerianos convencionales como volúmenes finitos, podrían no ser apropiados y deberían usarse métodos estocásticos.

## Capítulo 4: Aplicaciones al flujo supersónico

El objetivo final de esta Tesis, es la simulación numérica de procesos fluido-dinámicos químicamente activos restringidos a detonaciones planas y bidimensionales. No obstante, estas simulaciones involucran una serie de aspectos típicos del flujo supersónico (ondas de choque, interfaces, superficies de contacto y deslizamiento, puntos triples, etc.). Por consiguiente, la selección de los esquemas numéricos a ser provistos para construir el ejecutable de las detonaciones, debe necesariamente basarse en esquemas aptos para simulaciones aplicables a un flujo supersónico ideal.

En los *solvers* del flujo supersónico se distinguen básicamente, dos enfoques: uno basado en la presión y el otro en la densidad. Los primeros se construyen en base al esquema numérico PISO extendido a fluidos compresibles y los segundos se caracterizan por pertenecer a una de las dos familias generalmente utilizadas para construir flujos numéricos, a saber: *flux difference splitting* y *flux vector splitting*. Los *solvers* de Riemann (por ej. ROE, HLLC), se incluyen en la primera familia y los esquemas AUSM+ (*Advection Upstream Splitting Method*) y los centrados de Kurganov, en la segunda. Esta categorización de los esquemas de Kurganov es apropiada ateniéndose a la propagación en ambas direcciones (*splitting*), de las ondas en la interfase entre celdas (Sección.4.3.6).

Todas las técnicas de solución son evaluadas mediante aplicaciones a distintos problemas típicos de la aerodinámica supersónica (perfil doble cuña, cuerpo romo 2D y axial simétrico, tomas de aire, etc.). Se comprobó que con excepción de la toma de aire, todas las técnicas consideradas pueden ofrecer resultados de calidad semejante. No obstante, los costos computacionales incluso con clusters de alto rendimiento, muestran que los esquemas centrados de Kurganov además de precisos son muy eficientes. El método PISO, si bien entrega buenos resultados, éstos se deterioran generando inestabilidades a medida que  $M_\infty \gg 1$ , además donde es aplicable, el costo computacional es excesivo si se lo compara con los esquemas de Kurganov.

Con la toma de aire, todas las metodologías pueden producir resultados de calidad comparable en cuanto concierne al flujo externo. No ocurre así en el conducto con flujo interno donde los esquemas cuyos flujos numéricos utilizan la librería de `dbnsFoam`, incluyendo el AUSM+, registraron resultados carentes de realidad física e inexplicables oscilaciones (se supuso que las ecuaciones de Euler son válidas). Considerando la problemática encontrada con la librería `dbns`, la inestabilidad del esquema PISO en flujos con fuertes efectos convectivos y vistos, la calidad de los resultados arrojados por el esquema de Kurganov y su destacada eficiencia computacional, se optó por extender su aplicación a los flujos químicamente activos detonantes.

## Capítulo 5: Detonaciones

En este capítulo, se presentan resultados de experimentos y soluciones numéricas de varios casos de prueba con los cuales se busca validar y/o verificar el código `rhoCentralRF` desarrollado. Como primer caso se seleccionan y verifican los modelos cinéticos químicos y se continúa con aplicaciones del código a problemas 1D exclusivamente fluido dinámicos, luego a la detonación plana. Con la detonación plana se introducen criterios para evaluar los tiempos de inducción considerados esenciales para definir la malla computacional. Se verifican dichos criterios con la detonación iniciada con un choque reflejado y la formación de la onda reactiva previa a su evolución como onda detonante. Por último se realizan simulaciones 2D con el propósito de evaluar la capacidad del código `rhoCentralRF` para predecir la estructura celular del proceso detonante en estudio. Se constata que el código desarrollado cumple con los requisitos computacionales necesarios para simular numéricamente detonaciones planas y 2D.

1. La mayoría de las simulaciones numéricas y de experimentos de procesos detonantes consideran dos clases de mezclas reactivas:  $H_2$  : Aire y  $H_2$  :  $O_2$  : Ar/ $N_2$ , con proporciones oxidante-combustible estequiométricas y otras. La mezcla  $H_2$  : Aire es una de las más utilizadas y por lo tanto, se disponen de numerosos resultados que pueden ser utilizados como referentes. De los estudios numéricos y experimentales realizados con mezclas combustibles que contienen Ar como diluyente, también se dispone de resultados que pueden ser aceptados como referentes, no obstante en su uso, se destaca la preferencia por las visualizaciones de la estructura celular de la detonación.

Los modelos cinéticos propuestos; Jachimowski (1988 y 1992) con 13 especies reactivas y 33 reacciones elementales, aplicable a la mezcla  $H_2$  : Aire y Marinov (1996) con 8 especies reactivas, 25 reacciones elementales y  $N_2$  considerado como diluyente, fueron verificados comparando con la solución de CJ (Chapman-Jouguet). En razón de su pobre comportamiento, el modelo Jachimowski (1988) es descartado. Con el modelo de Jachimowski (1992), se obtienen resultados de calidad comparable con los obtenidos por Marinov, no obstante se decide utilizar este último teniendo en cuenta dos ítems. En primer lugar, la evolución temporal de la temperatura desde el estado inicial al de equilibrio computada según Marinov, es la que mejor se ajusta a la solución de referencia Sección.5.10.3, y en segundo lugar, la necesidad de optimizar los tiempos de cómputo en prevención de la demanda computacional de los casos detonantes 2D. También se observa en la Fig. 5.12 (Sección.5.10.3) que con la cinética de Marinov, los tiempos de inducción valorados según el criterio 5% de incremento de la temperatura inicial, concuerdan muy satisfactoriamente con valores iniciales  $T < 1300K$ . A partir de tal coincidencia y la inconsistencia observada con el criterio basado en el valor máximo de OH, se decide extrapolar la validez del criterio 5% al rango de temperaturas iniciales  $1300K \leq T \leq 2500K$ . Este criterio, también es aplicable a los tiempos de inducción para la mezcla  $H_2$  : Aire. El tiempo de inducción guarda una intrínseca relación con la resolución de la malla computacional necesaria para capturar los múltiples detalles conducentes a la formación y propagación de la onda detonante.

2. El funcionamiento del ejecutable desarrollado y denominado `rhoCentralRF` (RF implica Tasa Finitas de Reacción), es verificado desde el punto de vista fluido dinámico simulando numéricamente dos problemas: un tubo de choque con diferentes especies (Sec. 5.11.1), y la generación y propagación de una detonación plana (Sec. 5.11.2). El tubo de choque contiene únicamente nitrógeno, pero a los fines del cálculo los gases del *driver* y *driven* se etiquetan con diferentes nombres y el código, debe resolver una ecuación adicional de conservación de especie. La presentación de los resultados confirma que la simulación numérica se efectúa

de forma apropiada y que los resultados obtenidos muestran una muy buena aproximación a la solución exacta del problema.

Verificado el buen desempeño del código rhoCentralRF con especies químicamente neutras, se decidió realizar la simulación numérica de la detonación plana con la mezcla combustible  $H_2$  : Aire en proporciones estequiométricas. Se utilizaron los modelos cinéticos de Jachimowski (1988 y 1992), Marinov y Flow-Two [5]. De la comparación de resultados entre los tres modelos se puede concluir que con excepción del modelo de Jachimowski (1988), todos los otros describen comportamiento similares de las variables termo-físicas, de las especies reactantes y de las que son producto de la combustión inducida por la onda detonante. Las discrepancias en que incurre el modelo cinético de Jachimowski (1988), confirman la decisión previa de su prescindencia.

3. Con condiciones adecuadas de la fuente de ignición siempre puede generarse una detonación plana *overdriven* tal que  $D/D_{CJ} > 1$ , siendo  $D_{CJ}$  la velocidad de propagación de la detonación según Chapman-Jouguet (CJ). También se verifica que de no mediar fuentes de ignición muy particulares [5], la velocidad de propagación de la detonación “overdriven” siempre converge hacia la de CJ.

Cuando se excede la condición de CJ, la onda detonante es calificada como fuerte y el modelo ZND sería aplicable. Previa determinación del número de celdas a utilizar en la malla computacional (10000 por metro), se procede con la simulación numérica del modelo ZND. Sus resultados son presentados utilizando las variables  $u+a$  y  $p$  vs.  $x$ , siendo:  $u$  la velocidad del fluido detrás de la onda,  $a$  la velocidad del sonido de productos de la mezcla reactiva,  $p$  la presión y  $x$ , la distancia recorrida por la detonación desde su iniciación. Este gráfico, característico del modelo ZND, permite identificar el punto de CJ y donde supuestamente se alcanzarían condiciones de equilibrio (en el caso aquí expuesto, aproximadamente 0.066 m desde el pico de von Neumann). No obstante, las composiciones de equilibrio calculadas con el programa CEA [6] y con rhoCentralRF, muestran discrepancias importantes en algunas especies (por ejemplo H y O), que sugieren que todavía no se ha alcanzado el equilibrio. Se necesita agregar otra zona cuya actividad química será menos intensa que la de reacción (inmediatamente después de la zona de inducción), pero suficiente para formar un nuevo estado de equilibrio.

En esta sección se incluyen diagramas  $x$  vs.  $t$ , que representan detonaciones planas inducidas por una fuente 100% productos de combustión de la mezcla  $2H_2$  :  $O_2$  :  $7Ar$  y por otra 100% He, ambas con presión y temperatura iniciales de 1.5 Mpa y 3800K, respectivamente. Con el He, se logra diferenciar muy claramente hasta donde se expande la fuente de ignición y luego, permanecer prácticamente estacionaria.

4. El caso de una onda de choque móvil que se desplaza por un conducto que contiene una mezcla combustible sin producir la ignición, pero al reflejarse desde un extremo cerrado genera una onda de choque que tras de sí eleva la temperatura y la presión hasta producir la ignición de la mezcla reactiva, es simulado numéricamente con la variante 1D de rhoCentralRF. La simulación verifica el muy buen funcionamiento del solver. El tiempo de inducción, calculado en base al criterio del 5% de incremento de la temperatura inicial y la ubicación temporal del pico de presión que identifica la formación de la onda reactiva por la autoignición de la mezcla, concuerdan muy satisfactoriamente con los datos de referencia, no obstante ser diferentes las cinéticas químicas. Se visualiza el proceso de transición de la onda reactiva a una detonación que se propaga en sentido contrario al desplazamiento de la mezcla sin quemar.
5. Finalmente se desarrollan simulaciones numéricas 2D mediante las cuales se pretende validar y/o verificar el código rhoCentralRF en lo que respecta a su capacidad para predecir

la estructura celular. Para esto se selecciona la mezcla  $H_2 : O_2 : 7Ar$ , en razón de que esta mezcla ha sido utilizada en numerosos estudios sobre detonaciones 2D considerados *benchmarks*. Como caso de referencia se selecciona el presentado por Kirillov [7], dado que el estudio aquí presentado y el de Kirillov utilizan el modelo cinético de Marinov (1996). Se comprueba que el código `rhoCentralRF` capta el sistema de ondas inicial, la estructura celular temprana según Kirillov, y la evolución a una probable estructura lejana estacionaria similar a la presentada por Oran, Lefebvre y Eckett [8–11]. Mediante el uso de un Schlieren numérico (Fig. 5.40), se pueden identificar las ondas que interactúan y dan origen a los puntos triples y como sus desplazamientos con el tiempo definen el contorno de las células. Son de destacar los buenos resultados obtenidos y las capacidades con las que cuenta actualmente el *solver* `rhoCentralRF`. No obstante, se analizan dificultades inherentes al elevado costo computacional de las simulaciones numéricas, aún utilizando el entorno paralelo del cluster Mendieta y se decide priorizar la incorporación del mallado adaptivo en el código.

El código `rhoCentralRF` muestra una adecuada convergencia espacial y temporal lo cual es importante en el contexto numérico. En el anexo Apéndice B se presentan resultados que destacan el buen rendimiento del código desde el punto de vista de la utilización del cluster Mendieta. Este aspecto, de especial relevancia para las simulaciones de procesos reactivos con tasas finitas, resalta la calidad del código desarrollado. Aunque se probó únicamente con simulaciones 1D y 2D, el código no presentaría limitaciones geométricas.

## Aportes de la tesis

- Si bien, el capítulo 2 por sí sólo no representa un aporte original debido a que en su mayoría reproduce información de fuentes conocidas. Es de hacer notar que en el momento en que se redactó, la documentación relacionada con las técnicas numéricas incluidas en `openFoam`<sup>TM</sup> era muy dispersa, y en ese sentido con la redacción de este capítulo se pretende contribuir a la documentación disponible en castellano referente a aspectos teóricos relacionados con el paquete de libre acceso `openFoam`<sup>TM</sup>.
- El capítulo 3 aborda la simulación de una llama difusiva en flujo turbulento. Los resultados encontrados no fueron del todo satisfactorios (verificación de predicciones con el *benchmark flame D*), no obstante, se mostró la modalidad de trabajo utilizando la estructura de datos del paquete numérico `openFoam`<sup>TM</sup> para desarrollar simulaciones de flujos químicamente activos utilizando el algoritmo PISO, acoplando modelos cinéticos con distintos grados de complejidad, incluyendo los efectos de la turbulencia en los procesos reactivos por medio del concepto del reactor parcialmente mezclado e induciendo la ignición por llama piloto. Cabe mencionar que no hay otros estudios realizados con el paquete `openFoam`<sup>TM</sup> en llamas difusivas, que utilicen los modelos cinéticos aquí considerados.
- Las simulaciones desarrolladas en el capítulo 4 para flujos supersónicos se llevaron a cabo mediante dos familias de métodos: *flux difference splitting* y *flux vector splitting*. Una de las falencias del código `openFoam`, es el casi nulo desarrollo en el campo de flujos con alto número de Mach, no obstante, a mediados de 2014 fue liberada la librería `dbnsFoam` (*dbns: density based Navier-Stokes*), ésta ofrece una exclusiva estructura de datos que posibilita la implementación de diferentes técnicas numéricas basadas en densidad re-utilizando parte del núcleo del paquete. Dicha librería fue liberada, pero se conocen muy pocos trabajos que analicen su desempeño para abordar problemas de la aerodinámica supersónica, por lo tanto, los procedimientos de validación y verificación desarrollados en el capítulo 4 contribuyen a

este fin. Por otro, lado el flujo numérico AUSM+ no fue distribuido por defecto con dicha librería, este último fue adaptado e implementado para los fines de dicho capítulo.

El paquete de simulación también ofrece otras alternativas basadas en sus librerías estándar para la simulación de flujos compresibles, los *solvers* `\rhoCentralFoam` y `sonicFoam`, sin embargo, estos sufren de la misma carencia en resultados de validación y verificación que los incluidos en `dbnsFoam`. En este capítulo, se aplicaron todos los *solvers* listados anteriormente para la simulación de problemas típicos de la aerodinámica supersónica, consiguiéndose verificar el buen funcionamiento de algunos y encontrando problemas en otros<sup>1</sup>.

Los esquemas de Kurganov resultan ser una alternativa interesante desde distintos puntos de vista a los tradicionales esquemas basados en *solvers* de Riemann, utilizados para computar los flujos numéricos asociados a la discretización de los términos convectivos de las ecuaciones de Navier-Stokes. También en el capítulo 4 se incluye un análisis del desempeño de estos esquemas en `openFoam`<sup>TM</sup>, evaluando su comportamiento y precisión en las soluciones obtenidas para los diferentes problemas supersónicos considerados. Este tipo de estudios, al menos en el entorno de trabajo del paquete `openFoam`<sup>TM</sup>, no son muy comunes, y en ese sentido es otro aporte.

El objetivo final de la tesis fue generar un nuevo *solver* utilizando la estructura de datos de `openFoam`<sup>TM</sup> que permita simular procesos detonantes. Para satisfacer este objetivo, era necesario considerar diferentes aspectos en el diseño del algoritmo. Se debía contar con una técnica numérica que fuera capaz de capturar con apropiada calidad las ondas presentes en el campo de flujo agregando la mínima difusión numérica posible además, era necesario incluir al esquema de solución fluido dinámico los efectos de las reacciones químicas con una correcta evaluación de los términos fuentes necesarios y finalmente, pensando en las simulaciones en más de una dimensión, buscar la reducción del costo computacional. En vista de que no se registran aplicaciones de los esquemas de Kurganov en el campo de las detonaciones, se propuso adaptar e implementar estos en un nuevo *solver* (el cual se denominó `\rhoCentralRF`) que permita simular flujos reactivos con altas velocidades, y por ende procesos detonantes. Este objetivo fue logrado y se obtuvo el mencionado *solver*, al cual se le acoplaron tres modelos cinéticos para la combustión de mezclas hidrógeno-aire-argón. Luego de implementado el nuevo *solver*, se verificó y validó la implementación de los modelos químicos considerando el proceso de manera independiente vía simulaciones a volumen constante. Luego, se desarrollaron diferentes casos de validación y verificación con detonaciones planas, para finalmente abordar el problema de determinar con simulaciones bidimensionales la estructura celular típica de un proceso detonante. Se consiguieron soluciones de calidades comparables a las obtenidas con otros métodos tradicionales. También se incluyó un breve estudio del rendimiento computacional de `\rhoCentralRF` en el entorno de alto desempeño del *cluster* Mendieta, el cual mostró que el código satisface los requisitos necesarios (escalamiento lineal: a mayor utilización de nodos, mayor velocidad de cómputo).

No se puede dejar de mencionar que, pese a que aquí se utilizó a `\rhoCentralRF` únicamente para estudiar procesos detonantes, este *solver* dadas sus prestaciones, puede ser empleado en otros campos de estudio, por ejemplo, simulaciones de flujos hipersónicos. Además teniendo en cuenta su diseño modular, la continuación en su desarrollo será la incorporación de viscosidad molecular como paso previo a la consideración de la turbulencia. Se pretende así, desarrollar un código que resuelva las ecuaciones de Navier-Stokes con turbulencia y actividad química.

---

<sup>1</sup>Los *solvers* provistos por `openFoam`<sup>TM</sup> que presentaron dificultades produjeron buenos resultados al ser implementados con otros paquetes (no de libre acceso).

## Trabajo futuro

En lo que respecta a la simulación de llamas difusivas, la inclusión de modelos cinéticos más elaborados para la combustión metano aire, es el paso lógico en busca de mejorar el nivel de aproximación de las soluciones numéricas a los datos experimentales. En primera instancia se usaría el modelo cinético detallado de Westbrook [12] o el propuesto por Smooke [13], para luego progresar al GRIMech [14].

El siguiente paso será la implementación del mallado adaptivo al código `rhoCentralRF` haciendo uso de las librerías provista por `openFoam™`, definiendo métricas adecuadas y en función del tipo de problema que se considere. Para aplicaciones de la aerodinámica supersónica e hipersónica dichas métricas deben definirse con el propósito de mejorar la captura de las ondas presentes en el campo de flujo. Para la simulación de detonaciones, las métricas no sólo deben estar relacionadas con la resolución del frente, sino también con la actividad química (en particular la longitud de inducción).

Incorporar efectos químicos en la simulación de problemas de la aerodinámica hipersónica. Se utilizarán modelos aptos para describir el estado de equilibrio termoquímico y también modelos cinéticos para procesos reactivos típicos de flujos con alta entalpía. Dichos modelos serán incorporados a una versión ad-hoc de `rhoCentralRF`.

También resulta importante incorporar efectos turbulentos y difusivos al código desarrollado. En cuanto al modelado de la turbulencia, su acoplamiento se hará mediante una librería dinámica que permitirá seleccionar el modelo más conveniente al problema en consideración. Para los procesos detonantes se propone inicialmente, aplicar el modelo  $k-\omega$  de Menter [15], realizar estudios sobre las interacciones entre detonaciones y estructuras turbulentas, y evaluar su impacto en la formación y configuración de las estructuras celulares [16]. Se continuarán aplicando las hipótesis difusivas clásicas de los gradientes, previa aceptación de valores adecuados para los números de Prandtl y Schmidt turbulentos. La interacción química-turbulencia continuará siendo modelada en base al concepto PaSR (Partially Stirred Reactor). Se buscará mejorar la calidad de las imágenes que se obtienen con el Schlieren numérico al ser utilizado con el mallado adaptivo.

## Referencias

- [1] **R. Issa**, *Solution of the implicitly discretised fluid flow equations by operator-splitting*, *Journal of Computational Physics*, vol. 62(1):pp. 40 – 65, 1986.
- [2] **G. Bader** y **P. Deuffhard**, *A semi-implicit mid-point rule for stiff systems of ordinary differential equations*, *Number. Math*, vol. 41:pp. 373–398, 1983.
- [3] **S. McAllister**, **J. Y. Chen**. y **A. C. F. Pello**, *Fundamental of Combustion Processes*, Mechanical Engineering Series - Springer Science+Business Media, LLC 2011, 2011.
- [4] **O. A. Marzouk** y **E. D. Huckaby**, *A comparative study of eight finite-rate chemistry kinetics for CO/h<sub>2</sub> combustion*, *Engineering Applications of Computational Fluid Mechanics*, vol. Vol. 4(No. 3):pp. 331–356, 2010.
- [5] **J. P. Tamagno**, **S. A. Elaskar** y **J. O. García**, *A numerical study of planar detonations*, *Latin American applied research*, vol. 42(2):pp. 161–166, 2012.

- [6] **B. J. McBride** y **S. Gordon**, *Computer program for calculation of complex chemical equilibrium compositions and applications: Ii. users manual and program description*, NASA reference publication, vol. 1311:pp. 84–85, 1996.
- [7] **I. Kirillov**, **M. Strelkova**, **A. Panasenکو** y **D. Roekaerts**, *Sensitivity to detonation and detonation cellular structure of  $\text{H}_2\text{-O}_2\text{-air-H}_2\text{O}_2$  gas mixtures*, in First International Conference on Hydrogen Safety, Pisa, Italy, pp. 8–10, 2005.
- [8] **E. S. Oran**, **J. W. Weber**, **E. I. Stefaniw**, **M. H. Lefebvre** y **J. D. Anderson**, *A numerical study of a two-dimensional  $\text{H}_2\text{-O}_2\text{-air}$  detonation using a detailed chemical reaction model*, *Combustion and Flame*, vol. 113(1):pp. 147–163, 1998.
- [9] **M. Lefebvre**, **J. Weber** y **E. Oran**, *Numerical simulations of a marginal detonation: Wave velocities and transverse wave structure*, in IUTAM Symposium on Combustion in Supersonic Flows, pp. 347–358, Springer, 1997.
- [10] **M. Lefebvre** y **E. Oran**, *Analysis of the shock structures in a regular detonation*, *Shock Waves*, vol. 4(5):pp. 277–283, 1995.
- [11] **C. A. Eckett**, Numerical and analytical studies of the dynamics of gaseous detonations, Ph.D. thesis, Citeseer, 2000.
- [12] **C. Westbrook**, *Applying chemical kinetics to natural-gas combustion problems. annual report, september 1984-august 1985*, Tech. rep., Lawrence Livermore National Lab., CA (USA), 1985.
- [13] **J. Chomiak**. y **A. Karlsson**, *Formulation of the premixed and non-premixed test problems, chapter 1 of reduced kinetic mechanisms and asymptotic approximations for methane air flames*, *Lecture Notes in Physics*, 1990.
- [14] **G. P. Smith**, **D. M. Golden**, **M. Frenklach**, **N. W. Moriarty**, **B. Eiteneer**, **M. Goldenberg**, **C. T. Bowman**, **R. K. Hanson**, **S. Song**, **W. C. Gardiner Jr et al.**, *Gri-mech 3.0*, URL: [http://www.me.berkeley.edu/gri\\_mech](http://www.me.berkeley.edu/gri_mech), vol. 51:p. 55, 1999.
- [15] **F. R. Menter**, *Two-equation eddy-viscosity turbulence models for engineering applications*, *AIAA journal*, vol. 32(8):pp. 1598–1605, 1994.
- [16] **L. Massa**, **M. Chauhan** y **F. Lu**, *Detonation–turbulence interaction*, *Combustion and Flame*, vol. 158(9):pp. 1788–1806, 2011.



# Apéndice A

## Escalamiento de rhoCentralRF en el cluster Mendieta

Se presenta un breve estudio de escalamiento del *solver* desarrollado rhoCentralRF en el entorno paralelo del cluster Mendieta del centro de computación de alto desempeño de la universidad nacional de córdoba. Se realiza un análisis de los escalamientos débil y fuerte del código en la simulación de un problema de propagación de ondas detonantes.

Se consideran los arreglos *capacity* y *capability*. El arreglo *capacity* está equipado con 8 nodos Intel Xeon E5-2680 de 8 cores cada uno a 2.7 GHz y 64 GiB DDR3 a 1333 MHz y el *capability* con 14 nodos de 2 procesadores Intel Xeon E5-2680 v2 de 10 cores cada uno a 2.8 GHz y 64 GiB DDR3 a 1600 MHz.

El estudio del escalamiento débil se desarrolla en el arreglo *capacity* y el fuerte en *capability* tomando como caso de prueba un problema de una detonación plana en una mezcla H<sub>2</sub> – aire.

### Escalamiento fuerte

Se define como escalamiento fuerte cuándo se evalúa el rendimiento del código manteniendo constante el tamaño del problema y variando la cantidad de procesadores utilizados. Como métrica para medir este escalamiento se utiliza el *speedup* ( $S_u$ ) el cual se determina:

$$S_u(N, K) = \frac{T(N, K_r)}{T(N, K)} \quad (\text{A.1})$$

donde  $N$  es el tamaño del problema,  $K$  el número de procesadores y  $K_r$  el número de procesadores de referencia. El caso se desarrolla empleando una malla con 530000 celdas y debido a que no se cuenta con una solución obtenida secuencialmente, se toma como tiempo de referencia el obtenido con 10 procesadores  $T(N, K_r) = 58678.0$ . Para cada una de las simulaciones se obtienen los datos mostrados en Tab. A.1 En la Fig. A.1 se muestra el *speedup*, se observa que rhoCentralRF presenta un escalamiento fuerte lineal. Esto quiere decir que al aumentar el número de procesadores se obtiene un aumento en la velocidad del cómputo, dicho comportamiento es de fundamental importancia desde el punto de vista computacional debido a que deja expuesta la eficiencia del código en entornos de cómputo de alto desempeño.

Número de procesadores ( $K$ )	10	20	40	90
clockTime	58678	31693	15884	7448
Cómputo total <sup>1</sup>	586780	633860	635360	670320

Tabla A.1: Tiempos de cómputo, cómputo total y número de procesadores test de escalamiento fuerte en el arreglo *capability* del cluster Mendieta de la UNC

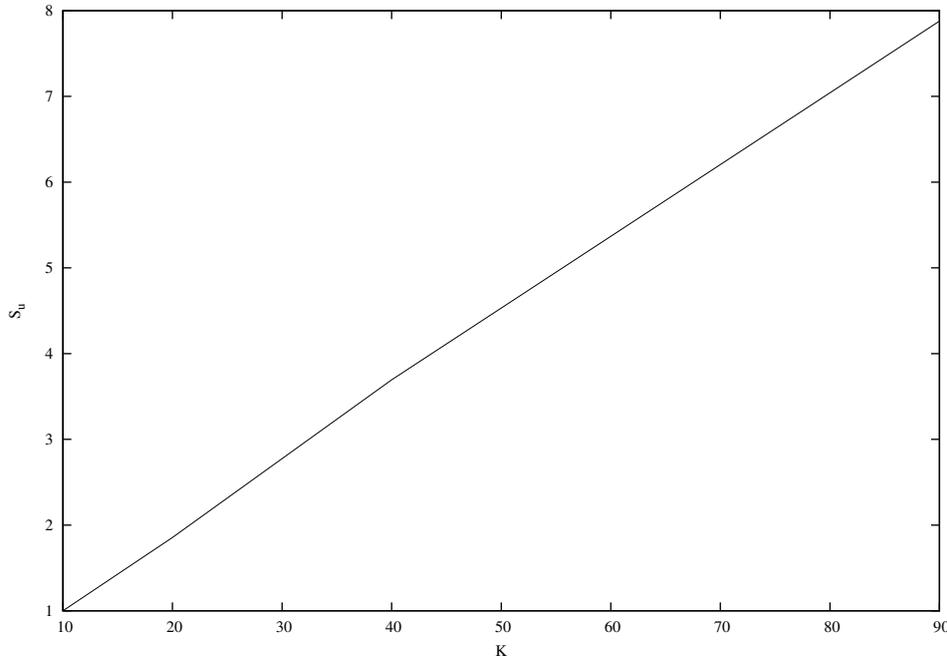


Fig. A.1: *Speedup* de rhoCentralRF en el arreglo *capability* del cluster Mendieta de la UNC

## Escalamiento débil

Para medir el escalamiento débil se utiliza como métrica al *sizeup*, este mide el comportamiento del código ante la variación del tamaño del problema y el número de procesadores. El *sizeup* ( $s_u$ ) está dado por:

$$s_u = \frac{N(K) T^{seq}(N(1), 1)}{N(1) T^{par}(K, K)} \quad (\text{A.2})$$

En vista de que no se cuenta con una solución secuencial se utiliza como referencia la computada con 4 procesadores, por lo tanto se tiene:

$$s_u = \frac{N(K) T^{seq}(N(4), 4)}{N(4) T^{par}(K, K)} \quad (\text{A.3})$$

El arreglo *capacity* de Mendieta permite utilizar hasta un total de 16 procesadores, por lo que para desarrollar este *test* se consideran cómputos desarrollados en 4, 8 y 16 procesadores con mallas de 1620, 3240 y 6480 celdas respectivamente. Los tiempos de cómputo registrados se pueden ver en

procesadores	clockTime	Cantidad de celdas
4	7157	1620
8	7013	3240
16	15163	6480

Tabla A.2: Número de procesadores, tiempos de cómputo y tamaños de malla para el test de escalamiento débil (arreglo *capacity*)

La Fig. A.2 muestra los resultados del *sizeup*, se observa que de nuevo se consigue escalamiento lineal.

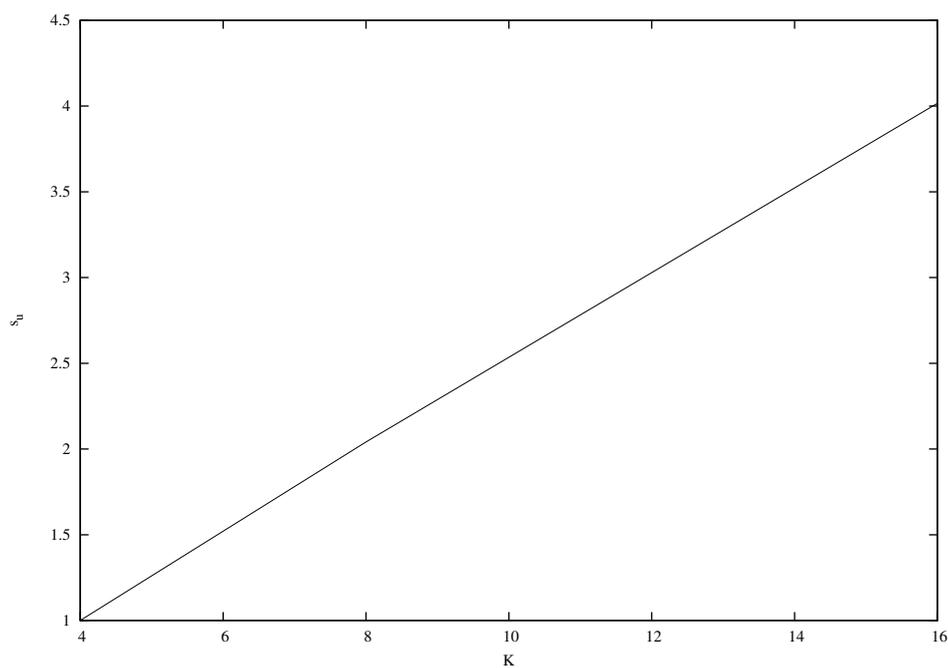


Fig. A.2: *Sizeup* de rhoCentralRF en el arreglo *capacity* del cluster Mendieta de la UNC

Lo expuesto en este apéndice muestra que rhoCentralRF satisface los requerimientos de escalamiento al encontrarse características adecuadas de *speedup* y *sizeup*.



# Apéndice B

## Discretización las ecuaciones en openFoam™

openFoam™ implementa un método de alto nivel para tratar la discretización de las ecuaciones. En esta apéndice se pretende dar una breve introducción al mismo. Dicho procedimiento se considera crucial puesto que relaciona de forma clara las ecuaciones de gobierno con su contraparte computacional.

### B.0.9. Escritura de las ecuaciones

Una de las características más atractivas de openFoam™ es la programación de alto nivel que utiliza, uno de los aspectos más interesantes es lo que sus creadores denominaron *equation mimic*. La cual a los fines de este trabajo se traducirá como **mímica de la ecuación**. La mímica de la ecuación es la forma en la cual se escriben las ecuaciones de gobierno dentro del *software*, esta forma de escritura implementa todas las técnicas de discretización y solución introducidas en el Cap. 2. Resulta conveniente utilizar la ecuación de la conservación de momento para el caso viscoso e incompresible con la finalidad de introducir este concepto.

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{U}\mathbf{U}) - \nabla \cdot (\nu \nabla \mathbf{U}) = \nabla \cdot \mathbf{p}_\rho \quad (\text{B.1})$$

En la Ec. B.1,  $p_\rho$  es la presión normalizada por la densidad y  $\nu$  es el coeficiente de viscosidad cinemática. En openFoam™ esta ecuación se puede escribir en la forma mostrada en el Código B.1.

```
fvVectorMatrix UEqn
(
    fvm::ddt(U)
  + fvm::div(phi, U)
  - fvm::laplacian(nu, U)
);
solve(UEqn == -fvc::grad(p));
```

Código B.1: Ecuación de momento para un fluido viscoso e incompresible escrita dentro de openFoam™

Aquí resulta interesante detenerse un momento y analizar la clara correspondencia entre la ecuación de gobierno y su implementación :

- $\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} \rightarrow \mathbf{ddt}(\mathbf{U})$
- $\nabla \cdot (\mathbf{U}\mathbf{U}) \rightarrow \mathbf{div}(\mathbf{phi}, \mathbf{U})^1$
- $\nabla \cdot (\nu \nabla \mathbf{U}) \rightarrow \mathbf{laplacian}(\nu, \mathbf{U})$
- $\nabla \cdot \mathbf{p}_\rho \rightarrow \mathbf{grad}(p)$

Como se observa, openFoam™ implementa en forma muy conveniente los operadores primera derivada temporal, divergencia, laplaciano<sup>2</sup> y gradiente a nivel discreto<sup>3</sup>. Se identifican también las palabras reservadas `fvVectorMatrix`, `fvm`, `fvc` y `solve`. En lo que respecta a la palabra reservada `fvVectorMatrix` ésta representa a un objeto de la clase `fvMatrix` el cual se encarga de ensamblar la matriz que representa a la ecuación de momento en forma discreta, donde es importante tener en cuenta que en virtud de la naturaleza vectorial de la ecuación diferencial de momento ésta también será representada en forma vectorial a nivel discreto, en consecuencia la matriz ensamblada al utilizar dicho objeto tendrá en cuenta a tantos componentes de la velocidad como se hayan dispuesto en la dimensionalidad del problema.

Las espacios de nombres `fvm` y `fvc` hacen referencia respectivamente a *finite volume method* y *finite volume calculus*, puntualmente `fvm` define objetos que permiten discretizar de forma implícita a los diferentes operadores (gradiente, divergencia, laplaciano, rotacional, etc), es decir que al utilizar miembros de esta clase su contribución ira directamente a la matriz del sistema. Por otro lado `fvc` discretiza los operadores de forma explícita, con lo cual su contribución se vera reflejada en el vector de términos fuentes.

Finalmente el objeto `solve` de la clase `fvMatrix` soluciona al sistema de ecuaciones proveniente de la discretización utilizando para esto el método de solución seleccionado en tiempo de ejecución. Sin embargo, la programación de alto nivel presente en openFoam™ no termina aquí, otro punto a destacar es que los distintos esquemas de discretización para cada uno de los términos de las ecuaciones de gobierno pueden ser seleccionados también en tiempo de ejecución y de forma individual, es decir que brinda la posibilidad de elegir el esquema de discretización más apropiado de acuerdo a la naturaleza del problema a resolver y al término considerado sin la necesidad de efectuar de nuevo el proceso de compilación.

### B.0.10. Selección de los esquemas de discretización

La forma en que se seleccionan los esquemas de discretización se introduce tomando de nuevo como referencia la Ec. B.1. De acuerdo a su versión discreta y atendiendo a lo expuesto en la Sección.B.0.9, el término temporal, convectivo y difusivo se discretizan de forma implícita y el

<sup>1</sup>phi representa al flujo convectivo (ver Sección.2.4.3).

<sup>2</sup>Es importante hacer notar que la implementación del laplaciano corresponde a  $\nabla \cdot (\nu \nabla \mathbf{U})$ , lo que en el caso de  $\nu$  constante se reduce efectivamente al laplaciano propiamente dicho ( $\nu \nabla^2 \mathbf{U}$ ), sin embargo la implementación de este operador dentro de openFoam™ no está restringida al caso  $\nu$  constante. Esto quiere decir que puede ser utilizado incluso en los casos donde este coeficiente no resulta constante.

<sup>3</sup>Aquí se mencionan sólo algunos de los operadores disponibles, para más detalles se recomienda el manual usuario de openFoam™

gradiente de presión de forma explícita. De acuerdo a esto, una selección válida de esquemas de discretización para esta ecuación se observa en la Lista de entrada 2.2 .

```

ddtSchemes
{
    default Euler;
}
gradSchemes
{
    default Gauss linear;
    grad(p) cellLimited Gauss linear 1;
}
divSchemes
{
    default none;
    div(phi ,U) Gauss linear;
}
laplacianSchemes
{
    default none;
    laplacian(nu ,U) Gauss linear corrected;
}

```

Lista de entrada B.2: Esquemas de discretización para la ecuación de momento

Lo primero que se observa es la selección del esquema de discretización temporal, el cual en este caso corresponde al esquema de Euler implícito. Nótese que para su definición se utiliza la palabra `default` lo que quiere decir que para todos los términos temporales de las ecuaciones consideradas se utiliza el mismo esquema de avance temporal (la selección de los esquemas se puede hacer de forma independiente escribiendo el término de la ecuación y frente a éste el esquema a utilizar). Tal como se puede ver, en este caso el esquema por defecto para tratar cualquier gradiente será el esquema lineal (centrado), sin embargo, el gradiente de presión se evalúa utilizando el esquema centrado aplicando limitación en el sentido expresado en la Sección.2.4.7.

En la discretización de los términos convectivos aparece la palabra `none` esto quiere decir que se deben proporcionar los esquemas de discretización para cada uno de los términos convectivos de cada una de las ecuaciones (es decir no se proporciona un esquema por defecto). Puesto que en este caso sólo se requiere discretizar al término  $\nabla \cdot (\mathbf{UU})$ , únicamente aparecerá la selección del esquema para dicho término. Finalmente, la selección de los esquemas de discretización para los términos difusivos resulta similar a las descritas hasta el momento.

### B.0.11. Selección de los métodos de solución y configuración del algoritmo PISO

Tal como se describió en (Sección.2.5), openFoam™ cuenta con distintos métodos iterativos para la solución del sistema de ecuaciones proveniente de la discretización, esto permite seleccionar el más apropiado dependiendo del caso en cuestión. La forma de elegir dichos métodos iterativos resulta análoga a la selección de los esquemas de discretización. A fin de introducir dicha metodología de forma apropiada en esta ocasión se suma a la ecuación de momento (Ec. B.1),

la ecuación para la presión para un flujo incompresible. La cual resulta de tomar la divergencia a la ecuación de momento y tener en cuenta la restricción cinemática impuesta por la ecuación de continuidad ( $\nabla \cdot \mathbf{U} = 0$ ).

$$\nabla^2 \cdot ((a_p)^{-1} p) = \nabla \cdot ((a_p)^{-1} \mathbf{H}(\mathbf{U})) \quad (\text{B.2})$$

Nótese que  $(a_p)^{-1} \mathbf{H}(\mathbf{U})$  es el flujo convectivo. Como se puede ver en Ec. B.2 la discretización de esta ecuación involucra un término convectivo y uno difusivo, el cual por lo general se discretiza utilizando el esquema centrado. En este caso puesto que se consideran dos ecuaciones una para las velocidades (ecuación de momento) y otra para la presión, se debe seleccionar el método de solución para cada sistema discreto que representa a dichas ecuaciones y la configuración para el algoritmo PISO que resulte apropiada. Una selección válida de dichos métodos de solución se puede ver en Lista de entrada B.3.

```

1 solvers {
2
3   p
4   {
5       solver          PCG;
6       preconditioner  DIC;
7       tolerance       1e-05;
8
9   };
10
11  U
12  {
13      solver          PBiCG;
14      preconditioner  DILU;
15      tolerance       1e-05;
16  };
17 }
18
19 PISO
20
21 {
22   nCorrectors          2;
23   nNonOrthogonalCorrectors 0;
24 }
```

Lista de entrada B.3: Selección de los algoritmos iterativos de solución

De esta forma se selecciona para cada sistema discreto un método de solución y un preconditionador de los descritos en la Sección.2.5, además se establece la tolerancia para el proceso iterativo<sup>4</sup>. También se puede observar que se seleccionaron dos pasos de corrección para el algoritmo PISO y ningún corrector de ortogonalidad.

<sup>4</sup>La tolerancia impuesta estipula que al alcanzarse residuos de dicho orden el proceso iterativo de solución se dara por concluido.

## B.1. Unidades en openfoam™

El paquete de simulación está diseñado para revisar la consistencia dimensional entre las variables involucradas en el cálculo. Soporta tanto el sistema de unidades internacional (SI) como el anglosajón (USCS). La definición de la unidad asociada a una cantidad de la cual previamente se ha definido su tipo (escalar, vector, tensor) se lleva a cabo por medio de la declaración del nombre de la variable seguida de un par de paréntesis rectos [ ] dentro de los cuales se definen las potencias respectivas de las unidades involucradas, en donde el orden de entrada (No) corresponde al mostrado en la Tab. B.1 y a su vez identifica a cada una de las unidades básicas que definen a la unidad de la propiedad en consideración.

No	Propiedad	SI	USCS
1	Masa	kg (kilogramo)	lbm (libra)
2	Longitud	m (metro)	ft (pie)
3	Time	s (segundo)	
4	Temperatura	K (Kelvin)	°R
5	Cantidad de sustancia	Kmol (kilomol)	lbmol (libramol)
6	Corriente	A (Amperio)	
7	Intensidad luminosa	Cd (candela)	

Tabla B.1: Unidades utilizadas en openfoam™

A modo de ejemplo a continuación se muestran dos casos habituales:

1. Definir el conjunto de unidades a utilizar en un campo involucrado en la simulación.

Considérese que se debe definir el conjunto de unidades de la presión para la simulación de un patrón de flujo compresible ( $\text{Pa} \rightarrow \text{kg m}^{-1}\text{s}^2$ ).

la línea correspondiente a las unidades respectivas resulta:

```
dimensions [1 -1 -2 0 0 0 0]
```

2. Definir el conjunto de unidades para una propiedad de transporte.

Supóngase que se debe definir el conjunto de unidades para el calor específico a presión constante ( $C_p$ ) cuyas unidades de en el sistema internacional son  $\text{J}/\text{kg K} \rightarrow \text{m}^2 \text{s}^{-2} \text{K}^{-1}$ . En concordancia la definición de las unidades en este caso será:

```
Cp [0 2 -2 -1 0 0 0 ] 1004.5
```

Esta característica resulta conveniente debido a que una inconsistencia dimensional generará un error ya sea en la etapa de compilación o en tiempo de ejecución y así asegurará que los resultados sean consistentes en este sentido. Es importante mencionar que en este trabajo se utilizan por defecto las unidades del sistema internacional.