
Simulación de Flujos Compresibles con openFoamTM

por:

Luis F. Gutiérrez Marcantoni

Directores:

Dr. José P. Tamagno

Dr. Sergio A. Elaskar

TESIS PRESENTADA COMO REQUISITO PARCIAL PARA LA
OBTENCIÓN DEL TÍTULO DE MAGÍSTER EN CIENCIAS DE
LA INGENIERÍA-MENCIÓN AEROSPACIAL

UNIVERSIDAD NACIONAL DE CÓRDOBA
INSTITUTO UNIVERSITARIO AERONÁUTICO



19 de Agosto de 2013

Agradecimientos

Al Dr. José P. Tamagno por su constante asesoramiento, motivación e interminable paciencia para discutir los aspectos teórico-prácticos de este trabajo. De igual forma al Dr. Sergio A. Elaskar por su permanente guía y sus acertadas sugerencias en momentos precisos; y además por la confianza que deposito en mi al brindarme la oportunidad de incursionar en el campo de la investigación.

También quiero agradecer a mis compañeros becarios del departamento de Aeronáutica de la Universidad Nacional de Córdoba, por su apoyo y espíritu de mutua colaboración, sin lo cual la ejecución de este trabajo hubiera sido mucho menos amena. En especial quiero agradecer al Ing. Luis Mario Soria, con quien compartimos los avances continuos en el campo de la implementación en el ámbito de openfoamTM.

Al CONICET por la beca otorgada que me ha permitido iniciar mis estudios de doctorado y culminar los de maestría.

Al departamento de aeronáutica de la Universidad Nacional de Córdoba, por ofrecer un lugar físico para el desarrollo de mi investigación.

Al "*Mono*" por su constante motivación y apoyo; lo que fue definitivo para la culminación de este objetivo.

Resumen

En esta tesis se describen los resultados obtenidos con las simulaciones numéricas de dos tipos de problemas en los cuales el fluido debe necesariamente ser considerado compresible. En uno, se simula un caso de combustión difusiva turbulenta a baja velocidad y en otro, la simulación se aplica a casos típicos de aerodinámica supersónica. Ambas simulaciones fueron desarrolladas aplicando las herramientas de libre distribución que provee openfoamTM. Con la combustión se utilizan ecuaciones de conservación inestacionarias para la masa, los momentos, la energía y la conservación de las especies, promediadas según Favre y para la turbulencia se emplea un modelo $k - \varepsilon$ modificado. Para resolver las ecuaciones de conservación discretizadas, se emplea el método PISO (*Pressure Implicit with Splitting of Operators*), que conlleva a la derivación de una ecuación independiente para la presión. La cinética química es modelada mediante una única reacción global y para tener en cuenta la interacción química-turbulencia se implementa el concepto del reactor parcialmente mezclado. El cálculo de los términos fuentes presentes en las ecuaciones de conservación de las especies químicas, requiere la integración de ecuaciones diferenciales ordinarias *stiffs*. openFoam proporciona un esquema numérico que garantiza estabilidad en el cómputo de estos términos. La simulación numérica del *benchmark* conocido como llama D, se compara con datos experimentales obtenidos por *Sandia National Laboratories*.

Las simulaciones numéricas de los flujos supersónicos son desarrolladas empleando los ejecutables *sonicFoam* y *rhoCentralFoam*. Las principales diferencias entre estos ejecutables son: *sonicFoam* usa la presión como variable dependiente y en consecuencia utiliza el método PISO como técnica resolutive; *rhoCentralFoam* mantiene la densidad como variable dependiente y en lugar de usar *solvers* de Riemann como técnica resolutive, emplea los esquemas alternativos de Kurganov et al. . En esta tesis se evalúan las ventajas y desventajas derivadas de la aplicación en simulaciones supersónicas, de los dos ejecutables citados. Con tal propósito, los siguientes flujos supersónicos fueron considerados: la cuña (o rampa), perfil tipo doble cuña y el cuerpo romo (bidimensional y axisimétrico). Estos flujos tienen solución analítica o cuentan con datos experimentales con que comparar los resultados de las simulaciones numéricas. En todos los casos se supone que el fluido (aire) se comporta como un gas no viscoso y calórico perfecto.

Abstract

This thesis describes results obtained from numerical simulations of two types of problems in which the fluid flow must necessarily be considered compressible. In one type, a low speed diffusive combustion problem is simulated and in the other one, the simulation is applied to typical supersonic aerodynamics problems. Both simulations were developed by employing free distribution tools provided by openFoam.

Favre averaged unsteady mass, momentum, energy and species conservation equations are used in the combustion problem and to account for turbulence, a modified k-e model is used. The conservation equations are solved utilizing a pressure implicit with splitting of operators (PISO) algorithm, which requires the addition of an extra equation for the pressure. The chemical kinetics is modeled by only one step global reaction and the partially stirred reactor concept (PaSR) is implemented to consider chemistry-turbulence interactions. To compute source terms in the species conservation equations, sets of stiff ordinary differential equations (ODEs) have to be solved. openFoam provides a numerical scheme that ensure well enough stability in computing these terms. A numerical simulation of the Sandia flame “D” is compared with experimental data available from Sandia National Laboratories (USA).

Supersonic flow numerical simulations, are performed with sonicFoam and rhoCentralFoam solvers. The main difference between them arise from the fact that sonicFoam uses the pressure as dependent variable and, consequently, the PISO algorithm, whereas rhoCentralFoam keeps density as a dependent variable and, therefore, can use the central schemes introduced by Kurganov et al. as resolvable technique. In this thesis, the advantages and disadvantages of the cited solvers to handle supersonic flow simulations are evaluated by applying them to three cases: flow over a wedge, a double wedge airfoil and over two dimensional and axial symmetrical blunt bodies. These flow cases have analytical solutions or available experimental data to compare with numerical simulations results. In all cases the flow (air) is assumed to behave as a inviscid and caloric perfect gas.

Contenido

	Página
1. Introducción	1
1.1. Motivación y alcance.	4
1.2. Objetivos y organización de la tesis	5
Referencias Capítulo 1	8
2. Combustión difusiva turbulenta	9
Nomenclatura	10
2.1. Promedios de Favre	13
2.2. Ecuaciones de transporte para un flujo con reacciones químicas	15
2.2.1. Ecuación de las especies en términos de la fracción de masa	16
2.2.2. Ecuación de la energía	18
2.2.3. Ecuación de la conservación de la masa y del momento	21
2.2.4. Ecuación de estado	22
2.3. Modelo de turbulencia	23
2.4. Cinética química para la combustión de hidrocarburos	24
2.4.1. Modelo de reacción global de un paso	25
2.4.2. Términos fuentes en sistemas con múltiples reacciones químicas	27
2.5. Interacción química-turbulencia: el modelo PaSR	29
2.6. Modelo termofísico	33
2.7. Implementación numérica	34
2.8. Caso de prueba: Llama D	36
2.8.1. Datos para los modelos termofísico, químico y de turbulencia	37
2.8.2. Generación de la malla	40
2.8.3. Condiciones de borde e iniciales	42
2.8.4. Selección de los esquemas de discretización y algoritmos de solución	44
2.9. Resultados	45
Referencias Capítulo 2	53
3. Flujo supersónico	55
Nomenclatura	55
3.1. Propiedades del régimen supersónico	57

3.2.	Ecuaciones de transporte y modelo termofísico	59
3.3.	Implementación numérica	61
3.3.1.	<i>SonicFoam</i>	61
3.3.1.1.	Esquema de dos etapas	62
3.3.2.	<i>RhoCentralFoam</i>	65
3.4.	Casos de prueba	68
3.4.1.	Selección de los esquemas numéricos y algoritmos de solución	68
3.4.2.	Datos para el modelo termofísico	69
3.4.3.	Flujo supersónico sobre una cuña	70
3.4.4.	Flujo supersónico sobre un perfil tipo doble cuña	74
3.4.5.	Flujo bidimensional y axisimétrico alrededor de un cuerpo romo	79
3.4.5.1.	Caso bidimensional	79
3.4.5.2.	Caso axisimétrico	86
Referencias Capítulo 3		92
4. Conclusiones y trabajo futuro.		93
4.1.	Conclusiones	93
4.1.1.	Simulación de la combustión difusiva turbulenta	93
4.1.2.	Simulaciones numéricas de flujos supersónicos	95
4.2.	Trabajo futuro	98
Referencias Capítulo 4		101
A. Técnicas numéricas		103
	Nomenclatura	104
A.1.	Propiedades de los esquemas numéricos	106
A.2.	Discretización geométrica	109
A.2.1.	Especificación de la malla y condiciones que debe satisfacer	110
A.3.	Discretización de las ecuaciones (método de los volúmenes finitos)	112
A.3.1.	Aproximación de las integrales de volumen	114
A.3.2.	Aproximación de las integrales de de superficie	115
A.3.3.	Término convectivo	117
A.3.4.	Esquemas de interpolación	117
A.3.4.1.	Esquema centrado	117
A.3.4.2.	Esquema <i>upwind</i>	118
A.3.4.3.	Esquema central <i>upwinded</i>	119
A.3.4.4.	Esquema híbrido o combinado	120
A.3.4.5.	Generalización de los esquemas de interpolación	120
A.3.4.6.	Esquemas TVD	122
A.3.5.	Término difusivo	126
A.3.5.1.	Método de la corrección mínima	127

A.3.5.2.	Método de la corrección ortogonal	127
A.3.5.3.	Método de sobre-relajación	128
A.3.6.	Término fuente	129
A.3.6.1.	Tratamiento implícito de los términos fuentes	129
A.3.7.	Evaluación de los gradientes.	130
A.3.7.1.	Enfoque gaussiano	130
A.3.7.2.	Método de los mínimos cuadrados	130
A.3.7.3.	Cómputo del gradiente normal a la cara de la celda (Re- construcción)	131
A.3.7.4.	Limitadores para el gradiente	131
A.3.8.	Esquemas de integración temporal	133
A.4.	Métodos de solución a los sistemas de ecuaciones provenientes de la dis- cretización	136
A.5.	Algoritmo PISO	138
A.5.1.	El problema del tablero de ajedrez	143
A.6.	Condiciones de borde e iniciales	145
A.7.	Discretización las ecuaciones en openfoam™	149
A.7.1.	Escritura de las ecuaciones	149
A.7.2.	Selección de los esquemas de discretización	151
A.7.3.	Selección de los métodos de solución y configuración del algoritmo PISO	152
A.8.	Unidades en openfoam™	154

Referencias Apéndice A

Lista de figuras

2.1.	Variación de $k_A(T)$ en el intervalo $277\text{ K} \leq T \leq 3000\text{ K}$	26
2.2.	Concepto del modelo PaSR.	29
2.3.	Geometría del quemador utilizado en los experimentos de la llama D de <i>Sandia</i>	40
2.4.	Esquema del mallado por bloques para la llama D de <i>Sandia</i>	41
2.5.	Malla axisimétrica llama D de <i>Sandia</i>	42
2.6.	Distribución de temperatura sobre el dominio de cómputo.	46
2.7.	Distribución de las especies sobre el eje de simetría.	47
2.8.	Distribución de temperatura sobre el eje de simetría.	48
2.9.	Distribución de temperatura sobre el eje de simetría: comparación con los datos reportados por Christ [43] y con los datos experimentales disponibles .	49
2.10.	Residuos de O_2 CH_4 CO_2 H_2O h_s k y ε	50
3.1.	Discretización por volúmenes finitos (vectores involucrados en el cómputo de w_f)	67
3.2.	Flujo supersónico sobre una cuña.	70
3.3.	Dominio de cálculo: caso cuña.	71
3.4.	Número de Mach detrás de la onda, ángulo del choque, relación de presiones y temperaturas: caso cuña.	73
3.5.	Posición de la onda, relaciones de presión y temperatura sobre la cuña (superior $M_1 = 3$, inferior $M_1 = 2$)	73
3.6.	Campos de velocidad, presión, temperatura y cambio entropía (<i>rhoCentralFoam</i>): caso cuña.	74
3.7.	Dominio de cálculo: perfil doble cuña.	75
3.8.	Regiones de flujo: perfil doble cuña.	76
3.9.	Campos de velocidad, presión, temperatura y cambio entropía (<i>rhoCentralFoam</i>): perfil doble cuña.	77
3.10.	Residuos en la norma L_2 de ρ , Ma , T y p : perfil doble cuña.	78
3.11.	Configuración de la malla: cuerpo romo configuración 2D.	79
3.12.	Distribuciones de número de Mach y presiones: cuerpo romo configuración 2D (Malla-1).	81
3.13.	Distribuciones de entropía: cuerpo romo configuración 2D (Malla-1).	82

3.14. Distribuciones de número de Mach y presiones: cuerpo romo configuración 2D (Malla-2)	83
3.15. Comparación de la distancia de la onda normal determinada con <i>rhoCentralFoam</i> con la obtenida por medio de la correlación de Billig para un cilindro y una esfera.	84
3.16. Residuos en la norma L_2 de Ma , p , ρ y T para las diferentes funciones limitadoras: cuerpo romo configuración 2D.	85
3.17. Malla cuerpo romo: configuración axisimétrica.	86
3.18. Distribución de presiones (izq) y Mach (der): cuerpo romo (configuración axisimétrica).	87
3.19. Comparación distribución de Mach: <i>rhoCentralFoam</i> (izq) - Brooks [16] (der) : cuerpo romo (configuración axisimétrica).	88
3.20. Comparación distribución de presiones : <i>rhoCentralFoam</i> (izq) - Brooks [16] (der): cuerpo romo (configuración axisimétrica).	88
3.21. Distribución del coeficiente de presión: cuerpo romo (configuración axisimétrica)	89
3.22. Cambios de Mach, presión, temperatura y densidad a través del choque: cuerpo romo (configuración axisimétrica).	90
A.1. Celda poliédrica arbitraria.	109
A.2. Vector normal a una cara según el sentido de numeración de los puntos.	111
A.3. Interpolación lineal en las caras.	118
A.4. Discretización en un dominio unidimensional.	120
A.5. Variación de ψ alrededor de la cara de la celda.	123
A.6. (a) Región TVD, (b) Esquemas central y <i>upwind</i> dentro de la región TVD, (c) Región TVD de segundo orden.	125
A.7. Corrección de la no-ortogonalidad.	126
A.8. Método de la corrección mínima.	127
A.9. Método de la corrección ortogonal.	128
A.10. Limitación del gradiente: b) reconstrucción sin limitador c) reconstrucción con limitador.	132
A.11. Gradiente de presión unidimensional.	144
A.12. Celda en el contorno.	146

Lista de tablas

2.2.	Composiciones en fracción de masa del aire, combustible y piloto.	37
2.3.	Datos molares para la reacción global de un solo paso metano-aire.	37
2.4.	Condiciones de borde llama D de <i>Sandia</i>	43
3.2.	Funciones limitadoras: VanLeer, VanAlbada y MinMod	67
3.3.	Condiciones de borde: caso cuña	71
3.4.	Condiciones de borde: perfil doble cuña	75
3.5.	Relaciones de presión y Número de Mach: perfil doble cuña	77
3.6.	Condiciones de borde: cuerpo romo configuración 2D	80
3.7.	Presión de impacto: cuerpo romo configuración 2D (Malla-1)	82
A.2.	Funciones limitadoras: van Leer, Sweby, van Albada, MinMod y SUPERBEE125	
A.3.	Unidades utilizadas en openfoam TM	154

1. Introducción

Desde mediados del siglo XX el uso de métodos computacionales ha adquirido gran popularidad en distintos campos de la ciencia y la ingeniería. Es universalmente aceptado que la aparición de las computadoras permitió resolver problemas que hasta entonces eran inabordables debido al gran volumen de cálculo involucrado. Desde sus comienzos, el desarrollo en el campo de las simulaciones numéricas ha sido exponencial y a lo largo de la historia aparecen gran cantidad de técnicas con miras a la resolución de las ecuaciones diferenciales en derivadas parciales de la mecánica de los fluidos y fenómenos asociados. Algunas de estas técnicas han mostrado excelente rendimiento y versatilidad, otras por ser difíciles de implementar, costosas, poco robustas y pocas eficientes al tratar ciertos problemas específicos y geometrías complejas asociadas, han sido relegadas. Dentro de las técnicas propuestas para discretizar las ecuaciones de la mecánica de los fluidos, una de las más populares es la de volúmenes finitos. Su popularidad 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 mado (admite mallas no estructuradas).

En el mercado han aparecido muchos paquetes comerciales (FLUENT[™], COMSOL[™], EasyCFD[™], FLOW-3D[™], FLUIDYN[™], KIVA[™], PHOENICS[™], STAR-CD[™], etc.) y también libres (ADFC[™], CLAWPACK[™], Dolfyn[™], Edge[™], ELMER[™], FDS[™], openfoam[™], etc.) de simulación numérica y todos muestran funcionalidades similares. Algunos de los paquetes comerciales han demostrado ser excelentes herramientas, no obstante por ser paquetes cerrados presentan ciertas desventajas, siendo dos de las más notables la imposibilidad de conocer detalles referentes a las técnicas utilizadas para solucionar los sistemas derivados de ecuaciones escritas en forma discreta y sus costos de licencias para usuarios que van desde cientos a miles de dólares estadounidenses. Con los paquetes libres, se tiene 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, hay que tener en cuenta que por tratarse de paquetes de libre distribución sus desarrolladores si bien liberan el código, no suelen documentarlo adecuadamente. Cuando la documentación es insuficiente, es recomendable recurrir a procedimientos de verificación y/o validación.

En los últimos años el paquete de libre acceso denominado *Open Field Operation and Manipulation* (openFoam) ha adquirido gran aceptación en diversos campos de la inves-

tigación 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 openfoamTM constituya una opción más que interesante a tener en cuenta en el momento de efectuar simulaciones de problemas específicos. En esta tesis se presentan dos tipos de simulaciones construidas utilizando las herramientas que provee openfoamTM. La que se presenta en el Capítulo 2, corresponde a un proceso de combustión difusiva turbulenta de baja velocidad y la que se hace en el Capítulo 3, a varios problemas característicos de la aerodinámica supersónica. En todas las simulaciones el fluido debe ser considerado compresible.

La simulación numérica de la combustión difusiva turbulenta no es un problema trivial. Sus dificultades surgen, mayoritariamente, a partir de la fundamental exigencia impuesta al código de cómputo: capacidad para simular las complejas interacciones entre el flujo y la actividad química. openfoamTM desde sus librerías, pone a disposición de quien pretende desarrollar la simulación esquemas (*fvSchemes*) para discretizar las ecuaciones de conservación turbulentas promediadas según Favre [6] y también para resolver (*fvSolutions*) los sistemas algebraicos resultantes. La turbulencia se modela mediante una versión modificada del original $k - \epsilon$ [5, 9]. Cualquier proceso de combustión turbulenta requiere de un modelo descriptivo de la interacción turbulencia-química. En la práctica, este requerimiento puede aproximarse satisfactoriamente mediante al concepto del reactor parcialmente mezclado (PaSR) [4]. 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 κ ($0 \leq \kappa \leq 1$), propuesto por Marzouk y Huckbay en 2010 [7].

Cuando el proceso químico está controlado por reacciones finitas, es importante decidir sobre el nivel de la cinética relevante al problema, a saber: es apropiado 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. Desde el punto de vista del propósito de esta tesis, adquirir experiencia sobre el uso de las librerías que provee openfoamTM para construir ejecutables útiles para el estudio de la combustión difusiva, se estima aceptable el uso de una única reacción química de carácter global [8]. En cada celda del dominio computacional y para cada intervalo de tiempo, la determinación del término fuente presente en la ecuación de conservación de cada especie, requiere la integración de un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias (ODEs) que por lo general son *stiffs*. Para tratar esto y garantizar la estabilidad de los cálculos, openFoam provee el método semi-implícito de Bulirsch-Stoer propuesto por Bader y Deufhard [2].

Si el medio es continuo y $M \rightarrow 0$, 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 solo a la

convergencia sino también a la exactitud y conduce a diferencias importantes entre valores de la presión obtenidos con ecuaciones discretas y continuas [1]. Cuando se desarrollan técnicas numéricas para solucionar problemas de transporte cualquiera sea la velocidad (o número de Mach), se pueden seguir dos técnicas: una basada en la presión y otra en la densidad. Para el estudio de la combustión difusiva con velocidades bajas, conviene seleccionar la técnica basada en la presión, lo cual contempla el uso de la presión como variable dependiente y el agregado de la ecuación de conservación correspondiente. Se emplea entonces, como técnica resolutoria al 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 [3] y con resultados numéricos obtenidos por Christ [14].

Las simulaciones numéricas de los flujos supersónicos pueden ser desarrolladas empleando los ejecutables *sonicFoam* y *rhoCentralFoam*. El propósito principal de esta sección de la tesis es evaluar la capacidad de estos dos ejecutables en la simulación de varios casos típicos de la aerodinámica supersónica: la cuña (o rampa), el perfil tipo doble cuña y el cuerpo como bidimensional y axisimétrico. En todos los casos se supone que el fluido (aire) se comporta como un gas no viscoso y calórico perfecto.

En *sonicFoam* se utiliza el método PISO, por lo tanto se requiere una ecuación para la presión la cual se deriva a partir de formas discretas de las ecuaciones de momento y continuidad. La característica principal de este método es dividir el proceso de solución en una serie de pasos donde las operaciones sobre la presión están desacopladas de aquellas sobre la velocidad y la energía. Con esta división se pretende formar conjuntos de ecuaciones que pueden ser resueltas mediante modelos estándares (por ejemplo, el esquema Euler implícito). 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].

En *rhoCentralFoam* se mantiene la densidad como variable dependiente. En flujos compresibles con altas velocidades ($M > 1$) se requieren esquemas numéricos que permitan capturar discontinuidades (p. ej. choques, superficies de contacto), con exactitud y evitando oscilaciones espurias. En métodos caracterizados por su efectividad en producir soluciones con exactitud y sin oscilaciones, la generación de flujos numéricos involucra generalmente la utilización de *solvers* de Riemann, que resultan difíciles de implementar en mallas con celdas poliédricas con un número arbitrario de caras. Una técnica alternativa, que no utiliza *solvers* de Riemann pero que también provee soluciones con exactitud y sin oscilaciones utilizando esquemas centrales, ha sido propuesta por Kurganov, et al. [10–12] y Greenshield et al. [13], y es la que ha sido implementada en *openfoam*[™] para ser usada con *rhoCentralFoam*. Las ventajas y desventajas resultantes de la aplicación en las simulaciones supersónicas previamente listadas, de los dos ejecutables provistos por *openfoam*[™] son evaluadas y las conclusiones presentadas.

1.1. Motivación y alcance.

Cuando se pretende estudiar un fenómeno específico de la mecánica de fluidos computacional se debe discernir si se implementa un nuevo código, se adquiere un paquete comercial o se utilizar uno de libre distribución.

Si bien es muy meritorio desarrollar un nuevo código numérico, dadas las tendencias actuales puede en ocasiones no resulta conveniente desde el punto de vista comercial, debido a que puede llegar a ser un proceso largo y costoso. Por otro lado se presenta la alternativa de los paquetes de *software* libre que permiten el uso de herramientas ya implementadas y a partir de éstas, realizar nuevas implementaciones o adaptar las mismas a las necesidades del usuario, esta opción es interesante a la hora de realizar nuevos desarrollos y debe ser tenida muy en cuenta.

Entre los paquetes de libre distribución que han alcanzado niveles altos de popularidad tanto en el ámbito comercial como en el académico se encuentra openfoamTM. Sin embargo al momento de decidir utilizar las herramientas que ofrece openfoamTM el usuario o nuevo desarrollador se formula algunos interrogantes. El primero suele ser : ¿ el paquete de simulación cuenta con las herramientas necesarias para abordar el problema que se desea resolver ?. Esta pregunta puede contestarse consultando guías de usuario en donde se listan las capacidades del mismo. Una vez establecido que se cuenta con las herramientas necesarias aparecen otros interrogantes:

- ¿ Qué esquemas y técnicas utiliza el *software* para tratar el problema ?
- ¿ Los resultados que se obtienen son confiables ?
- ¿ Resulta conveniente invertir recursos para conocer en detalle la implementación del paquete con el propósito de utilizarlo en nuevas simulaciones ?

Resolver dichos interrogantes mediante experimentos numéricos efectuados utilizando las herramientas ofrecidas por openfoamTM y comparando resultados ya sea con soluciones analíticas o datos experimentales, ha sido la motivación principal de esta tesis.

Dos campos de estudio con grados considerables de complejidad (combustión difusiva turbulenta y flujo supersónico) fueron seleccionados como representativos de la capacidad del paquete. De esta manera se ha buscado dejar documentación que sirva como punto de partida para desarrollos futuros tanto en el campo de la combustión y los flujos a alta velocidad como en cualquier otro campo donde sea aplicable el entorno de programación y las herramientas de openfoamTM.

El alcance del presente estudio abarca la descripción de aspectos teórico-prácticos de cada uno de los dos problemas considerados. La parte numérica se aborda desde el punto de vista de la implementación dentro de openfoamTM, por ello se elabora un apéndice (ver Apéndice A), en el cual se describen en detalle las técnicas utilizadas para el tratamiento de las ecuaciones de gobierno de cada uno de los fenómenos abordados. Cabe mencionar

que a la descripción de la técnica de volúmenes finitos se le da un enfoque genérico con lo cual se busca no restringirla a los problemas aquí considerados sino, por el contrario, ofrecer una base que sirva como soporte teórico para nuevos estudios.

1.2. Objetivos y organización de la tesis

El objetivo general de este trabajo ha sido obtener experiencia con el uso de las librerías de openfoamTM relativas al pre-procesamiento de datos de entrada, a la solución de los sistemas de ecuaciones escritos en forma discreta en dominios computacionales mallados con volúmenes finitos y finalmente, al pos-procesamiento de resultados.

A partir del objetivo general descrito aparecen los siguientes objetivos particulares:

- Revisión de la bibliografía relevante a los fenómenos y técnicas consideradas en la presente tesis con miras a contar con un adecuado soporte teórico.
- Estudio detallado de las implementaciones de las técnicas numéricas utilizadas por cada uno de los *solvers* utilizados.
- Verificación y validación de los resultados de las simulaciones mediante comparaciones con soluciones analíticas y/o datos experimentales disponibles.
- Ponderar la relevancia del paquete de simulaciones con el fin de desarrollar futuras aplicaciones.

La presente tesis consta de tres capítulos y un apéndice. El capítulo 1 incluye una introducción técnica, la motivación, alcance, objetivos y organización de la tesis.

En el segundo y tercer capítulo se abordan respectivamente, el problema de la combustión difusiva turbulenta y los casos de flujo supersónico. Ambos capítulos inician con una introducción al problema, luego se presentan las ecuaciones de gobierno, las hipótesis y modelos utilizados, y se describe la implementación de los *solvers* y casos de prueba. Finalmente se analizan los resultados obtenidos.

Tanto en el Capítulo 2 como en el Capítulo 3 se hará constante referencia al Apéndice A, debido a que éste incluye toda la información de soporte necesaria con respecto a la técnica de volúmenes finitos en openfoamTM. Dicho apéndice describe en forma detallada el tratamiento dado a las ecuaciones de gobierno en términos de esquemas numéricos, acoplamientos presión-velocidad, algoritmos de solución de los sistemas de ecuaciones provenientes de la discretización y detalles de la implementación relevantes al contexto de la presente tesis.

El Capítulo 4 describe las conclusiones particulares para cada uno de los casos referentes a los fenómenos simulados y conclusiones generales aplicables al desempeño del paquete.

Referencias Capítulo 1

- [1] **L. S. Alves**, *Review of numerical methods for the compressible flow equations at low mach numbers*, 2009.
- [2] **G. Bader** and **P. Deuffhard**, *A semi-implicit mid-point rule for stiff systems of ordinary differential equations*, *Number. Math.*, vol. 41:pp. 373–398, 1983.
- [3] **R. Barlow** and **J. Frank**, *Piloted CH₄-air flames C, D, E, and F*, *Sandia National Laboratories*, 2007.
- [4] **J. Chomiak.** and **A. Karlsson**, *Flame fiftoff in diesel sprays*, *26th Symposium (Iternational) on Combustion*, pp. 2557–2564, 1996.
- [5] **F. P. Kärrholm**, *Numerical modelling of diesel spray injection, turbulence interaction and combustion*, Ph.D. thesis, Chalmers University of Technology, 2008.
- [6] **A. Favre**, *Statistical equations of turbulent gases*, *Problems of hidrodynamics and continuum mechanics*, pp. 231–266, 1969.
- [7] **O. A. Marzouk** and **E. D. Huckaby**, *A comparative study of eight finite-rate chemistry kinetics for CO/h₂ combustion*, *Engineering Applications of Computational Fluid Mechanics*, vol. Vol. 4(No. 3):pp. 331–356, 2010.
- [8] **S. McAllister.**, **J. Y. Chen.** and **A. C. F. Pello**, *Fundamental of combustion processes*, *Mechanical Engineering Series - Springer Science+Bussiness Media, LLC* 2011, 2011.
- [9] **N. P. A. Nordin**, *Complex chemistry modeling of diesel spray combustion*, Ph.D. thesis, Chalmers University of Technology, 2001.
- [10] **A. Kurganov** and **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.
- [11] **A. Kurganov** and **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.
- [12] **A. Kurganov** and **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.
- [13] **C. Greenshields**, **H. Weller**, **L. Gasparini** and **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.
- [14] **D. Christ**, *Simulating the combustion of gaseous fuels*, 6th OpenFoam Workshop Pennsylvania State University State College, PA, USA, 13-16 June 2011.

-
- [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.

2. Combustión difusiva turbulenta

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 [17]. 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.

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_{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
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
$\mathbf{f}_{k,j}$	Fuerza volumétrica j sobre la especie k
\mathbf{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

α Difusividad térmica
 α_t Difusividad térmica turbulenta
 α_{eff} Difusividad térmica efectiva
 $\Delta h_{f,k}^\circ$ Entalpía de formación o química de la especie k
 Δt Paso de tiempo fluidodinámico
 $\Delta \tau$ Paso de tiempo químico
 δ Factor de estiramiento
 ε Disipación de la energía cinética turbulenta
 κ Volumen reactivo de la celda
 λ Conductividad térmica
 $\bar{\lambda}$ Conductividad térmica media de la mezcla
 μ Viscosidad molecular
 μ_{eff} Viscosidad efectiva
 μ_t Viscosidad turbulenta
 ν'_{ji} Coeficientes estequiométricos de los reactantes
 ν''_{ji} Coeficientes estequiométricos de los productos
 ρ Densidad
 ρ_k Concentración másica de la especie k
 $\underline{\underline{\sigma}}$ Tensor de tensiones
 τ_c Tiempo químico
 τ_{mix} Tiempo de mezcla
 τ_{res} Tiempo de residencia
 τ^t Tensiones de Reynolds
 $\underline{\underline{\tau}}$ Tensor de tensiones viscosas.
 ϕ Relación de equivalencia.
 ψ Compresibilidad
 Ψ 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
 \circ Condiciones estándar
 $-$ Promedio de Reynolds

"	Fluctuación
~	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.

2.1. 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 ψ'' [14, 17, 19, 21, 22, 45]:

$$\psi = \tilde{\psi} + \psi'' \quad (2.1)$$

Si la compresibilidad del fluido es importante, es conveniente multiplicar la Eq. 2.1 por la densidad:

$$\rho\psi = \rho\tilde{\psi} + \rho\psi'' \quad (2.2)$$

Promediando la Eq. 2.2, se obtiene:

$$\overline{\rho\psi} = \overline{\rho\tilde{\psi}} + \overline{\rho\psi''} \quad (2.3)$$

Si se tiene en cuenta la definición del promedio ponderado según la masa propuesto por Favre [9, 14]:

$$\tilde{\psi} = \frac{\overline{\rho\psi}}{\bar{\rho}} \quad (2.4)$$

De la Eq. 2.3 se obtiene finalmente:

$$\overline{\rho\psi''} = 0 \quad (2.5)$$

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 [21]. En general se promedian según Favre todas las cantidades de interés, a excepción de la presión, densidad y el flujo de calor [9]. Es importante notar que los promedios, cualquiera sea su clase, satisfacen las siguientes reglas generales¹ [9, 18, 19, 44]:

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. $\overline{\nabla \cdot (\phi\mathbf{a})} = \nabla \cdot (\overline{\phi\mathbf{a}})$
 $= \nabla \cdot (\overline{\phi}\mathbf{a}) + \nabla \cdot (\overline{\phi'\mathbf{a}'})$
9. $\overline{\nabla \cdot (\nabla(\phi))} = \nabla \cdot (\nabla(\overline{\phi}))$

(2.6)

Con carácter ilustrativo se presenta a continuación el procedimiento para promediar según Favre a la ecuación genérica descrita en la sec. A.3. Reemplazando las variables por su respectivo valor medio y la correspondiente fluctuación, se obtiene²:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho(\tilde{\psi} + \psi'')) + \nabla \cdot (\rho(\tilde{\mathbf{U}} + \mathbf{U}'')(\tilde{\psi} + \psi'')) - \nabla \cdot \rho D \nabla (\tilde{\psi} + \psi'') = \overline{S} + S' \quad (2.7)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho\tilde{\psi}) + \frac{\partial}{\partial t} (\rho\psi'') + \nabla \cdot (\rho\tilde{\mathbf{U}}\tilde{\psi} + \rho\mathbf{U}''\tilde{\psi} + \rho\mathbf{U}''\psi'' + \rho\tilde{\mathbf{U}}\psi'') \\ = \nabla \cdot \rho D \nabla (\tilde{\psi} + \psi'') + \overline{S} + S' \end{aligned} \quad (2.8)$$

Promediando la Eq. 2.8 utilizando las reglas previamente descritas en la Eq. 2.6 se consigue:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\overline{\rho\tilde{\psi}}) + \frac{\partial}{\partial t} (\overline{\rho\psi''}) + \nabla \cdot (\overline{\rho\tilde{\mathbf{U}}\tilde{\psi}} + \overline{\rho\mathbf{U}''\tilde{\psi}} + \overline{\rho\mathbf{U}''\psi''} + \overline{\rho\tilde{\mathbf{U}}\psi''}) \\ = \nabla \cdot D \nabla (\overline{\rho\tilde{\psi}} + \overline{\rho\psi''}) + \overline{S} + \overline{S'} \end{aligned} \quad (2.9)$$

¹Las reglas mostradas aplican independientemente de si se consideran promedios de Reynolds ($\overline{\quad}$) o promedios de Favre ($\overline{\quad}$). 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.

²Por simplicidad se asume que el coeficiente de difusión D es independiente de la posición y el tiempo.

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:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\overline{\rho\psi}) + \nabla \cdot (\overline{\rho\mathbf{U}\psi} + \overline{\rho\mathbf{U}''\psi} + \overline{\rho\mathbf{U}''\psi''} + \overline{\rho\mathbf{U}\psi''}) \\ = \nabla \cdot D\nabla (\overline{\rho\psi}) + \overline{S} \end{aligned} \quad (2.10)$$

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

$$\begin{aligned} \overline{\rho\mathbf{U}\psi} &= \overline{(\rho\mathbf{U})\psi} \\ &= (\overline{\rho\mathbf{U}})\psi \end{aligned} \quad (2.11)$$

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 (Eq. 2.5) es nulo, es posible escribir el segundo término bajo el operador divergencia de la siguiente forma:

$$\overline{\rho\mathbf{U}''\psi} = \overline{(\rho\mathbf{U}'')\psi} = 0 \quad (2.12)$$

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:

$$\overline{\rho\mathbf{U}''\psi''} = \overline{\rho\mathbf{U}''\psi''} \quad (2.13)$$

Nótese que si en este caso a la cantidad genérica ψ 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 ψ promediada según Favre, resulta:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\overline{\rho\psi}) + \nabla \cdot (\overline{\rho\mathbf{U}\psi}) = \nabla \cdot (\nabla (D\overline{\rho\psi}) - \overline{\rho\mathbf{U}''\psi''}) + \overline{S} \quad (2.14)$$

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 tal como se llevo a cabo aquí.

2.2. 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.

2.2.1. 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

$$Y_k = \rho_k \rho^{-1} \quad (2.15)$$

donde ρ es la densidad de la mezcla y ρ_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 asociada a las reacciones químicas, entonces es posible escribir la siguiente ecuación de conservación para cada una de las especies³[10, 15, 22, 29]:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho Y_k) + \nabla \cdot (\rho (\mathbf{U} + \mathbf{V}_k) Y_k) = \dot{\omega}_k \quad (2.16)$$

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

$$\sum_{k=1}^N Y_k = 1 \quad (2.17)$$

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

$$Y_N = 1 - \sum_{k=1}^{N-1} Y_k \quad (2.18)$$

Generalmente, determinar las diferentes velocidades de difusión para cada una de las especies implica resolver un sistema adicional de ecuaciones [22, 24, 45]. Lo cual genera un considerable aumento en el costo computacional. Por lo tanto y acorde con uno de los objetivos principales de este trabajo, brindar una introducción a los aspectos relevantes para lograr una simulación exitosa del fenómeno de combustión difusiva con openfoamTM, se hace uso de la primera ley de Fick para modelar estos términos [20, 45]. La primera ley de Fick asume que el transporte debido a las velocidades de difusión de las diferentes

³Nótese que debido a que considera un campo de flujo turbulento efectos como el *Soret* no se han tenido en cuenta.

especies es proporcional a sus gradientes. Entonces

$$\mathbf{V}_k Y_k = -\rho D_k \nabla Y_k \quad (2.19)$$

siendo D_k el coeficiente de difusión molecular de la especie k . Haciendo uso de la Eq. 2.19, la Eq. 2.16 se puede escribir

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho Y_k) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} Y_k) - \nabla \cdot (\rho D_k \nabla Y_k) = \dot{\omega}_k \quad (2.20)$$

Promediando la ecuación Eq. 2.20 según lo descrito en la sec. 2.1 y suponiendo un coeficiente de difusión constante e igual para todas las especies, es posible escribirla en la forma [22, 30, 45]:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{Y}_k) + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{U}} \tilde{Y}_k) + \nabla \cdot \left(\widetilde{\bar{\rho} \mathbf{U}'' Y_k''} - D_k \bar{\rho} \nabla \tilde{Y}_k \right) = \bar{\omega}_k \quad (2.21)$$

En la Eq. 2.21 aparecen dos términos que deben ser modelados de alguna forma, estos son, el término asociado al transporte de las especies por efectos de la turbulencia $\widetilde{\bar{\rho} \mathbf{U}'' Y_k''}$ y el término asociado a la velocidad media de reacción de cada una de las especies $\bar{\omega}_k$.

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 [24]. Con lo que el término que describe el flujo difusivo de las especies ponderado por la masa en la Eq. 2.21, se puede modelar

$$\bar{\rho} D_k \nabla \tilde{Y}_k = \bar{\mu} \nabla \tilde{Y}_k \quad (2.22)$$

Para modelar el término que describe el transporte turbulento de las especies también se emplea la hipótesis del gradiente [22, 24, 33, 45], en consecuencia la difusión turbulenta de las especies se escribe

$$\widetilde{\bar{\rho} \mathbf{U}'' Y_k''} = -\frac{\bar{\mu}_t}{S_{c_t}} \nabla \tilde{Y}_k \quad (2.23)$$

donde S_{c_t} es el número de Schmidt turbulento, que también puede tomar valor unitario [20]. En consecuencia la ecuación de transporte de las especies promediada según Favre finalmente se puede escribir como:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{Y}_k) + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{U}} \tilde{Y}_k) - \nabla \cdot (\mu_{\text{eff}} \nabla \tilde{Y}_k) = \bar{\omega}_k \quad (2.24)$$

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

Hasta este punto se ha descrito como 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 se ha mencionado como determinar la **viscosidad turbulenta** μ_t . Esto se hará en una sección posterior donde se introducen respectivamente el modelado de turbulencia y de interacción química-turbulencia (ver sec. 2.3 y sec. 2.5).

2.2.2. 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 [45]. No obstante, aquí se considerará la forma de 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 asociada con las reacciones químicas y la subsecuente liberación de calor originada por el proceso de combustión. También se evita la aparición de un término adicional relacionado con la diferencia de entalpías de las especies que componen la mezcla [45]. La ecuación de la energía en términos de la entalpía sensible resulta⁴ [7, 22, 24, 45]

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho h_s) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} h_s) = \\ \dot{\omega}_T + \frac{Dp}{Dt} - \mathbf{q} + \mathbf{Q} - \nabla \cdot \left(\rho \sum_{k=1} h_{s,k} \tilde{Y}_k \mathbf{V}_k \right) + \rho \sum_{k=1} \tilde{Y}_k \mathbf{f}_{k,j} \mathbf{V}_k + \underline{\tau} : \nabla \mathbf{U} \end{aligned} \quad (2.25)$$

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 de energía debido a la difusión de las especies y el término que sigue es la potencia producida por las fuerzas volumétricas sobre la especie k . Finalmente, el término $\underline{\tau} : \nabla \mathbf{U}$ es el flujo de calor asociado a la disipación viscosa molecular.

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

$$\mathbf{q} = -\bar{\lambda} \nabla T \quad (2.26)$$

Dado que se considera un proceso de auto-ignición, no se tiene en cuenta ningún aporte de calor desde alguna fuente externa para la ignición. Por simplicidad no se considera el transporte de calor por radiación, lo cual para la simulación de la combustión de una llama difusiva completamente en fase gaseosa supuestamente no presentaría gran impacto [2, 13, 30]. En lo que respecta al transporte de energía debido a la difusión pura de las especies,

⁴Aquí 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) [22, 45].

éste se desprecia en función de que en general, su aporte comparado con el aporte debido a la combustión es mínimo [45]. Se tiene en cuenta únicamente la influencia de la gravedad en todas las especies, en consecuencia el término relacionado a la potencia producida por las fuerzas de campo se hace cero por definición⁵ ($\rho \sum_{k=1}^N Y_k \mathbf{f}_{k,j} \mathbf{V}_{k,i} = \rho \mathbf{f}_j \sum_{k=1}^N Y_k \mathbf{V}_{k,i} = 0$). El proceso de combustión considerado sucede a baja velocidad, por lo que los efectos compresibles provienen de los grandes cambios en la temperatura relacionados a la liberación de calor producido por la combustión, y no por los cambios en la densidad asociados a los fenómenos de compresibilidad en flujos a alta velocidad, en consecuencia el término asociado el flujo de calor por disipación viscosa $\underline{\tau} : \nabla \mathbf{U}$ se hace despreciable [7, 30, 36]. 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 de la entalpía sensible, de acuerdo a la expuesto en la sec. 2.1. Ésta resulta:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{h}_s) + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{U}} \tilde{h}_s) = \bar{\omega}_T + \frac{\overline{Dp}}{Dt} + \nabla \cdot (\lambda \nabla \tilde{T} - \overline{\rho \mathbf{U}'' h_s''}) \quad (2.27)$$

De forma similar a lo que se hizo en el caso de la ecuación de las especies, aquí se hace uso del número de Prandtl⁶ que relaciona la difusión viscosa con la difusión térmica:

$$Pr = \frac{\mu C_p}{\lambda} \quad (2.28)$$

Utilizando a la difusividad térmica α , la cual se define como

$$\alpha = \frac{\lambda}{\rho C_p} \quad (2.29)$$

y teniendo en cuenta la definición de la entalpía sensible

$$\nabla h_s = C_p \nabla T \quad (2.30)$$

es posible escribir el flujo laminar de calor de la manera:

$$\begin{aligned} \lambda \nabla \tilde{T} &= \frac{\lambda}{C_p} \nabla h_s \\ &= \alpha \nabla h_s \end{aligned} \quad (2.31)$$

Al igual que en el caso de la ecuación de las especies queda por cerrar el término asociado

⁵La 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 $\sum Y_k V_i = 0$.

⁶En este trabajo se asume $Pr = 0.7$ valor que se toma del intervalo $0.7 \leq Pr \leq 0.9$ el cual se considera apropiado para la mayoría de flujos que involucran reacciones químicas [31, 45].

al transporte turbulento de calor $\overline{\rho \mathbf{U}'' h_s''}$. Utilizando nuevamente la hipótesis del gradiente (ver Eq. 2.23), dicho término resulta:

$$\overline{\rho \mathbf{U}'' h_s''} = -\alpha_t \nabla h_s \quad (2.32)$$

Aquí α_t es la difusividad térmica turbulenta, la cual a su vez se determina por

$$\alpha_t = \frac{\mu_t}{P_{rt}} \quad (2.33)$$

De nuevo aparecen parámetros asociados al modelo de turbulencia, en este caso la viscosidad turbulenta y el número Prandtl turbulento⁷. De esta forma la ecuación de la entalpía sensible se puede escribir:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{h}_s) + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{U}} \tilde{h}_s) = \bar{\omega}_T + \frac{\overline{Dp}}{Dt} + \nabla \cdot (\alpha_{\text{eff}} \nabla h_s) \quad (2.34)$$

donde α_{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 término promediado transitorio de la presión \overline{Dp}/Dt se calcula por

$$\frac{\overline{Dp}}{Dt} = \frac{\partial \bar{p}}{\partial t} + \tilde{\mathbf{U}} \cdot \nabla \bar{p} \quad (2.35)$$

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 (sec. 2.5).

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

Se sabe que:

$$\frac{dh_s}{dT} = \frac{dF(T)}{dT} = F'(T) = C_p(T) \quad (2.36)$$

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

$$F(T) = F(T_0) + F'(T_0)(T - T_0) \quad (2.37)$$

⁷Se 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, por lo tanto se toma $P_{rt} = 1$ [9].

Luego T se consigue:

$$T = T_0 + \frac{F(T) - F(T_0)}{F'(T_0)} = T_0 + \frac{F(T) - F(T_0)}{C_p(T_0)} \quad (2.38)$$

$F(T)$ corresponde al valor de la variable energética considerada en la presente iteración, $F(T_0)$ el valor inicial o de la iteración inmediatamente anterior y $F'(T_0) = C_p(T)$ el valor de la derivada de la variable energética correspondiente a T_0 . De esta forma se fija un número de iteraciones de tal forma que se satisfaga una condición de convergencia preestablecida, por ejemplo un número de iteraciones [34].

2.2.3. 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.

La ecuación de momento se modifica si se considera que existen diferentes fuerzas de campo que afectan a las especies involucradas, con lo cual adopta la forma:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \mathbf{U}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \mathbf{U}) = -\nabla \cdot \mathbf{p} + \nabla \cdot \underline{\underline{\boldsymbol{\tau}}} + \rho \sum_{k=1} Y_k \mathbf{f}_{k,j} \quad (2.39)$$

En función de lo expuesto con anterioridad (sec. 2.2.1) el tercer término del segundo miembro de la ecuación de momento (Eq. 2.39) se simplifica, debido a que la única fuerza de campo que afecta a todas las especies es la gravedad. La Eq. 2.39 se escribe

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \mathbf{U}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \mathbf{U}) = -\nabla p + \nabla \cdot \underline{\underline{\boldsymbol{\tau}}} + \rho \mathbf{g} \quad (2.40)$$

El tensor de tensiones viscosas ($\underline{\underline{\boldsymbol{\tau}}}$), aplicable a un fluido newtoniano sin tener en cuenta la viscosidad volumétrica está dado por⁸ [22, 45]:

$$\underline{\underline{\boldsymbol{\tau}}} = 2\mu \left(\frac{1}{2} (\nabla \mathbf{U} + (\nabla \mathbf{U})^T) - \frac{1}{3} \nabla \cdot \mathbf{U} \mathbf{I} \right) \quad (2.41)$$

Luego de aplicar los promedios de Favre (ver sec. 2.1) a la Eq. 2.40 resulta:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho} \widetilde{\mathbf{U}}) + \nabla \cdot (\bar{\rho} \widetilde{\mathbf{U}} \widetilde{\mathbf{U}}) = -\nabla \bar{p} + \nabla \cdot \left(\underline{\underline{\boldsymbol{\tau}}} - \bar{\rho} \widetilde{\mathbf{U}}'' \widetilde{\mathbf{U}}'' \right) + \bar{\rho} \mathbf{g} \quad (2.42)$$

Al promediar se observa, que aparece el término $\bar{\rho} \widetilde{\mathbf{U}}'' \widetilde{\mathbf{U}}''$ el cual como se menciona en la

⁸El término viscosidad volumétrica (también conocido como segundo coeficiente de viscosidad) hace referencia a lo que se conoce en la literatura en inglés como “*bulk viscosity coefficient*”

sección donde se introdujeron los promedios de Favre (sec. 2.1), se conoce como **tensiones de Reynolds** o de **Favre** en el contexto de flujos compresibles[11] (de ahora en adelante se usará $\underline{\underline{\tau}}^t$ como nomenclatura para dichas tensiones). Para modelar las estas tensiones, se tiene en cuenta la hipótesis de Bussinesq [9, 33, 45]. Dicha hipótesis propone que las tensiones de Reynolds (o de Favre) son proporcionales a los gradientes de velocidad medios e introduce como constante de proporcionalidad a la viscosidad turbulenta μ_t [33]:

$$\underline{\underline{\tau}}^t = -\mu_t \left(\nabla \widetilde{\mathbf{U}} + (\nabla \widetilde{\mathbf{U}})^T - \frac{2}{3} \nabla \cdot \widetilde{\mathbf{U}} \mathcal{I} \right) + \frac{2}{3} \widetilde{\rho} \widetilde{k} \mathcal{I} \quad (2.43)$$

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

Promediando la Eq. 2.41 e introduciendo la expresión resultante junto con la Eq. 2.43 en la Eq. 2.42, la ecuación de momento promediada se transforma en:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\widetilde{\rho} \widetilde{\mathbf{U}}) + \nabla \cdot (\widetilde{\rho} \widetilde{\mathbf{U}} \widetilde{\mathbf{U}}) + \mathbf{G}(\widetilde{\mathbf{U}}) = -\nabla \bar{p} + \bar{\rho} \mathbf{g} \quad (2.44)$$

donde el operador $\mathbf{G}(\widetilde{\mathbf{U}})$ está definido de la siguiente forma:

$$\mathbf{G}(\widetilde{\mathbf{U}}) = \nabla \cdot (\mu_{\text{eff}} \nabla \widetilde{\mathbf{U}}) - \nabla \cdot \left[\mu_{\text{eff}} \left\langle (\nabla \widetilde{\mathbf{U}})^T - \frac{2}{3} \mathcal{I} Tr \left\{ (\nabla \widetilde{\mathbf{U}})^T \right\} \right\rangle \right] \quad (2.45)$$

Dicho operador \mathbf{G} tiene en cuenta el aporte de las tensiones de Reynolds y al tensor de tensiones molecular utilizando la viscosidad efectiva μ_{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:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \widetilde{\mathbf{U}}) = 0 \quad (2.46)$$

2.2.4. 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:

$$p_k = \rho_k \frac{R_u}{W_k} T \quad (2.47)$$

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

$$p = \sum_{k=1}^N p_k \quad (2.48)$$

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

$$\rho_k = \rho Y_k \quad (2.49)$$

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

$$\rho = \sum_{k=1}^N \rho_k \quad (2.50)$$

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

$$\begin{aligned} p &= \rho \frac{R_u}{\overline{W}} T \\ &= \frac{\rho}{\psi} \end{aligned} \quad (2.51)$$

donde \overline{W} es el peso molecular medio de la mezcla, el cual puede ser definido en base molar o másica según convenga [22]:

$$\begin{aligned} \overline{W} &= \sum_{k=1}^N X_k W_k \\ \overline{W} &= \left(\sum_{k=1}^N \frac{Y_k}{\overline{W}_k} \right)^{-1} \end{aligned}$$

2.3. Modelo de turbulencia

Con el fin de calcular los términos relacionados con el transporte turbulento de las especies, energía y las tensiones de Reynolds, en las ecuaciones de las especies, entalpía y momento respectivamente; y de esta forma cerrar las ecuaciones de conservación definidas en la sección anterior, se empleará un modelo tipo RANS (*Reynolds Averaged Navier-Stokes*) donde la viscosidad turbulenta se relaciona con la energía cinética turbulenta k y su disipación ε a partir de [33, 45]:

$$\mu_t = C_\mu \bar{\rho} \frac{\tilde{k}^2}{\tilde{\varepsilon}} \quad (2.52)$$

El modelo $k - \varepsilon$ seleccionado modificado para el caso compresible, requiere la solución de dos ecuaciones de transporte adicionales, una para el transporte de la energía cinética turbulenta y otra para la disipación de la misma, cuyas ecuaciones son [16, 23, 32]:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{k}) + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{U} \tilde{k}) - \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \nabla \tilde{k} \right] = P_k - \bar{\rho} \tilde{\varepsilon} \quad (2.53a)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho}\tilde{\varepsilon}) + \nabla \cdot (\bar{\rho}\tilde{\mathbf{U}}\tilde{\varepsilon}) - \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \tilde{\varepsilon} \right] = \frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{k}} (C_{\varepsilon 1} G - C_{\varepsilon 2} \bar{\rho}\tilde{\varepsilon}) \\ - \left(\frac{2}{3} C_{\varepsilon 1} + C_{\varepsilon 3} \right) \bar{\rho}\tilde{\varepsilon} \nabla \cdot \tilde{\mathbf{U}} \end{aligned} \quad (2.53b)$$

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

$$P_k = 2\mu_t D^{\text{dev}} \nabla \tilde{\mathbf{U}} - \frac{2}{3} \bar{\rho} \tilde{k} \nabla \cdot \tilde{\mathbf{U}} \quad (2.54)$$

donde D^{dev} es la parte desviadora del tensor de deformaciones $\underline{\underline{D}}$. El coeficiente adicional $C_{\varepsilon 3}$ que aparece en estas ecuaciones de transporte no está incluido en la formulación original propuesta por Launder y Sharma [23], esta modificación es propuesta por Nordin y Kärholm [16, 32] para tener en cuenta los efectos de la compresibilidad en el modelo. Las constantes que aparecen en las ecuaciones de transporte del modelo de turbulencia adoptan los siguientes valores [28]:

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

2.4. Cinética química para la combustión de hidrocarburos

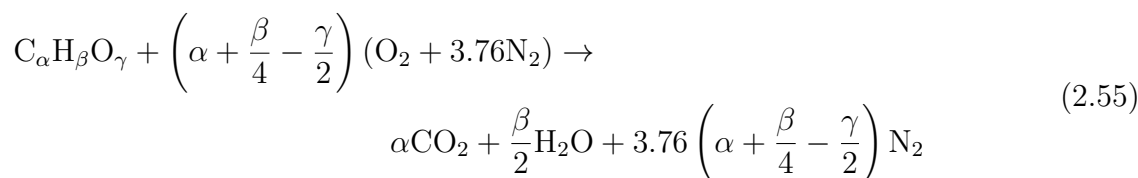
La compleja cinética química de la combustión de hidrocarburos para ser descrita en forma apropiada requiere la consideración de un gran número de especies y reacciones elementales. En el caso de la combustión metano-aire, para ser descrita de manera razonable, se requieren alrededor de 53 especies y 800 reacciones elementales [29]. El número de reacciones a considerar crece conforme el número de átomos de carbono en el combustible también lo hace, 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 de las reacciones globales y/o elementales más significativas. En este trabajo se adoptara una única reacción global

Por otro lado, como se menciona en el Apéndice A, las ecuaciones de transporte de las especies se encuentran acopladas y ha sido práctica convencional resolver el sistema completamente acoplado tratando de forma implícita a los términos fuentes involucrados. Sin embargo esto es prohibitivo cuando se considera un gran número de especies, en consecuencia, aparecen enfoques que plantean resolver el sistema de forma desacoplada determinando de forma local las velocidades de reacción asociadas a cada especie. Para esto se utiliza un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias (ODEs) que describen la

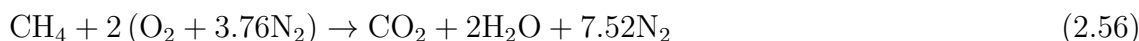
producción y consumo de cada especie, para luego utilizar dichos datos para determinar los términos fuentes de las ecuaciones de las especies y de la energía.

2.4.1. 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 ⁹ [29]:



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 Eq. 2.56 se utiliza la ley de acción de las masas [22, 29, 31], la cual establece que la velocidad de reacción es proporcional a la concentración de los reactantes, con lo cual se tiene:

$$\text{GRR} = k_A [\text{CH}_4]^a [\text{O}_2]^b \quad (2.57)$$

Aquí k_A es la constante de velocidad de reacción [22, 29, 37] y expresa la dependencia no lineal de la reacción con la temperatura, dicho coeficiente se define como:

$$k_A = AT^n \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) \quad (2.58)$$

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 que colisionan entre sí las moléculas que componen a las especies que reaccionan. El exponente n en muchas aplicaciones toma 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 1, y por lo tanto la dependencia de la temperatura únicamente es expresada por el exponente

⁹Nótese que en este caso se considera que la reacción experimentada por los reactantes es irreversible, es decir que sólo se considera la reacción directa, la cual representa el proceso químico sufrido por los reactantes que da lugar a la formación de los productos.

n . En el caso que se analizará aquí dicho exponente será considerado nulo, ya que los datos con los que se cuentan así lo consideran, además la energía de activación presenta un valor alto y dentro del intervalo de temperaturas que se experimenta ($277 \text{ K} \leq T \leq 3000 \text{ K}$) la citada dependencia exponencial aún no tienda a un valor constante (Ver Fig. 2.1). La energía de activación, se puede interpretar como la barrera energética a alcanzar para romper los enlaces químicos entre las moléculas reactantes a fin de permitir la formación de nuevas especies. Dichos parámetros son determinados experimentalmente en reactores de flujo [21, 26, 36].

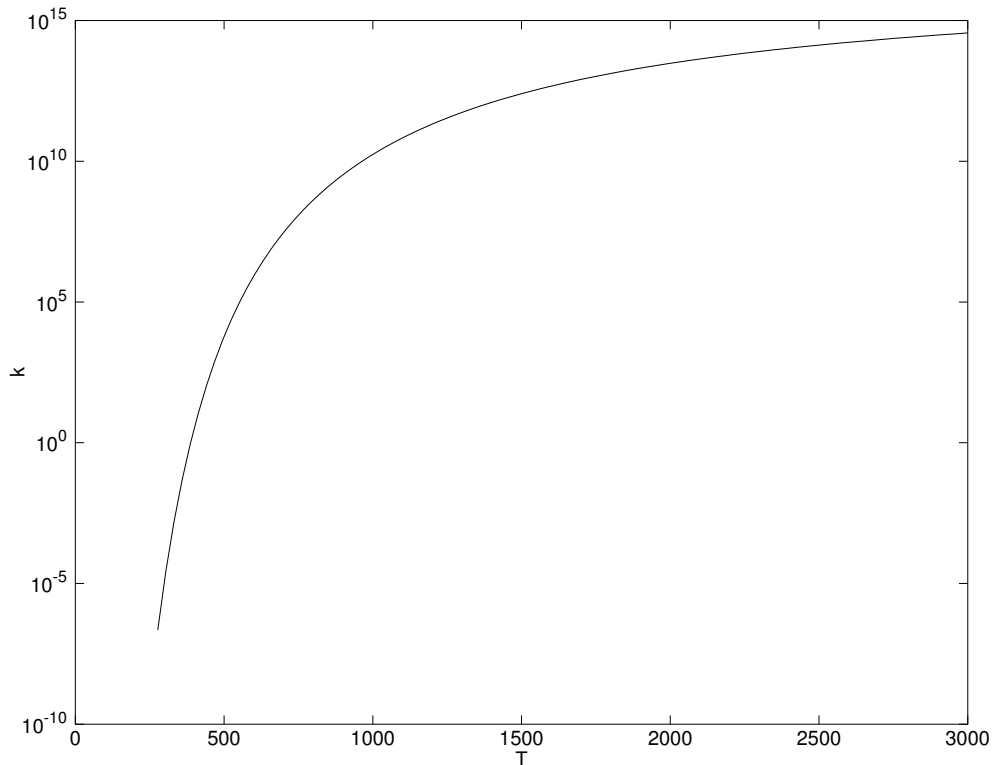


Figura 2.1.: Variación de $k_A(T)$ en el intervalo $277 \text{ K} \leq T \leq 3000 \text{ K}$.

Si se considerasen reacciones elementales los exponentes a y b en la velocidad de reacción corresponderían entonces a los coeficientes estequiométricos de la ecuación química (Eq. 2.56), sin embargo cuando se utiliza una única reacción global, estos parámetros deben ser determinados experimentalmente por medio de la utilización de reactores [36]. En las aplicaciones típicas las unidades utilizadas para la energía de activación y el factor pre-exponencial son mol, cm^3 , s y K, pero puesto que aquí se utilizan para determinar las velocidades de reacción con el fin de obtener los términos fuentes en las ecuaciones de las especies y el calor liberado por la combustión, las unidades preferidas son kmol, m^3 , s y K.

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

$$\frac{d[\text{CH}_4]}{dt} = -\text{GRR} \quad (2.59a)$$

$$\frac{d[\text{O}_2]}{dt} = -2\text{GRR} \quad (2.59\text{b})$$

Análogamente las velocidades de formación de los productos, resultan:

$$\frac{d[\text{CO}_2]}{dt} = \text{GRR} \quad (2.60\text{a})$$

$$\frac{d[\text{H}_2\text{O}]}{dt} = 2\text{GRR} \quad (2.60\text{b})$$

Se observa que para determinar las velocidades de reacción se requiere resolver en este caso cuatro ecuaciones diferenciales ordinarias desacopladas del tipo *stiff*¹⁰, lo cual es así porque se considera una única reacción. En la siguiente sección en la cual se aborda la generalización del tratamiento que se debe dar a las reacciones cuando se considera un sistema que involucra M reacciones y N especies, se presenta el método a utilizar para resolver dichas ecuaciones diferenciales las cuales por lo general están acopladas. En la sec. 2.5 se expone la razón por la cual el método de integración para las ODEs debe ser seleccionado de forma tan especial.

2.4.2. 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 cuales se tienen en cuenta reacciones tanto de avance como inversas o de retroceso¹¹. 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 químicas se puede expresar en la forma:



¹⁰Se define a una ODE *stiff* o rígida, como en que la variable independiente presenta escalas de variación distintas. Esto hace que los algoritmos numéricos convencionales se hagan inestables, por lo tanto se requiere de métodos especiales para tratarlas. En lo que respecta a la cinética química, la rigidez tiene su origen en la dependencia de la temperatura de las velocidades de reacción.

¹¹En este caso se considera una reacción reversible, es decir que se tiene en cuenta tanto la formación de los productos debida a la reacción entre los reactantes y la reacción inversa que pueden llegar a sufrir los productos para dar lugar de nuevo a los reactantes.

$$\sum_{j=1}^N \nu'_{ji} C_j \xleftarrow{k_i^b} \sum_{j=1}^N \nu''_{ji} C_j \quad (2.62)$$

donde ν'_{ji} y ν''_{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:

$$\dot{\omega}_{k,i} = \dot{C}_{k,i} = \left(\frac{dC_k}{dt} \right)_i = (\nu''_{ki} - \nu'_{ki}) \left[k_i^f \prod_{j=1}^N (C_j)^{\nu'_{kj}} - k_i^b \prod_{j=1}^N (C_j)^{\nu''_{kj}} \right] \quad (2.63)$$

Para $i = 1, 2, \dots, M$. La Eq. 2.63 se formula para cada especie y reacción incluida en el modelo químico, lo que resulta en un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias *stiff* acopladas, las cuales deben ser resueltas utilizando un método apropiado.

Como se menciono antes, para modelar la combustión metano-aire se requieren alrededor de 53 especies y 800 reacciones elementales, en consecuencia, al utilizar el enfoque descrito aquí sería necesario resolver 53 sistemas de ecuaciones diferenciales por cada celda de la malla y en cada paso de tiempo. Aunque algunas ecuaciones no aportarían al sistema, puesto que existen especies que no reaccionan entre sí, se estaría hablando de un sistema de aproximadamente 42400 ODEs. La solución de un sistema de *stiff ODEs* en dichas circunstancias es prohibitivo desde el punto de vista computacional, por lo tanto surge la necesidad de adoptar otros enfoques como el descrito en el apartando anterior, aunque éste sea un caso extremo.

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 se llega al caso particular de un conjunto de 4 ecuaciones desacopladas (sec. 2.4.1). No obstante, para resolver dicho sistema de ecuaciones ya es necesario contar con algoritmos de solución apropiados. Dentro de la versión de openfoam™ 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 Deuffhard (SIBS)

Para llevar a cabo esta tarea, aquí se utiliza el método SIBS debido a que proporciona una mejor relación precisión-costo computacional [3, 4]. El método SIBS 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 (Δt)) se subdivide en un número creciente de sub-pasos, la solución converge a un valor final $y(\Delta t)$, lo que quiere decir que a medida que la subdivisión del intervalo temporal incrementa, la calidad de la aproximación obtenida mejorará ([3, 4]).

2.5. 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 [32]. Por lo tanto se introducen modelos para la turbulencia (ver sec. 2.3), para las reacciones químicas involucradas (ver sec. 2.4) y también para sus interacciones. En los procesos químicos sería necesario considerar tamaños de celda varios ordenes 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. Para modelar la interacción química-turbulencia se utilizará el modelo *Partially Stirred Reactor* (PaSR) [8].

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 [5].

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.

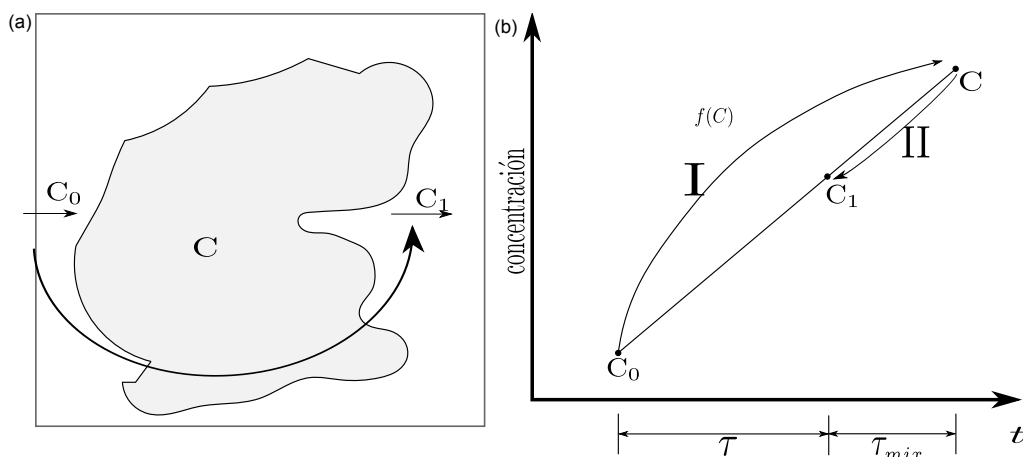


Figura 2.2.: Concepto del modelo PaSR.

Considérese la Fig. 2.2, 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 computo de los términos fuente relacionados con las velocidades químicas [32]. 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: ¿ qué tan 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 τ puede ser escrita como:

$$\frac{dC^k}{dt} = \frac{C_1^k - C_0^k}{\tau} \quad (2.64)$$

donde $\tau = \Delta t + \tau_c$, τ_c es el tiempo químico y Δt el paso de tiempo computacional. Como se ilustra en la Fig. 2.2, 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

$$\frac{dC}{dt} = \frac{C_1 - C_0}{\tau} \quad (2.65)$$

$$\frac{dC}{dt} = \frac{C^k - C_1^k}{\tau_{mix}} \quad (2.66)$$

De las Eq. 2.65 y Eq. 2.66 se tiene:

$$\frac{C_1^k - C_0^k}{\tau} = \frac{C^k - C_1^k}{\tau_{mix}} \quad (2.67)$$

y reorganizando la Eq. 2.67 es posible escribir:

$$C_1^k = \kappa C^k + (1 - \kappa) C_0^k \quad (2.68)$$

designándose con κ a:

$$\kappa = \frac{\tau}{\tau + \tau_{mix}} \quad (2.69)$$

donde κ 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:

$$\tau_c \sim \dot{\omega}^{-1} \quad (2.70)$$

Atendiendo a que $\dot{\omega}_k = \dot{\omega}_k(C, T)$, el tiempo químico¹² 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 [8]

$$\frac{1}{\tau_{c,k}} = -\frac{\partial \dot{\omega}_k(C_k)}{\partial C_k} \quad (2.71)$$

Ahora utilizando la Eq. 2.67 y la Eq. 2.71 es posible escribir:

$$\dot{\omega}_k(C) = \dot{\omega}_k(C_1) - \frac{C - C_1}{\tau_c} \quad (2.72)$$

Combinando las ecuaciones Eq. 2.68 y Eq. 2.72 se tiene:

$$\dot{\omega}_k(C_1) = (C_1 - C_0) \left(\frac{1}{\tau} - \frac{1 - \kappa}{\kappa \tau_c} \right) \quad (2.73)$$

Luego de reorganizar la Eq. 2.73, el cambio de concentración resulta:

$$\dot{\omega}_k(C) = \kappa \dot{\omega}_k(C_1) \quad (2.74)$$

con κ dado por:

$$\kappa = \frac{\tau_{res} + \tau_c}{\tau_{res} + \tau_c + \tau_{mix}} \quad (2.75)$$

¹²En la literatura concerniente a la combustión se habla de tiempo químico y de escala temporal química como términos equivalentes.

Aquí τ_{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 Δt . τ_c es el tiempo químico y se define teniendo en cuenta las escalas temporales características de las reacciones que experimentan el combustible y el oxidante, físicamente corresponde al tiempo que toman en completarse las reacciones entre las especies consideradas. τ_{mix} es el tiempo de mezcla, el cual está relacionado con el proceso de mezcla experimentado por las diferentes especies, para determinar ésta escala temporal existen distintos enfoques, todos ellos relacionados con las diferentes escalas temporales asociadas a la turbulencia [16].

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 este propósito [8]:

$$\tau_c^{-1} = \max \left\{ -\frac{\dot{\omega}_{fuel}}{\rho_{fuel}}, -\frac{\dot{\omega}_{O_2}}{\rho_{O_2}} \right\} \quad (2.76)$$

El tiempo de mezcla, debido a que se considera que el proceso de combustión sucede en un ambiente con un nivel alto de turbulencia, se puede pensar que los mecanismos preponderantes en dicho proceso de mezcla 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 las variables del modelo adoptado (ver sec. 2.3) para determinar el tiempo de mezcla [32]:

$$\tau_{mix} = C_{mix} \sqrt{\frac{\mu_{eff}}{\bar{\rho} \tilde{\epsilon}}}$$

donde C_{mix} es el coeficiente de mezcla. Nordin [32] mostró que valores apropiados para el coeficiente de mezcla se encuentran dentro del rango $0.001 \leq C_{mix} \leq 0.3$, y en [43] se muestra por medio de experimentos numéricos que la influencia de dicho coeficiente 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 $\lim_{\tau_c \rightarrow \infty} \kappa = 1$, esto indica que no ocurren reacciones químicas y la composición de los reactantes permanece congelada (*frozen*) según proporciones definidas por la mezcla de gases 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 hay equilibrio químico $\kappa < 1$, y su valor es función de la relación τ_c/τ_{res}

$$\tau_c = 0 \quad \rightarrow \quad \kappa = \frac{1}{1 + \frac{\tau_{mix}}{\tau_{res}}} \quad (2.77)$$

Teniendo en cuenta que en el proceso químico sólo interviene una reacción global, el

término fuente de la ecuación de conservación para la especie k (Eq. 2.24) puede ser escrito

$$\bar{\omega}_k = \kappa W_k \dot{C}_k = \kappa G R R_k \quad (2.78)$$

El calor liberado por la combustión ($\bar{\omega}_T$) en la ecuación de la energía (Eq. 2.34) puede ser determinado por

$$\bar{\omega}_T = \sum_{k=1}^N \Delta h_{f,k}^\circ \bar{\omega}_k \quad (2.79)$$

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 $\bar{\omega}_T$ debe expresarse en $\text{J m}^{-3} \text{s}^{-1}$.

2.6. Modelo termofísico

En las ecuaciones de gobierno se encuentran involucradas las siguientes propiedades termofísicas del fluido de trabajo: C_p , μ , λ y α . Dichas propiedades deben ser actualizadas en función del cambio en la temperatura. Para llevar a cabo este procedimiento, aquí se utilizan las tablas Janaf, la fórmula de Eucken modificada, la ley de Sutherland [12, 47, 48]. De acuerdo a la ley de Sutherland el coeficiente de viscosidad dinámica molecular varía en función de la temperatura según:

$$\mu = \frac{A_s \sqrt{T}}{1 + T_s T^{-1}} \quad (2.80)$$

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 Janaf¹³:

$$C_{p,k}^{m,\circ} = R_u \left(a_{0k} + a_{1k}T + a_{2k}T^2 + a_{3k}T^3 + a_{4k}T^4 \right) \quad (2.81)$$

donde $R_u = 8314.15 \text{ J/molK}$ es la constante universal de los gases, y a_{ik} para $i = 0, 2 \dots 6$ son los coeficientes de ajuste del polinomio¹⁴, 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

¹³Los 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.

¹⁴Nótese que aparecen 7 coeficientes a_{ik} de ajuste, pero en la Eq. 2.81 aparecen 5, los dos restantes se utilizan en el caso de que se requiera determinar la entalpía y la entropía por medio de funciones polinómicas similares [12]

se determina teniendo en cuenta los aportes de cada una de las especies, así

$$C_p = \sum_{k=1}^N C_{p,k}^m W_k^{-1} Y_k = R_u \sum_{k=1}^N W_k^{-1} Y_k \left\{ \sum_{r=0}^4 a_{r,k} T^r \right\} \quad (2.82)$$

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

$$C_v = C_p - \frac{R_u}{\bar{W}} \quad (2.83)$$

donde el segundo término del miembro derecho es la constante de los gases para la mezcla, a su vez 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`.

La conductividad térmica λ se determina utilizando la fórmula de Eucken modificada [48]:

$$\lambda = \mu C_v \left(1.32 + \frac{1.77R}{C_v} \right) \quad (2.84)$$

La difusividad térmica α resulta dada a partir de:

$$\alpha = \frac{\lambda}{C_p} \quad (2.85)$$

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

$$\psi = (RT)^{-1} \quad (2.86)$$

Análogamente, utilizando la ecuación de estado (sec. 2.2.4) la densidad resulta:

$$\rho = \psi p \quad (2.87)$$

Estos cálculos se realizan utilizando la subclase `perfectGas.H`.

2.7. Implementación numérica

En esta sección se describe de manera sucinta como con herramientas provistas por la librería `openfoam™` 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 [46].

Para determinar la energía turbulenta k y su disipación ε , se resuelven las respectivas ecuaciones de transporte descritas en la sec. 2.3. Los términos fuente en la ecuación de las especies y la energía generados por las velocidades de reacción se determinan según lo expuesto en la sec. 2.5.

Teniendo en cuenta el entorno de programación que brinda `openfoam`TM 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 ecuación. De forma similar la parte del código que resuelve la química y determina los términos fuentes para las ecuaciones de las especies y la energía, y además tiene en cuenta la interacción química-turbulencia se implementa en `chemistry.H`. Los campos involucrados en la simulación $(Y_k, \bar{p}, \tilde{\mathbf{U}}, \tilde{h}_s, \bar{\rho}, \tilde{T}, \kappa, \psi)$ son inicializados mediante el archivo de cabecera `createfields.H`, que 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() << ", "
        << max(T).value() << endl;
11 }

```

Código 2.1: Implementación de la ecuación de la entalpía sensible en *reactingFoam*

En la línea (2) del Código 2.1 se declara que la ecuación será representada matricialmente como un campo escalar por medio de la palabra clave `fvScalarField`. A continuación, de la línea (3) a la línea (5) se escribe la ecuación según lo expuesto en sec. A.7.1. En la línea (3) se observa la entrada `chemistrySh` la cual establece la evaluación de la Eq. 2.78. De forma similar, `DpDt` corresponde a la evaluación de Eq. 2.35.

En la línea.(7) y la línea.(8), se pueden observar las funciones miembro `relax()` y `solve()` aplicadas sobre el objeto `hsEqn` del tipo `fvScalarMatrix` que representa la ecuación de la entalpía sensible, la primera de ellas aplica sub-relajación (de haber sido seleccionada la opción en tiempo de corrida) y la segunda resuelve el sistema de ecuaciones. Luego, la función miembro `correct()` se encarga de actualizar las variables termodinámicas de acuerdo a lo expuesto en la sec.2.6, 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 (Eq. 2.85) y turbulenta (Eq. 2.33). Esta última determinada a partir del valor de μ_t provisto por el modelo de turbulencia seleccionado.

2.8. Caso de prueba: Llama D

En esta sección se describe el caso de prueba que será resuelto con la finalidad de probar la funcionalidad de `openfoam`TM para tratar con el fenómeno de combustión difusiva; el caso seleccionado se conoce como la llama D de Sandia (*Sandia National Labs.*, Ca, USA). 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 contemplan un criterio para cuantificar dicho fenómeno¹⁵ [38].

El modelo PaSR (sec. 2.5) no tiene en cuenta la extinción local, por lo tanto la llama D se considera como un caso de prueba apropiado para ser simulado. Otra característica interesante de este *benchmark* es la gran cantidad de estudios previos y datos experimentales disponibles [1, 6, 38]. Los resultados experimentales utilizados para las comparaciones que se realizarán en este trabajo son distribuidos por *Sandia National Laboratories* y se encuentran disponibles en www.sandia.gov/TNF/DataArch/FlameD.html.

La llama piloto es resultado de la combustión de una mezcla pobre¹⁶ ($\phi = 0.77$) 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. Las dimensiones del quemador y de la sección del túnel utilizados para los experimentos son:

- Diámetro de la entrada de combustible: $d_i = 0.0072$ m
- Diámetro exterior del anillo piloto: $d_p = 0.0182$ m

¹⁵El fenómeno de extinción local tiene lugar cuando localmente quedan remanentes del hidrocarburo que no llegan a reaccionar, lo cual está asociado a fuertes niveles de turbulencia en el flujo .

¹⁶ ϕ 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.

- Dimensión lateral de la sección transversal del túnel de viento: $l = 0.3$ 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. 2.2.

	O ₂	N ₂	CH ₄	H ₂ O	CO ₂
Combustible	19.66 %	64.73 %	15.61 %	---	---
Aire	23 %	77 %	---	---	---
Piloto	5.4 %	74.2 %	---	9.42 %	10.98 %

Tabla 2.2.: Composiciones en fracción de masa del aire, combustible y piloto.

2.8.1. Datos para los modelos termofísico, químico y de turbulencia

Para evaluar las velocidades de reacción de las diferentes especies involucradas se utiliza la ecuación de Arrhenius (Eq. 2.58, sec. 2.4.1) 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 la reacción considerada. En este caso para la reacción global metano-aire de un sólo paso considerada se utilizan los datos de la Tab. 2.3 determinados de forma experimental [26].

Reacción	T_a	A	a	b
Metano-Aire	14906 K	$5.2 \times 10^{16} \frac{\text{Kmol}}{\text{m}^3}$	1	1

Tabla 2.3.: Datos molares para la reacción global de un solo paso metano-aire.

De forma similar, es necesario que para cada una de las especies involucradas se tenga el valor del coeficiente de Sutherland, la temperatura de Sutherland y los valores de los coeficientes a_{ik} para aproximar C_p (Eq. 2.81), dicha información se introduce en el caso a simular por medio de un archivo de texto denominado `thermo.compressibleGas` (Lista de entrada 2.2).

```

1 (
2 \* bloque especie k
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 )

```

Lista de entrada 2.2: Entrada de datos termofísicos.

En Lista de entrada 2.2, se presentan los datos para el modelo termofísico utilizado en la simulación. Este tipo de formato de entrada tiene similitud con la del bien conocido formato de ChemkinTM[39]. 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 de 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 de la constante y temperatura de Sutherland A_s y T_s .

La información correspondiente a la reacción global (Eq. 2.56) 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 2.3: Entrada de los datos de las reacciones para *reactingFoam*

El modelo químico tal como fue mencionado en las sec. 2.4.1 y sec. 2.4.2 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 para integrar en este caso a las 4 ODEs resultantes de considerar una única reacción y cuatro especies (N_2 es supuesto inerte). Para que el *solver* lleve a cabo esta tarea se le debe proporcionar el paso de integración temporal inicial para resolver dichas ODEs, en este caso dicho paso de integración inicial para la parte química (el cual se denominará de ahora en adelante como $\Delta\tau$), adoptará el valor inicial $\Delta\tau = 1 \times 10^{-7}$. En general $\Delta\tau < \Delta t$, es decir que el paso de tiempo para el algoritmo de solución de las ODEs debe ser menor que el paso de tiempo para la solución del sistema fluidodinámico. Dentro de la clase `ODEChemistryModel` de `openfoam`TM se implementa un procedimiento que involucra la escala temporal química de forma tal que se ajuste el paso de tiempo en el algoritmo de integración SIBS. Así se garantiza la selección de un paso de tiempo apropiado y se evita la selección de un paso muy corto que conllevaría costos computacionales innecesarios.

El modelo de turbulencia se selecciona utilizando un archivo de texto denominado `turbulenceProperties` 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 al tipo de modelo dentro de los provistos por `openfoam`TM (dicha palabra para el caso de los modelos RANS resulta `RASModel`). Puesto que dentro de la familia de modelos RANS existen distintas variantes, se debe indicar explícitamente el modelo a usar. 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. Dicho archivo de entrada se puede observar en la Lista de entrada 2.4.

```

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 2.4: 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 en la implementación se asigna a dichos coeficientes valores por defecto. Sólo se deben indicar cuando se deseen utilizar valores diferentes.

2.8.2. Generación de la malla

El dominio computacional se construye teniendo en cuenta las dimensiones del quemador y se extiende 0.6 m en la dirección axial y 0.15 m en la radial, para la construcción de la malla se utiliza el mallador nativo de openfoamTM *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 piloto, el segundo a la zona de la entrada de combustible y el tercero a la corriente de aire. El problema es axisimétrico y en openfoamTM puede simularse generando una malla 3D y aplicando condiciones de contorno especiales (tipo *wedge sec.* A.6).

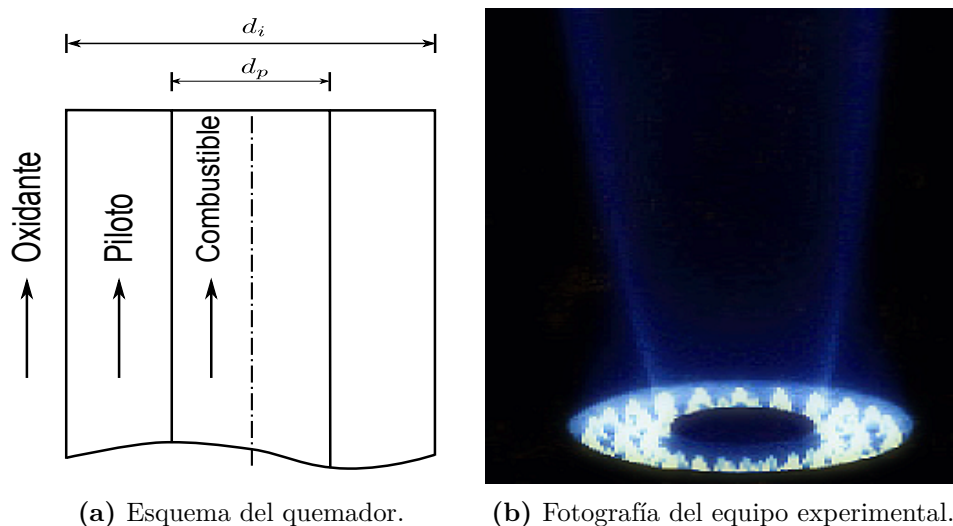


Figura 2.3.: Geometría del quemador utilizado en los experimentos de la llama D de *Sandia*.

En la Fig. 2.3 se pueden observar una fotografía del equipo experimental (Fig. 2.3b) y un esquema que identifica sus dimensiones (Fig. 2.3a). Se construye la malla desde la salida

del quemador utilizando tres bloques de celdas hexaédricas según lo esquematizado en la Fig. 2.4, de esta forma el bloque 1 se extiende desde la entrada del combustible sobre todo el dominio computacional, de la misma forma lo hacen el bloque 2 en el caso del piloto y el tres 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 las 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 0.383×10^{-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 0.12×10^{-3} m en las celdas del bloque 2 hasta un máximo de 1.2×10^{-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*, da como resultado una malla con 40000 celdas hexaédricas (Fig. 2.5). 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, volumen mínimo de las celdas, etc ([35]). Al realizar esta operación se determinó que la malla era adecuada para la simulación a efectuar.

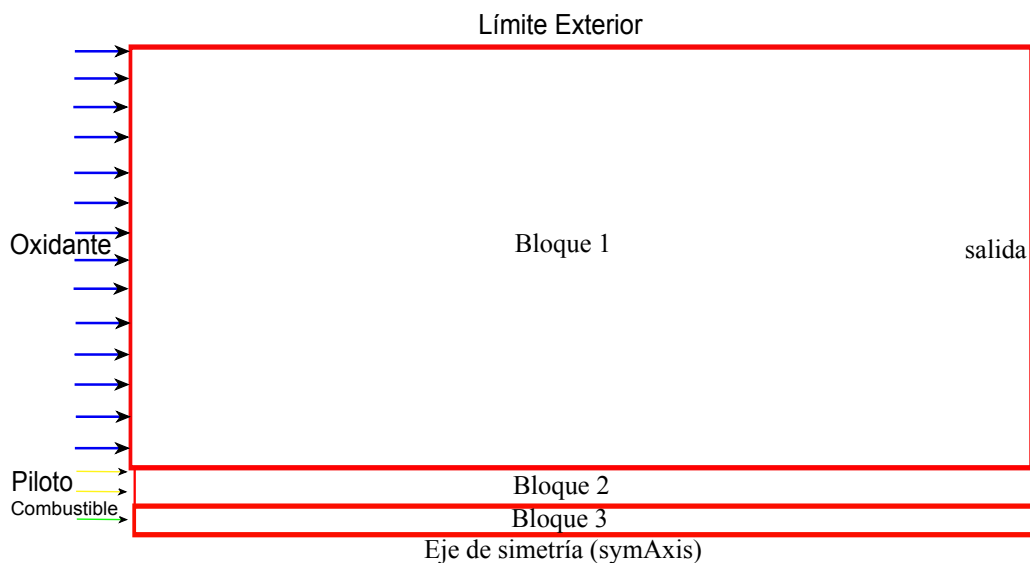


Figura 2.4.: Esquema del mallado por bloques para la llama D de *Sandia*.

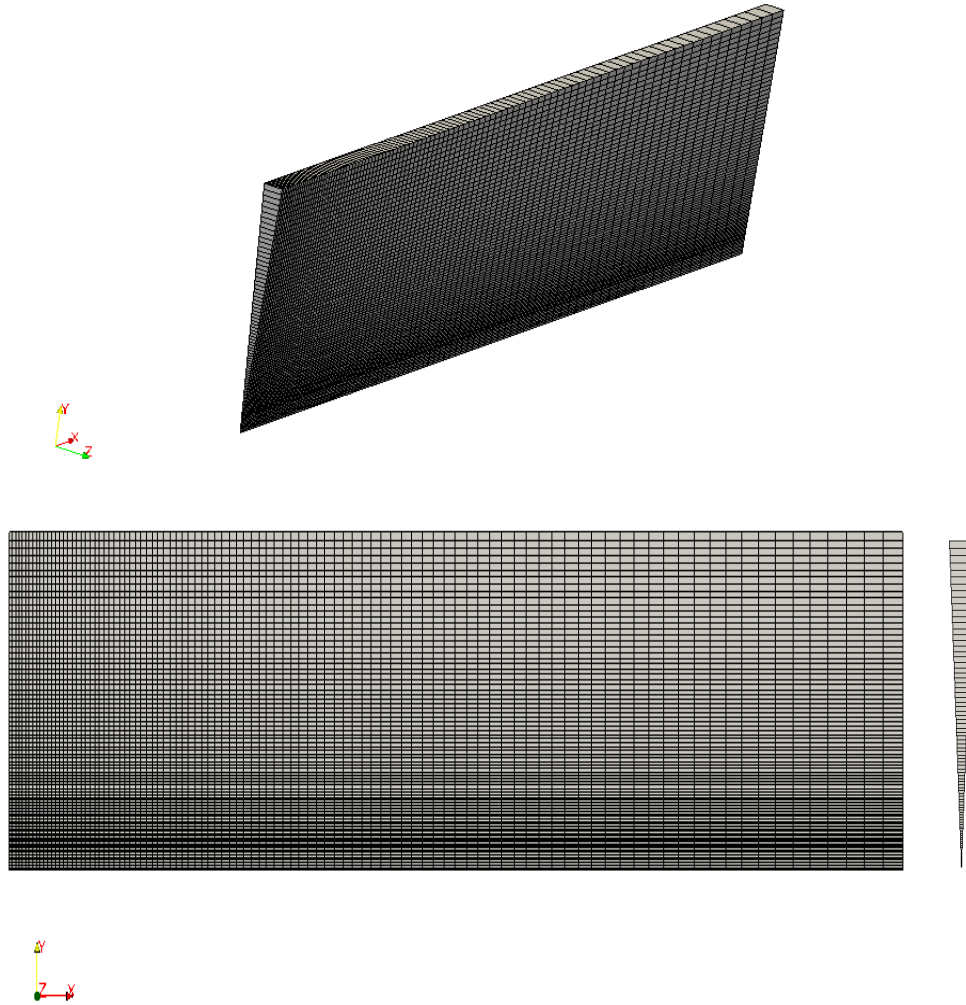


Figura 2.5.: Malla axisimétrica llama D de *Sandia*.

2.8.3. 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 [38]. 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 Eq. 2.88 [9]:

$$\begin{aligned}
 I_t &= 0.16Re^{-1/8} & \varepsilon &= C_\mu^{3/4}k^{3/2}l^{-1} \\
 k &= \frac{3}{2}(UI_t)^2 & l &= 0.07L_t
 \end{aligned}
 \tag{2.88}$$

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. 2.3a); para

el oxidante la longitud lateral (l) de la sección cuadrada 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 Eq. 2.88 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 Y_k , estas se fijan de acuerdo a lo mostrado en la Tab. 2.2. En la Tab. 2.4 se observan las distintas condiciones de borde para cada uno de los contornos considerados¹⁷. Como se puede ver en la Tab. 2.4 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 sólido, 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 2.4.: Condiciones de borde llama D de *Sandia*

Es imperativo seleccionar de forma apropiada tanto las condiciones de borde e iniciales para las variables asociadas al modelo de turbulencia, debido a que las mismas tienen un fuerte impacto en la estabilidad del proceso de cálculo y la precisión de los resultados. Sin embargo y a pesar de que las correlaciones mostradas anteriormente (Eq. 2.88) fueron determinadas para patrones de flujo que no incluyen fenómenos químicos, han mostrado proporcionar buenos resultados cuando son utilizadas para flujos reactivos.

El método numérico a utilizar es inherentemente inestacionario, por lo tanto es necesario imponer condiciones iniciales. Dichas condiciones iniciales se toman de [38] y son:

$$\left. \begin{array}{l} u(0) = 0 \text{ m/s} \quad T(0) = 300 \text{ K} \quad p(0) = 94.536 \text{ Kpa} \\ Y_{N_2}(0) = 0.77 \quad Y_{O_2}(0) = 0.23 \quad Y_k(0) = 0 \end{array} \right\} \quad (2.89)$$

¹⁷En la Tab. 2.4 las abreviaturas fV y zG corresponden respectivamente a la imposición de condiciones de borde del tipo Dirichlet (valor fijo) y Neumann (gradiente nulo).

Nótese que únicamente para el oxígeno y el nitrógeno se imponen condiciones iniciales, esto equivale a suponer que inicialmente el dominio computacional contiene únicamente 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. 2.4 para el flujo de aire.

2.8.4. Selección de los esquemas de discretización y algoritmos de solución

Los esquemas de discretización y los algoritmos de solución para cada término de las ecuaciones de transporte y los sistemas de ecuaciones a resolver se seleccionan de acuerdo a lo expuesto en las sec. A.3, sec. A.4 sec. A.7.2 y sec. A.7.3. Los esquemas de discretización seleccionados son:

- `grad(p|U) → gauss linear`
- `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 el esquema *central upwinded* el cual tal como se explica en la sec. A.3.4.3, requiere la evaluación numérica del gradiente. A su vez para evaluar dichos gradientes se selecciona un esquema que limita el mismo de acuerdo a lo expuesto en la sec. A.3.7.4, de esta forma dado los fuertes efectos convectivos involucrados 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), la cual permite avanzar en el tiempo con la máxima tasa de avance permitida en cada celda¹⁸. 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 de mayor magnitud [40, 42]. El esquema de avance en el tiempo implementado en openfoamTM junto

¹⁸Téngase en cuenta que las ODEs de las reacciones químicas se resuelven de forma independiente y los tiempos fluidodinámicos son mayores que los químicos.

con la técnica SLTS corresponde ya sea al esquema de Euler implícito o explícito (ver sec. A.3.8), 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 sec. A.4 y sec. A.7.3, 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 las matrices resultado de la discretización de las ecuaciones de momento, especies, entalpía sensible, energía cinética turbulenta y 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 para 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 correctores.

2.9. Resultados

Una vez construida la malla, determinadas las condiciones de borde e iniciales y elaborados los archivos de entrada para la selección de los esquemas de discretización, algoritmos de solución y para los modelos termofísico, químico y de turbulencia, se procede a correr el caso en estudio. Para esto se utiliza una computadora equipada con un procesador Intel Core™ i7-2630QM y 8gb de memoria RAM, que permite utilizar 8 hilos para el cálculo en paralelo aprovechando la implementación de la técnica de descomposición de dominio propuesta en `openfoam™`. Adicional a esto se utiliza la función `adjustTimeStep`, la cual proporciona la posibilidad de imponer un número de Courant máximo (en este caso se fija $Co \leq 0.3$) para que en función de éste y de las dimensiones de la malla, el *solver* ajuste el paso de tiempo.

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 CFL fijado se registra un tiempo computacional medio de 1.96s por paso de tiempo y se estima necesario un tiempo de simulación de 0.5s lo que en tiempo computacional se refleja en 188 min. Con la finalidad de analizar el desempeño de `openfoam™` se compararán las distribuciones axiales de temperatura y fracción de masa de las especies con los datos experimentales disponibles.

En la Fig. 2.6 se puede observar la distribución de temperatura sobre el dominio de cómputo para $t = 0.5s$, en esta figura se puede observar como los contornos en la cercanía del

eje de simetría indican como la llama se cierra y delimitan la geometría de la misma, de forma análoga se observa como la temperatura aumenta desde el eje de simetría en la dirección radial. Como fue indicado en la sec. 2.8, se seleccionó la llama D de *Sandia* puesto que se cuentan con datos experimentales para comparar con los resultados obtenidos en la simulación. Los datos experimentales (distribución de las especies y de la temperatura) corresponden a mediciones efectuadas utilizando una combinación de las técnicas de *Raman Scattering* y de *Rayleigh Scattering*¹⁹. 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 [38]. 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 modelo químico utilizado [27]. 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 reacción global empleado para la oxidación del combustible.

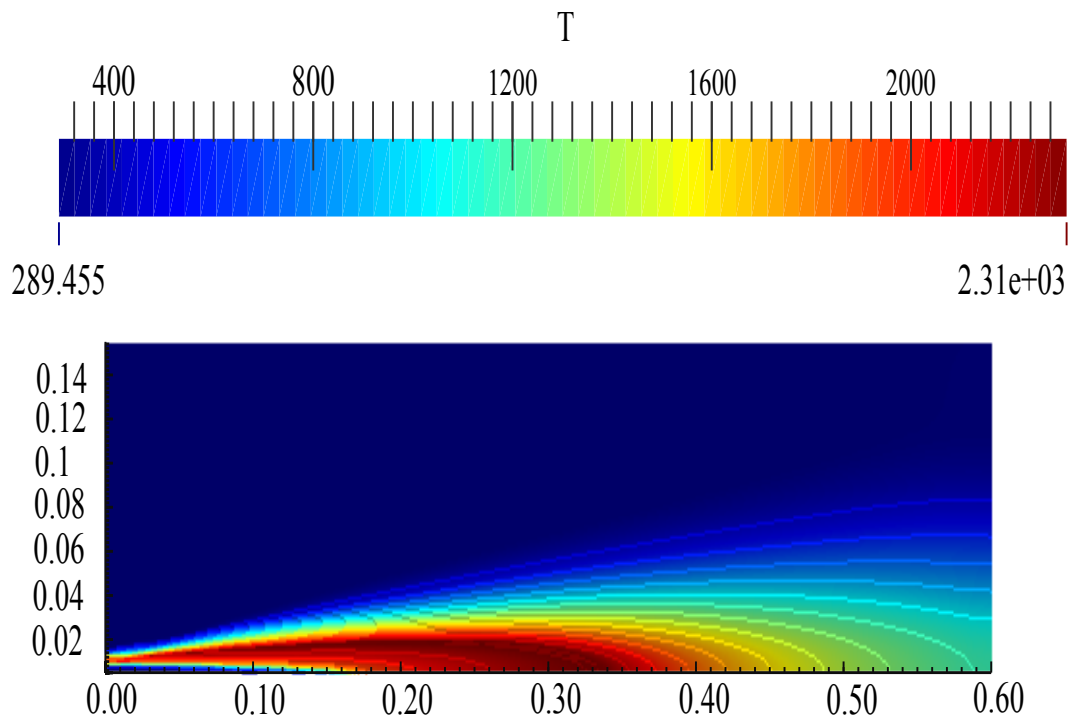


Figura 2.6.: Distribución de temperatura sobre el dominio de cómputo.

En la Fig. 2.7 se comparan la distribución de las fracciones de masa de las especies calculada 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 se aprecia que cuando se consideran por separado las dife-

¹⁹Las 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 [41].

rentes especies, las predicciones numéricas muestran significativas diferencias cualitativas, particularmente en la zona donde se produce la mayor actividad química.

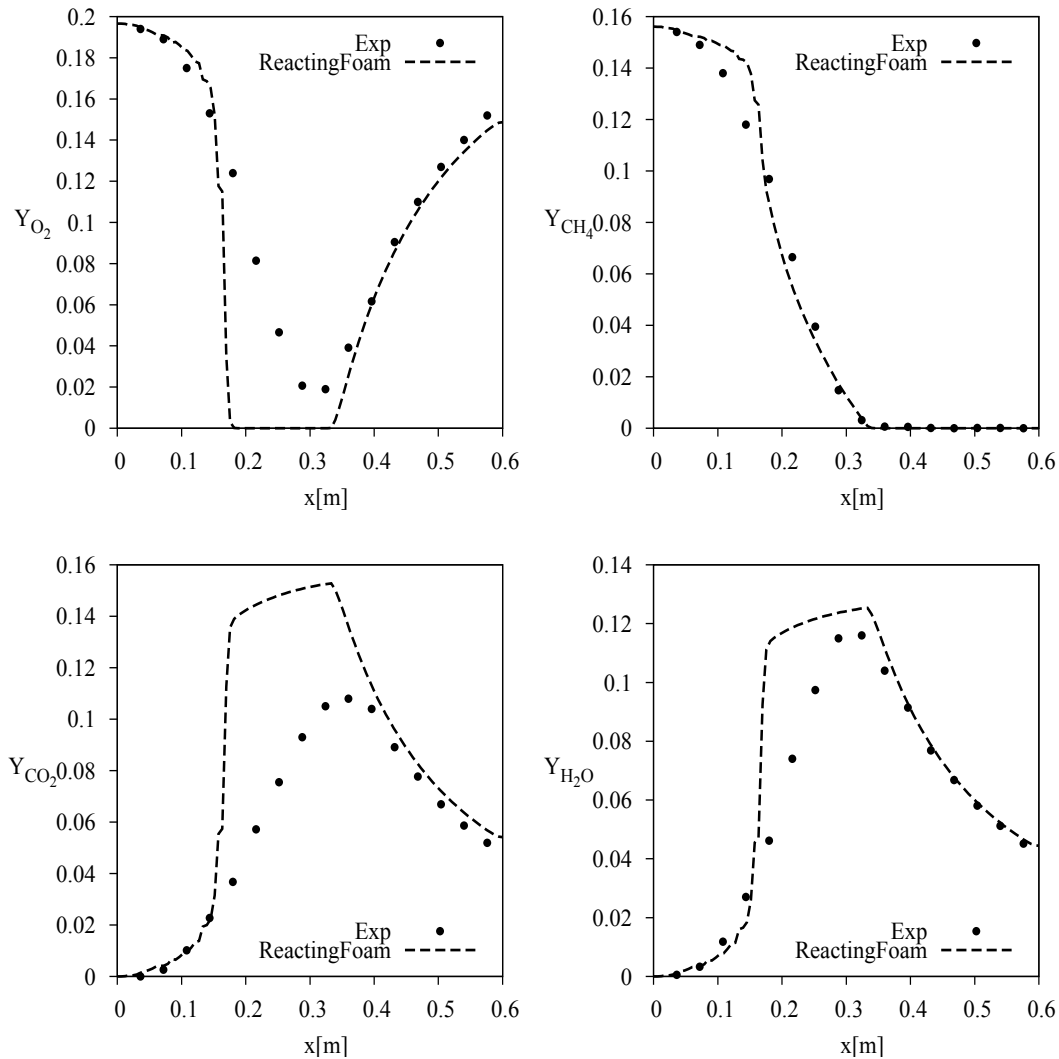


Figura 2.7.: Distribución de las especies sobre el eje de simetría.

En la Fig. 2.7 se observa que cuando $x = 0.32$ m, el CH_4 se ha consumido por completo y la temperatura alcanza su valor máximo (ver Fig. 2.8). Los productos de la combustión (CO_2 y H_2O) luego de alcanzar sus máximos valores en el fin de la zona de reacción, se difunden en la dirección radial del flujo mezclándose con el aire proveniente del túnel de viento y como es de esperar, sus fracciones de masa decaen a medida que la distancia en la dirección axial se incrementa. La fracción de masa de O_2 aumenta en la dirección axial a partir del límite de la zona de reacción, esto es consecuencia de que el oxígeno proveniente del flujo del túnel de viento se difunde en la dirección radial hacia el eje de simetría y se mezcla con los productos de la combustión aumentando así la concentración de oxígeno en dicha región. En la dirección axial en el intervalo $0.15 \text{ m} \leq x < 0.35 \text{ m}$, la fracción de masa de O_2 disminuye porque es consumida por la oxidación del combustible. Los resultados numéricos presentan una sobreestimación de dicho comportamiento en comparación con los datos experimentales que describen una velocidad de consumo menor que si bien se aproxima al consumo total, nunca lo alcanza. Por otro lado la predicción del CO_2 en el

mismo intervalo, indica una mayor velocidad de producción que los datos experimentales. El intervalo considerado ($0.15 \text{ m} \leq x < 0.35 \text{ m}$) puede ser identificado como la zona que presenta mayor actividad química y liberación de calor, pero también es la región donde se han mostrado mayores discrepancias entre los resultados de la simulación y las mediciones experimentales para las fracciones de masa de CO_2 y O_2 .

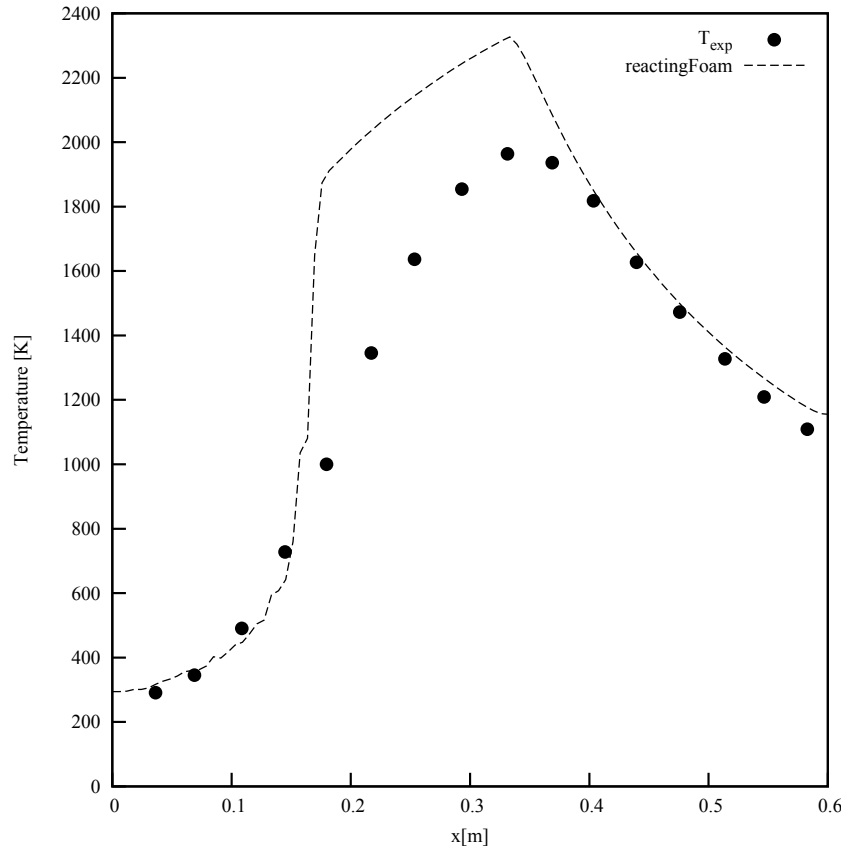


Figura 2.8.: Distribución de temperatura sobre el eje de simetría.

En la Fig. 2.8 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 1964 K, dicho pico es 363 K (18 %) menor que el estimado numéricamente, pero su ubicación en $x = 0.33 \text{ m}$ es la misma que la reportada en la medición experimental. En la región contigua al pico de temperatura, se observa una buena concordancia con respecto al decremento de la temperatura en la dirección del flujo. Nuevamente, se observan las mayores discrepancias entre predicción y experimento en el intervalo $0.15 \text{ m} \leq x < 0.35 \text{ m}$.

La comparación efectuada entre resultados de la simulación y mediciones experimentales, fundamenta la siguiente pregunta: ¿por qué en la zona en donde tienen lugar 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 la combinación de las simplificaciones e hipótesis que se realizaron en el desarrollo del modelo numérico. Bien pueden tener origen en el modelo cinético simplificado utilizado para las reacciones químicas [27] o bien en las hipótesis hechas para cerrar las ecuaciones de transporte turbulento formuladas [30]. También según expresan algunos

investigadores, a la falta de la implementación de un modelo que tenga en cuenta las pérdidas energéticas por radiación [25]. 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 fundamenta en los resultados de Christ [43], que se presentan en la Fig. 2.9 (modelo PaSR con una reacción global y un conjunto de 53 especies y 325 reacciones elementales-*GRI-model*).

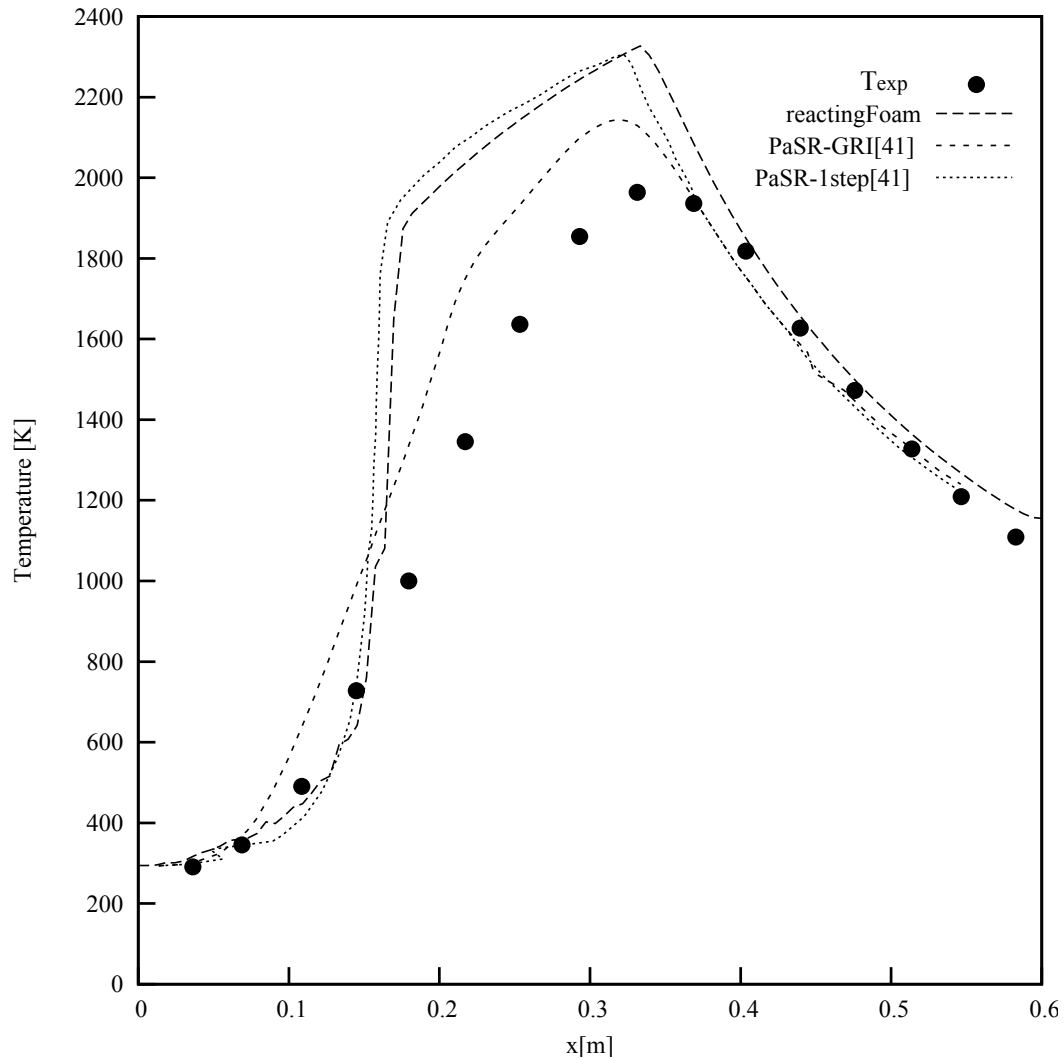


Figura 2.9.: Distribución de temperatura sobre el eje de simetría: comparación con los datos reportados por Christ [43] y con los datos experimentales disponibles .

Con respecto a la convergencia del cálculo, en la Fig. 2.10 se puede observar una gráfica de la evolución de los residuos correspondientes a las fracciones de masa de cada una de las especies reactivas, entalpía sensible y de las variables del modelo de turbulencia con el número de iteraciones. De dicha figura se aprecia como se satisface aproximadamente el criterio de convergencia impuesto previamente 10^{-6} .

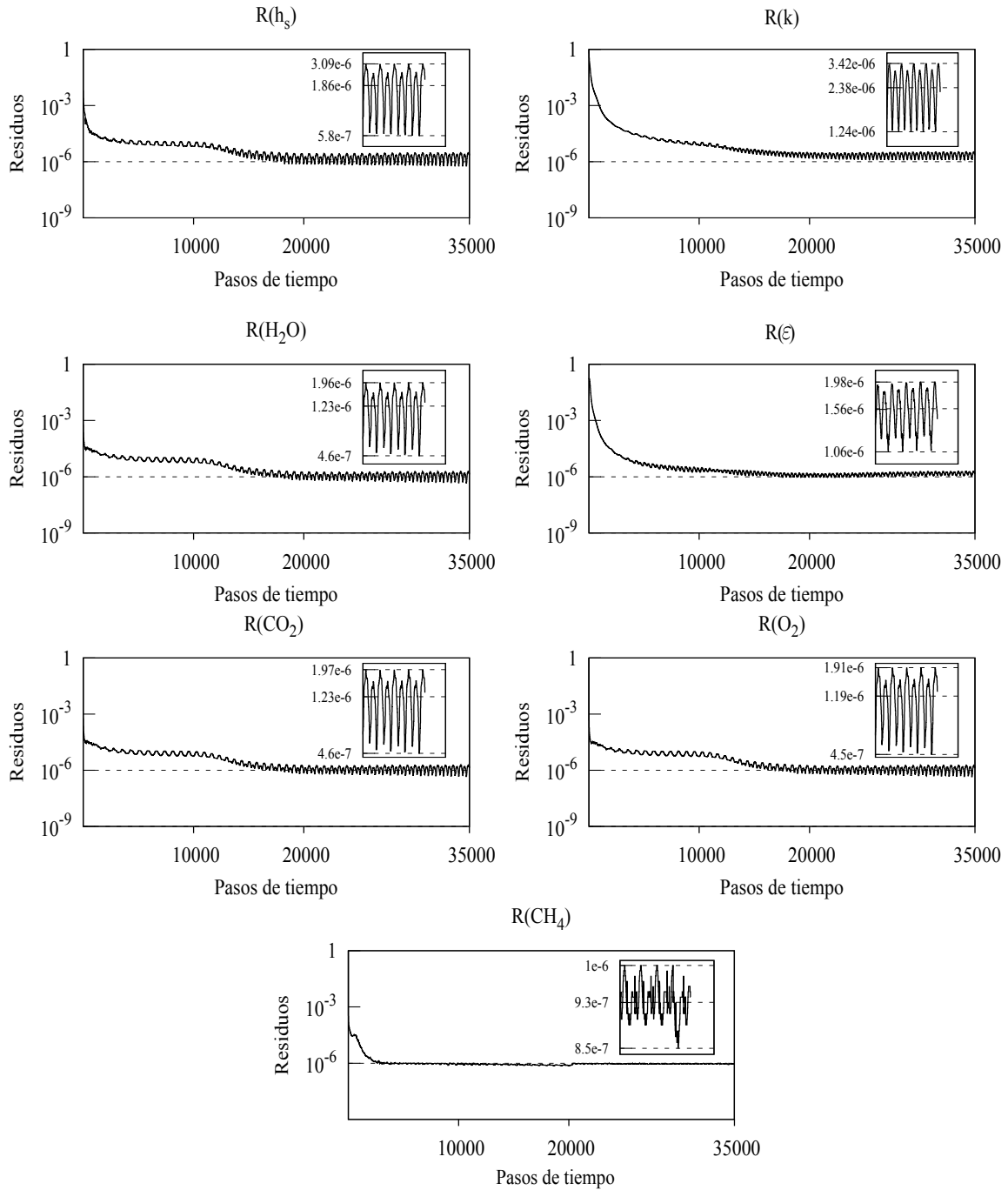


Figura 2.10.: Residuos de O_2 , CH_4 , CO_2 , H_2O , h_s , k y ϵ .

Referencias capítulo 2

- [1] **K. Kuo** and **R. Acharya**, Fundamentals of turbulent and multi-phase combustion, Wiley, 2012.
- [2] **D. Poitou**, **M. EI HAFI** and **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), 2011.
- [3] **G. Bader** and **P. Deuffhard**, *A semi-implicit mid-point rule for stiff systems of ordinary differential equations*, *Number. Math*, vol. 41:pp. 373–398, 1983.
- [4] **W. Vetterling**, **W. Press**, **S. Teukolsky** and **B. Flannery**, Numerical recipes example book (C++): The art of scientific computing, Cambridge University Press, 2nd ed., 2002.
- [5] **M. Liberman**, Introduction to physics and chemistry of combustion: Explosion, flame, detonation, Springer, 2008.
- [6] **R. Barlow**, **J. Frank**, **A. Karpetis** and **J. Chen**, *Piloted methane/air jet flames: Transport effects and aspects of scalar structure*, *Combustion and flame*, vol. 143(4):pp. 433–449, 2005.
- [7] **J. Anderson**, Hypersonic and High-Temperature Gas Dynamics, AIAA Education Series, American Institute of Aeronautics and Astronautics, 2006.
- [8] **J. Chomiak**. and **A. Karlsson**, *Flame fiftoff in diesel sprays, 26th Symposium (Iternational) on Combustion*, pp. 2557–2564, 1996.
- [9] **D. C. Wilcox**, Turbulence modeling for CFD, 2nd Edition. DCW Industries, Inc. - California, US, 1998.
- [10] **D. P. Mishra**, Fundamentals of combustion, Prentice-Hall of India, 1st ed., 2008.
- [11] **J. Blazek**, Computational fluid dynamics: principles and applications, vol. 2, Elsevier Science, 2005.
- [12] **D. R. Stull** and **H. Prophet**, JANAF Thermochemical Tables, 2nd Edition. US National Bureau of Standards. NSRDS-NBS 37, 1971.
- [13] **E. Oran** and **J. Boris**, Numerical simulation of reactive flow, Cambridge University Press, 2nd ed., 2001.
- [14] **R. Pletcher**, **D. A. Anderson** and **J. C. Tannehill**, Computational fluid mechanics and heat transfer, Series in Computational and Physical Processes in Mechanics and Thermal Sciences, Taylor & Francis, 2nd ed., 1997.
- [15] **F. A. Williams**, Combustion theory, Benjamin/Cummings Merlo Park, California, 1985.
- [16] **F. P. Kärrholm**, Numerical modelling of diesel spray injection, turbulence interaction and combustion, Ph.D. thesis, Chalmers University of Technology, 2008.

- [17] **A. Favre**, *Statistical equations of turbulent gases, Problems of hidrodynamics and continuum mechanics*, pp. 231–266, 1969.
- [18] **P. Kundu, I. Cohen and D. Dowling**, *Fluid Mechanics*, Academic Press, Academic Press, 2011.
- [19] **T. Gatski and J. Bonnet**, *Compressibility, turbulence and high speed flow*, Elsevier, 2009.
- [20] **R. Bird, W. Stewart and E. Lightfoot**, *Transport phenomena*, Wiley International edition, John Wiley & Sons, 2006.
- [21] **R. Cant and E. Mastorakos**, *An introduction to turbulent reacting flows*, Imperial College Press, 2008.
- [22] **K. K. Kuo**, *Principles of combustion*, John Wiley & Sons, Inc., 2nd ed., 2005.
- [23] **B. E. Launder and 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.
- [24] **C. K. Law**, *Combustion physics*, Cambridge University Press, 2006.
- [25] **B. Lilleberg, D. Christ, I. S. Ertesvag, K. E. Rian and R. Kneer**, *Numerical simulation with an extinction database for use with the eddy dissipation concept for turbulent combustion*, 2011.
- [26] **M. N. Bui-Pham**, *Studies in structures of laminar hydrocarbon flames.*, Ph.D. thesis, Ph.D Thesis,. UCSD., 1992.
- [27] **O. A. Marzouk and E. D. Huckaby**, *A comparative study of eight finite-rate chemistry kinetics for CO/h₂ combustion, Engineering Applications of Computational Fluid Mechanics*, vol. Vol. 4(No. 3):pp. 331–356, 2010.
- [28] **O. Marzouk and E. Huckaby**, *Simulation of a swirling gas-particle flow using different $k - \varepsilon$ models and particle-parcel relationships, Engineering Letters*, vol. 18(1), 2010.
- [29] **S. McAllister., J. Y. Chen. and A. C. F. Pello**, *Fundamental of combustion processes*, Mechanical Engineering Series - Springer Science+Business Media, LLC 2011, 2011.
- [30] **N. Peters.**, *Turbulent combustion*, Cambridge University Press, 2000.
- [31] **I. Glassman and R. Yetter**, *Combustion*, Academic Press, Academic Press, 2008.
- [32] **N. P. A. Nordin**, *Complex chemistry modeling of diesel spray combustion*, Ph.D. thesis, Chalmers University of Technology, 2001.
- [33] **S. Pope**, *Turbulent flows*, Cambridge University Press, 2000.
- [34] **OpenFOAM**, 2010, URL www.openfoam.com, source Code.

- [35] openFoam UserGuide, OpenCFD Ltd, 2010.
- [36] **R. Kee, M. Coltrin and P. Glarborg**, Chemically reacting flow: Theory and practice.
- [37] **J. Warnatz, U. Maas and R. Dibble**, Combustion: physical and chemical fundamentals, modeling and simulation, experiments, pollutant formation, Springer Verlag, 2006.
- [38] **R. Barlow and J. Frank**, *Piloted CH_4 /air flames c, d, e, and f*, Tech. rep., Sandia National Laboratories, 2007.
- [39] **R. Kee, F. Rupley and J. Miller**, *The chemkin thermodynamic data base*, Tech. rep., Sandia National Labs., Livermore, CA (USA), 1990.
- [40] **F. Coquel, Q. Nguyen, M. Postel and Q. Tran**, *Local time stepping applied to implicit-explicit methods for hyperbolic systems*, *Multiscale Modeling & Simulation*, vol. 8(2):pp. 540–570, 2010.
- [41] **C. Tropea, A. Yarin and J. Foss**, Springer handbook of experimental fluid mechanics, vol. 1, Springer, 2007.
- [42] **M. Yusoff, F. Bakhtar and J. Kajang-Puchong**, *A two-dimensional time-accurate euler solver for turbo machinery applications*, *Journal-Institution of Engineers, Malaysia*, vol. 5(3), 1998.
- [43] **D. Christ**, *Simulating the combustion of gaseous fuels*, 6th OpenFoam Workshop Pennsylvania State University State College, PA, USA, 13-16 June 2011.
- [44] **H. Versteeg and W. Malalasekera**, An introduction to computational fluid dynamics: the finite volume method, 2nd ed.
- [45] **T. Poinsot and D. Veynante**, Theoretical and numerical combustion, R. T. Edwards, Inc., 2nd ed., 2005.
- [46] **H. Weller, G. Tabor, H. Jasak and C. Fureby**, *A tensorial approach to computational continuum mechanics using object orientated techniques*, *Comp. in Phys.*, vol. 12(6):pp. 620–630, 1998.
- [47] **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.
- [48] **B. Poling, J. Prausnitz and J. P. O’connel**, The properties of gases and liquids, vol. 5, McGraw-Hill New York, 2001.

3. Flujo supersónico

Introducción

Luego de haber mostrado en el Capítulo 2 el buen desempeño de openfoam™ al tratar el problema de la combustión difusiva el siguiente objetivo de este trabajo es mostrar sus capacidades en la simulación de flujos supersónicos. Se presentan tres casos de prueba con resultados obtenidos mediante la aplicación de dos de los *solvers* de la gama ofrecida por openfoam™, *sonicFoam* y *rhoCentralFoam*. El primero es descrito en la bibliografía específica como un *solver* basado en la solución de una ecuación para la presión y el segundo como uno que mantiene la ecuación de continuidad y previa determinación de la temperatura, calcula la presión.

A continuación se presentan una breve introducción al patrón de flujo que se desea resolver, sus características más importantes y las ecuaciones de gobierno en forma genérica. También la forma que adoptan estas ecuaciones para su empleo en cada uno de los *solvers* seleccionados, la descripción de las técnicas aplicadas en cada *solver*, la implementación numérica y la organización de cada uno de los casos de prueba a resolver junto con las respectivas soluciones obtenidas.

Si bien los *solvers* utilizados cuentan con la posibilidad de resolver las ecuaciones de Navier-Stokes e incluso en el caso de *sonicFoam* incluir turbulencia, aquí 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 tres casos de prueba que cuentan con soluciones analíticas y/o datos experimentales. Los casos que se resuelven son: flujo sobre una cuña, perfil doble cuña, cuerpo romo 2D y axisimétrico.

Nomenclatura

Abreviaturas

CFL	Condición de Courant–Friedrichs–Lewy
EDPs	Ecuaciones en derivadas parciales
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
Co	Número de courant
C_v	Calor específico a volumen constante
c_p	Coefficiente de presión
$\underline{\underline{D}}$	Tensor de deformaciones
E	Energía total
e	Energía interna
e_s	Energía sensible
H	Entalpía total
h_s	Entalpía sensible.
M	Número de Mach.
p	Presión.
p^*	Presión de inicio algoritmo PISO
\mathbf{q}	Vector que representa al flujo de calor por conducción (difusión)
R	Constante particular del gas
R_u	Constante universal de los gases
T	Temperatura
T_0	Temperatura de referencia
t	Tiempo
\mathbf{U}	Velocidad de transporte
V_p	Volumen de la celda
W	Peso molecular

Alfabeto Griego

α	Ángulo de ataque
α_{eff}	Difusividad térmica efectiva
$\beta(r)$	Función limitadora
γ	Relación de calores específicos
cap-com Δs	Cambio de entropía
Δt	Paso de tiempo fluidodinámico
δ	Factor de estiramiento
$\delta_{i,j}$	Delta de Kronecker

Super θ_s	Ángulo de la onda de choque
θ_w	Ángulo de la cuña
ρ	Densidad
$\underline{\underline{\tau}}$	Tensor de tensiones viscosas.
ψ	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

Operadores

$\text{dev}(), ()^{\text{dev}}$	Parte desviadora
:	Doble contracción
$G'(e)$	Operador discreto que representa los flujos convectivos y difusivos de energía
Tr	Traza
$\Delta, (), i$	Operador divergencia discreto
	Norma
$S_{ij,i}$	Operador discreto que representa los flujos convectivos y difusivos de momento

3.1. 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 (Capítulo 2), 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 químicas [5]. En casos de flujos con altas velocidades los cambios en la densidad están relacionados con el estado propio del fluido y los gradientes de presión que 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 [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 ($a = \frac{\partial p}{\partial \rho} = \sqrt{\gamma RT}$). Si el gas está en movimiento, la perturbación continúa moviéndose con velocidad acústica relativa al gas en movimiento. 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).

Un fluido se dice es supersónico cuando el número de Mach está comprendido entre $1 < M < 5$ ¹. Si $M > 5$ se dice que el flujo es hipersónico. En un fluido hipersónico las hipótesis de gas perfecto pueden ser no aplicables.

Dependiendo de la geometría o de los cambios de presión inducidos, dentro del régimen supersónico pueden aparecer los siguientes tipos de ondas:

- **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. La segunda ley de la termodinámica se cumple porque a través de la onda se verifica un aumento de entropía ($\Delta s > 0$).

- **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

¹En 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.

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.

■ **Discontinuidad de contacto**

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). 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.

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.

3.2. 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

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U}) = 0 \tag{3.1}$$

2. Ecuación de conservación del momento (sin considerar fuerzas de campo)

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \mathbf{U}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \mathbf{U}) = \nabla p + \nabla \cdot \underline{\underline{\boldsymbol{\tau}}} \tag{3.2}$$

donde ρ 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

$$\underline{\underline{\boldsymbol{\tau}}} = 2\mu \text{dev} (\underline{\underline{\mathbf{D}}}) \tag{3.3}$$

En Eq. 3.3, μ es el coeficiente de viscosidad dinámica, $\underline{\underline{\mathbf{D}}} = \frac{1}{2}[\nabla \mathbf{U} + (\nabla \mathbf{U})^T]$ es el

tensor 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).

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho E) + \nabla \cdot [\mathbf{U}(\rho E)] + \nabla \cdot \mathbf{q} + \nabla \cdot [(p\mathcal{I} - \underline{\underline{\boldsymbol{\tau}}})\mathbf{U}] = 0 \quad (3.4)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho e_s) + \nabla \cdot [\mathbf{U}(\rho e_s)] + \nabla \cdot \mathbf{q} + (p\mathcal{I} - \underline{\underline{\boldsymbol{\tau}}})\nabla \cdot \mathbf{U} = 0 \quad (3.5)$$

En la Eq. 3.4 y Eq. 3.5 la energía sensible y total están dadas por:

$$e_s = h_s - \frac{p}{\rho} = \int_{T_0}^T C_v dT - RT_0/W \quad (3.6)$$

$$E = e_s + \frac{1}{2}\mathbf{U} \cdot \mathbf{U} \quad (3.7)$$

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:

$$e_s = \left[\frac{(\rho E)}{\rho} - \frac{1}{2}\mathbf{U} \cdot \mathbf{U} \right] \quad (3.8)$$

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 γ adoptan los siguientes valores:

$$C_p = 1004.5 \frac{\text{J}}{\text{Kg K}} \quad (3.9)$$

$$C_v = 717.5 \frac{\text{J}}{\text{Kg K}} \quad (3.10)$$

$$\gamma = \frac{7}{5} \quad (3.11)$$

Para determinar la temperatura se utiliza nuevamente el proceso iterativo descrito al final de la sec. 2.2.2, 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

$$p = \rho \frac{R_u}{W} T = \rho R T = \frac{\rho}{\psi} \quad (3.12)$$

Es de hacer notar que *sonicFoam* cuenta con la opción de simular campos de flujo turbulentos. Al igual que en el Capítulo 2, se utilizan los promedios de Favre para formular las ecuaciones de gobierno aplicables al flujo turbulento.

- Conservación de la masa

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{U}}) = 0 \quad (3.13)$$

- Conservación del momento

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{U}}) + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{U}} \tilde{\mathbf{U}}) + G(\tilde{\mathbf{U}}) = -\nabla \bar{p} \quad (3.14)$$

el operador G es idéntico al descrito en la sec. 2.2.3.

- Ecuación de la energía sensible

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{e}_s) + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{U}} \tilde{e}_s) + \nabla \cdot (\alpha_{\text{eff}} \nabla \cdot \tilde{e}_s) + \bar{p} \nabla \cdot \tilde{\mathbf{U}} = 0 \quad (3.15)$$

aquí también se emplea la difusividad efectiva la cual se introdujo en la sec. 2.2.2.

Nótese que en la ecuación de la energía sensible se han ignorado los términos asociados con el calentamiento debido a efectos viscosos moleculares.

3.3. Implementación numérica

Para realizar las simulaciones previstas se emplearán dos *solvers* alternativos del paquete *openfoam*TM; dichos *solvers* corresponden a uno basado en densidad y otro en presión. El *solver* basado en presión (*sonicFoam*) utiliza el algoritmo PISO para flujo compresible descrito de forma genérica en el sec. A.5. En lo que respecta al *solver* basado en densidad (*rhoCentralFoam*), éste utiliza la técnica de esquemas centrados de Kurganov, Tadmor, Noelle y Petrova [7–10, 12]. El objetivo de esta sección es proporcionar una introducción a dichas técnicas y su correspondiente implementación en el ámbito de *openfoam*TM.

3.3.1. *SonicFoam*

Aquí se extiende la descripción del algoritmo PISO dada en la sec. A.5. La aplicación del algoritmo PISO 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 obtenidos 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 [15].

A continuación se presentan las ecuaciones de transporte de masa (Eq. 3.1), momento (Eq. 3.2) y energía (Eq. 3.5) en forma discreta utilizando el esquema de Euler implícito:

$$\frac{1}{\Delta t}(\rho^n - \rho^{n-1}) + (\rho u_i)_{,i}^n = 0 \quad (3.16)$$

$$\frac{1}{\Delta t} [(\rho u_j)^n - (\rho u_j)^{n-1}] = -S_{ij,i}^n - (p)_{,j}^n \quad (3.17)$$

$$\frac{1}{\Delta t} [(\rho e_s)^n - (\rho e_s)^{n-1}] + (\rho e_s u_i)_{,i}^n = -(p u_i)_{,i}^n - (\tau_{ij} u_i)_{,j}^n \quad (3.18)$$

aquí $n-1$ y n denotan los pasos de tiempo sucesivos, $S_{ij,i}$ los flujos convectivos y difusivos de momento en forma discreta 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 [15, 18]:

$$S_{ij,i} = S_{ij,i}^{(D)} + S_{ij,i}^{(N)} = A_{ji}^{(D)} u_i + S_{ij,i}^N \quad (3.19)$$

El método PISO involucra un procedimiento de predicción-corrección no iterativo ² 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 [15]. Aquí se centra la atención en el procedimiento de dos etapas.

3.3.1.1. 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).

²El procedimiento predicción-corrección resulta ser no iterativo al involucrar distintas ecuaciones en cada etapa.

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^{*3} .

$$\left(\frac{\delta_{ij}}{\Delta t} + \frac{A_{ji}^{(D)}}{\rho^{n-1}} \right) (\rho^{n-1} u_i^*) = -S_{ij,i}^{(N)} - (p^{n-1})_{,j} + \frac{\rho^{n-1} u_i^{n-1}}{\Delta t} \quad (3.20)$$

Primer corrector de la presión

Se escribe la ecuación de momento en forma explícita:

$$\left(\frac{\delta_{ij}}{\Delta t} + \frac{A_{ji}^{(D)}}{\rho^{n-1}} \right) (\rho^* u_i^{**}) = -S_{ij,i}^{*(N)} - p_{,j}^* + \frac{\rho^{n-1} u_i^{n-1}}{\Delta t} \quad (3.21)$$

Luego, restando la Eq. 3.20 de la Eq. 3.21 se puede escribir la ecuación de momento en forma incremental:

$$\rho^* u_i^{**} - \rho^{n-1} u_i^* = - \left(\frac{\delta_{ij}}{\Delta t} + \frac{A_{ji}^{(D)}}{\rho^{n-1}} \right)^{-1} (p^* - p^{n-1})_{,j} \quad (3.22)$$

Se utiliza la ecuación de continuidad en la forma:

$$(\rho^* u_i^{**})_{,i} = - \frac{1}{\Delta t} (\rho^* - \rho^{n-1}) \quad (3.23)$$

Diferenciando la Eq. 3.22 y usando la Eq. 3.23 se obtiene la ecuación para la presión:

$$\left[\left(\frac{\delta_{ij}}{\Delta t} + \frac{A_{ji}^{(D)}}{\rho^{n-1}} \right)^{-1} (p^* - p^{n-1})_{,j} \right]_{,i} = (\rho^{n-1} u_i^*)_{,i} + \frac{1}{\Delta t} (\rho^* - \rho^{n-1}) \quad (3.24)$$

Al resolver esta ecuación se obtiene p^* , luego por medio de la ecuación de estado (Eq. 3.12) se determina la densidad:

$$\rho^* = p^* \psi \quad (3.25)$$

A continuación empleando la Eq. 3.23 se corrige la velocidad (u_i^{**}) utilizando los campos de presión y densidad obtenidos con la Eq. 3.24 y la Eq. 3.25.

Predictor de la energía

En este paso la ecuación de la energía (Eq. 3.18) se resuelve de forma implícita

$$\left(\frac{1}{\Delta t} + \frac{B^{(D)}}{\rho^*} \right) (\rho^* e_s^*) = -(\rho e_s u_i)_{,i}^{*(N)} - (p^* u_i^{**})_{,i} + (\tau_{ij} u_i^{**})_i + \frac{\rho^{n-1} e_s^{n-1}}{\Delta t} \quad (3.26)$$

³Aquí δ_{ij} corresponde al delta de Kronecker

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 (Segundo corrector de momento)

La ecuación de momento se escribe en la forma:

$$\left(\frac{\delta_{ij}}{\Delta t} + \frac{A_{ji}^{(D)}}{\rho^*} \right) (\rho^{**} u_i^{***}) = -S_{ij,i}^{**(N)} - (p^{**})_{,j} + \frac{\rho^{n-1} u_i^{n-1}}{\Delta t} \quad (3.27)$$

cuya forma incremental es

$$\begin{aligned} \rho^{**} u_i^{***} - \rho^* u_i^{**} = & \\ & \left(\frac{\delta_{ij}}{\Delta t} + \frac{A_{ji}^{(D)}}{\rho^*} \right)^{-1} \left[-S_{ij,i}^{**(N)} + S_{ij,i}^{*(N)} - \right. \\ & \left. A_{ij} \frac{\rho^* - \rho^{n-1}}{\rho^{n-1}} u_i^{**} - (p^{**} - p^*)_{,j} \right] \end{aligned} \quad (3.28)$$

combinando con la ecuación de continuidad

$$(\rho^{**} u_i^{**})_{,i} = -\frac{1}{\Delta t} (\rho^{**} - \rho^*) \quad (3.29)$$

y con la ecuación de estado escrita ahora de la forma:

$$\rho^{**} = p^{**} \psi^* \quad (3.30)$$

se puede obtener la nueva ecuación para la presión:

$$\begin{aligned} \left[\left(\frac{\delta_{ij}}{\Delta t} + \frac{A_{ji}^{(D)}}{\rho^*} \right)^{-1} (p^{**} - p^*)_{,j} \right]_{,i} - \frac{\psi^*}{\Delta t} (p^{**} - p^*) = & \\ & \left[\left(\frac{\delta_{ij}}{\Delta t} + \frac{A_{ji}^{(D)}}{\rho^*} \right)^{-1} \left\{ (S_{ki,k}^{*(N)} - S_{ki,k}^{**(N)}) \right. \right. \\ & \left. \left. - A_{ji} \left(\frac{\rho^* - \rho^{n-1}}{\rho^{n-1}} \right) u_i^{**} \right\} \right]_{,i} \\ & + \frac{p^*}{\Delta t} (\psi^* - \psi^{n-1}) \end{aligned} \quad (3.31)$$

Resolviendo la Eq. 3.31 se obtiene p^{**} y las ecuaciones Eq. 3.30 y Eq. 3.28 proporcionan respectivamente a ρ^{**} y u_i^{***} .

Segundo predictor de la energía

La ecuación de la energía es actualizada en la siguiente forma :

$$\left(\frac{1}{\Delta t} + \frac{B^{(D)}}{\rho^{**}} \right) (\rho^{**} e_s^{**}) = - (\rho e_s u_i)_{,i}^{**(N)} - (p^{**} u_i^{***})_{,i} + (\tau_{ij} v_i^{***})_{,j} + \frac{\rho^{n-1} e_s^{n-1}}{\Delta t} \quad (3.32)$$

Así, T^{**} puede ser evaluado 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 [15, 18].

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 sec. 2.7.

3.3.2. *RhoCentralFoam*

Al igual que el algoritmo PISO la técnica utilizada en *rhoCentralFoam* no involucra *solvers* de Riemann y también provee soluciones no oscilatorias de notable calidad. Esto la hace muy atractiva en lo que respecta a su utilización en problemas con geometrías complejas en los cuales se requiere utilizar grillas de celdas poliédricas y arbitrario número de superficies.

Los esquemas básicos de *rhoCentralFoam* fueron introducidos por Kurganov y Tadmor (KT), y Kurganov, Noelle y Petrova (KNP) en el año 2000 [8, 10]. Resultan una mejora al esquema centrado de Nessyahu y Tadmor introducido en la década de los 90's [11], los cuales pueden ser vistos como una modificación al esquema de Lax-Friedrich en el sentido de que el algoritmo se basa en diferencias centradas.

En flujos compresibles a 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 [12]:

$$\int_V \nabla \cdot [\mathbf{U}\Psi] dV = \sum_f [\mathbf{S}_f \cdot \mathbf{U}_f] \Psi_f \approx \sum_f \phi_f \Psi_f \quad (3.33)$$

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:

$$\sum_f \phi_f \Psi_f = \sum_f [\alpha \phi_{f_+} \Psi_{f_+} + (1 - \alpha) \phi_{f_-} \Psi_{f_-} + \omega_f (\Psi_{f_-} - \Psi_{f_+})] \quad (3.34)$$

En la Eq. 3.34 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 Eq. 3.34 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.e, $\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \nabla \cdot [\mathbf{U}(\rho u_i)]$). Este término difusivo adicional usa un flujo volumétrico ω_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_- [12].

Los flujos volumétricos φ_{f_+} y φ_{f_-} asociados a las velocidades locales de propagación pueden ser determinados de la siguiente forma:

$$\varphi_{f_+} = \max(a_{f_+} |\mathbf{S}_f| + \phi_{f_+}, a_{f_-} |\mathbf{S}_f| + \phi_{f_-}, 0) \quad (3.35)$$

$$\varphi_{f_-} = \max(a_{f_+} |\mathbf{S}_f| - \phi_{f_+}, a_{f_-} |\mathbf{S}_f| - \phi_{f_-}, 0) \quad (3.36)$$

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 Eq. 3.34 aparece el coeficiente de ponderación α , éste determina el grado de *upwinded* que se le da al esquema. Si se toma al coeficiente $\alpha = 1/2$, el esquema resulta ser centrado debido a que las contribuciones de f_+ y f_- son ponderadas de igual forma.

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 ω_f se determina como [12]:

$$\omega_f = \begin{cases} \alpha \max(\varphi_{f_+}, \varphi_{f_-}) & \text{Para el esquema de KT} \\ \alpha (1 - \alpha) (\varphi_{f_+} + \varphi_{f_-}) & \text{Para el esquema de KNP} \end{cases} \quad (3.37)$$

El método propuesto requiere la interpolación de los flujos f_+ y f_- de las distintas variables involucradas (ρ , T , etc) desde los centros de las celdas vecinas hacia las caras intercelda. 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 ⁴[1, 2, 4]:

⁴Por 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.

VanLeer	$\frac{r+ r }{1+r}$
VanAlbada	$\frac{r+r^2}{1+r^2}$
MinMod	$\max(0, \min(1, r))$

Tabla 3.2.: Funciones limitadoras: VanLeer, VanAlbada y MinMod

Así, la interpolación f_+ de Ψ puede ser evaluada según:

$$\Psi_{f_+} = (1 - g_{f_+}) \Psi_P + g_{f_+} \Psi_N \quad (3.38)$$

donde $g_{f_+} = \beta(1 - w_f)$. El coeficiente de ponderación w_f dado por:

$$w_f = \frac{|\mathbf{S}_f \cdot \mathbf{d}_{fN}|}{|\mathbf{S}_f \cdot \mathbf{d}_{PN}|} \quad (3.39)$$

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 al centro de la cara intercelda con el centroide de la celda vecina (ver Fig. 3.1).

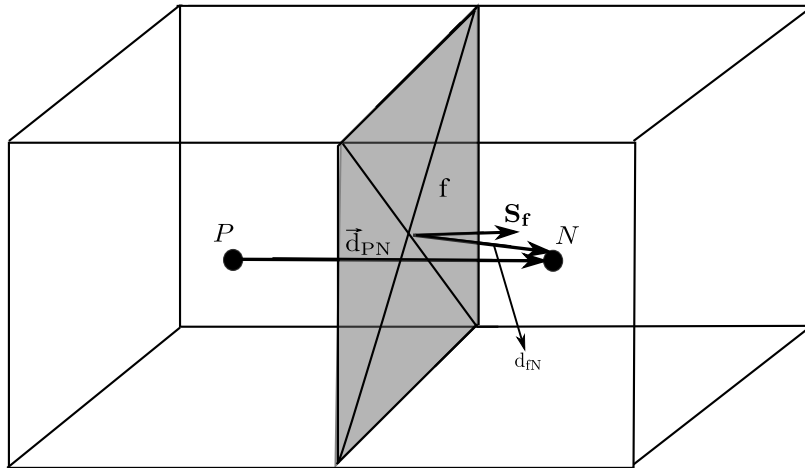


Figura 3.1.: Discretización por volúmenes finitos (vectores involucrados en el cómputo de w_f)

Los términos gradientes se discretizan de acuerdo a lo que se expone en la sec. A.3.7 del Apéndice A. El procedimiento de interpolación se divide de acuerdo a las direcciones f_+ y f_- [9, 12]:

$$\sum_f \mathbf{S}_f \Psi_f = \sum_f [\alpha \mathbf{S}_f \Psi_{f_+} + (1 - \alpha) \mathbf{S}_f \Psi_{f_-}] \quad (3.40)$$

Las interpolaciones en f_+ y f_- utilizan las funciones limitadoras que fueron descritas previamente (Eq. 3.38).

En openfoam™ la implementación numérica de *rhoCentralFoam* se realiza utilizando los archivos `readFluxScheme.H`, `createFields.H`, `rhoBoundaryTypes.H` 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, ρU , ρe , T , ψ , p , e). Las condiciones de borde en general se imponen sobre p , T y U , pero en este caso también se requiere imponer condiciones sobre ρ , el archivo `rhoBoundaryTypes.H` impone condiciones a ρ 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 α y ω_f el grado *upwinded* del esquema numérico).

3.4. 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 una cuña, flujo sobre un perfil tipo doble cuña y al 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.

3.4.1. 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)`

éste corresponde al término $\nabla \cdot (\rho (a_p)^{-1} \nabla p)$ de la ecuación de la presión. Dicho término se discretiza utilizando el esquema centrado con corrección. En cuanto a los algoritmos de solución, se mantienen los utilizados en la sec. 2.8.4.

En el caso de *rhoCentralFoam* se selecciona el esquema de Kurganov, Noelle y Petrova (NKP) atendiendo a que éste ha mostrado una mejor precisión comparado con el esquema de Kurganov y Tadmor [12]. Para llevar a cabo el avance en el tiempo se utiliza el esquema de Euler explícito. Los términos convectivos se evalúan de acuerdo a lo descrito en sec. 3.3.2. 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 ser *rhoCentralFoam* explícito la matriz resultante de la discretización resulta ser diagonal, por lo tanto no se requiere ningún algoritmo especial de solución, por lo que dentro de openfoam™ se cuenta con el solver `Diagonal` el cual implementa el procedimiento de solución aplicable a matrices diagonales [14].

3.4.2. 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 inviscido, 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 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 , μ y Pr . El formato de dicho archivo se puede ver en la Lista de entrada 3.1.

```

1 thermoType          ePsiThermo<pureMixture<constTransport
2 specieThermo<eConstThermo<perfectGas>>>>;
3 mixture             GasName N W (Cp,Cv) Hf mu Pr ;

```

Lista de entrada 3.1: Entrada de los datos para el modelo termofísico

En la línea 1 de Lista de entrada 3.1 se proporciona al *solver* el modelo termofísico a utilizar, la primera entrada `ePsiThermo` indica que el modelo se basa en la energía interna (e) y la compresibilidad (ψ). A 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, dado W y R 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 ($p = \rho RT$).

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` el 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.

3.4.3. Flujo supersónico sobre una cuña

Como primer caso se resuelve el patrón de flujo sobre una cuña. Las condiciones de la corriente libre serán identificadas por medio del subíndice 1 y las condiciones detrás de la onda por el subíndice 2 (ver Fig. 3.2). En este caso se consideran como patrones para medir la calidad de los resultados obtenidos, al ángulo de la onda de choque (θ_s), relación de presiones (p_2/p_1), relación temperaturas (T_2/T_1) y número de Mach (M_2) detrás de la onda. Se selecciona el ángulo de la cuña (θ_w) igual a 15° y se resuelve el patrón de flujo para los siguientes números de Mach de la corriente libre $M_1 = \{1.65, 1.75, 2.25, 2.5, 3, 3.5\}$. Los resultados obtenidos se comparan con la solución analítica disponible para ondas de choque oblicuas [13].

Para la simulación se utiliza una malla computacional con dos bloques de celdas hexaédricas, con un total de 50000 celdas. Las condiciones de la corriente libre corresponden a $p_1 = 100$ kPa $T_1 = 270$ K. En la zona de salida mientras el flujo detrás de la onda sea supersónico, se impone la condición de gradiente nulo, con lo cual se garantiza la adherencia de la onda a la cuña.

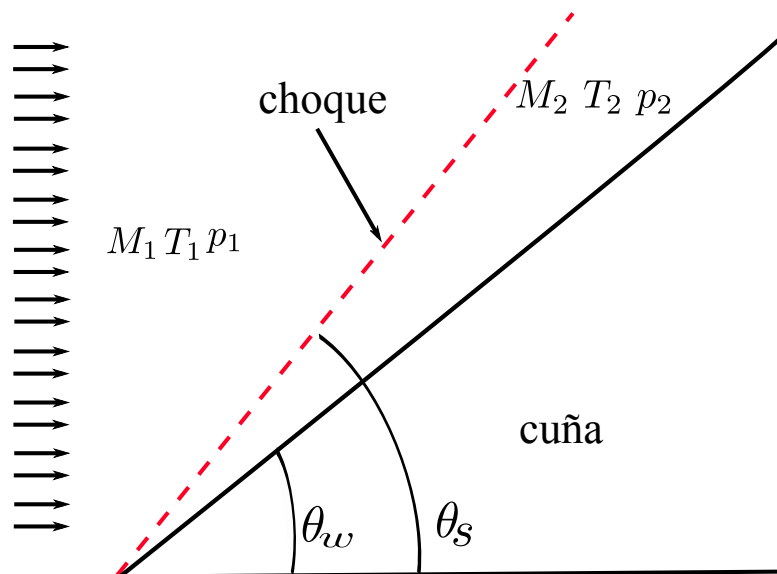


Figura 3.2.: Flujo supersónico sobre una cuña.

Si la salida es subsónica ($M < 1$) y se pretende construir condiciones de contorno absolutamente no reflectoras se dispone de una condición de contorno especial: la presión

en el infinito p_∞ es impuesta. Si la presión media p , computada en la sección de salida no es suficientemente próxima a p_∞ , ondas reflejadas entrarán al dominio a través de la salida para modificar la presión y ajustarla a un valor suficientemente cercano a p_∞ (*ver sec. A.6*). ¿Cómo se asegura mediante este proceso tan directo la obtención de una solución estacionaria correcta?

La Fig. 3.3 muestra un esquema del dominio de cálculo y en la Tab. 3.3 se definen las condiciones de borde aplicadas a cada variable en los respectivos contornos.

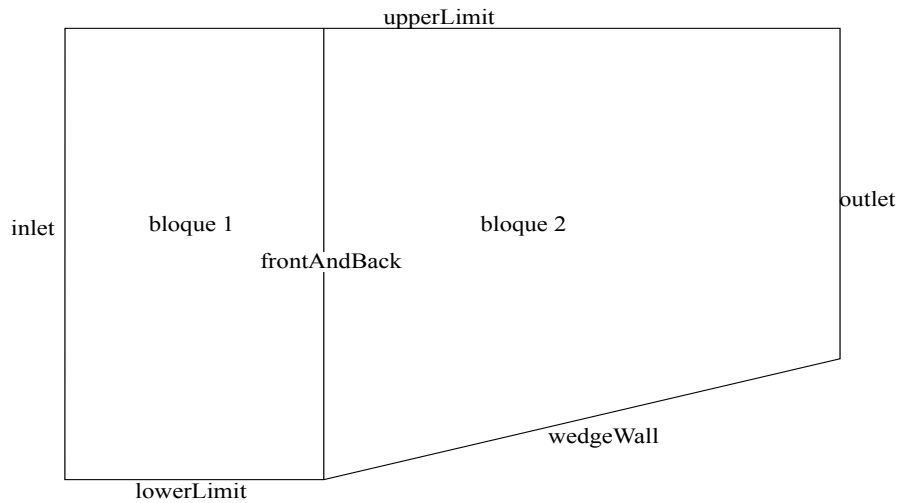


Figura 3.3.: Dominio de cálculo: caso cuña.

Contorno	p [kPa]	T [K]	U [m/s]
inlet	100	270	$(M_i a, 0, 0)$
lowerLimit	symmetryPlane	symmetryPlane	symmetryPlane
wedgeWall	zG	zG	slip
outlet	zG	zG	zG
upperLimit	zG	zG	zG
frontAndBack	empty	empty	empty

Tabla 3.3.: Condiciones de borde: caso cuña

En la Tab. 3.3 zG hace referencia a la condición gradiente nulo, la cual se aplica al borde de salida en vista de que se espera flujo completamente supersónico en dicho contorno, con lo que interpolar el campo desde el interior del dominio resulta ser suficiente. En lo que respecta al *inlet*, en éste se imponen la velocidad, presión y temperatura, la velocidad se define en función del Mach y la velocidad del sonido⁵⁶.

En la Fig. 3.4 se presentan resultados de las simulaciones numéricas con ambos *solvers* (*sonicFoam* y *rhoCentralFoam*) y se comparan con valores analíticos. Las comparaciones se efectúan en términos de presiones, temperaturas, ángulos de las ondas de choque y

⁵La condición *empty* indica que en dicha dirección no se computa la solución.

⁶La descripción de cada una de las condiciones de borde se encuentra en la sec. A.6

números de Mach detrás de la onda, para todo el rango seleccionado de números de Mach de la corriente libre.

De la Fig. 3.4 se observa que a medida que el número de Mach de la corriente libre aumenta las predicciones realizadas con *rhoCentralFoam* para las diferentes variables consideradas ofrecen una mayor precisión que sus equivalentes obtenidas con *sonicFoam*. Es interesante notar que de todos los resultados presentados en la Fig. 3.4 la predicción de la temperatura por *sonicFoam* resulta ser la más pobre. Estos resultados proveen un primer indicio de que *rhoCentralFoam* ofrece mayor precisión que *sonicFoam*.

En la Fig. 3.5 se muestra la comparación con su contraparte analítica de los resultados obtenidos relativos a la posición de la onda, la relación de presiones y de temperaturas para $M_1 = \{2, 3\}$. De esta figura se observa que ambos *solvers* proporcionan un buen cómputo en lo que respecta a la posición de la onda, sin embargo, *rhoCentralFoam* revela superior definición de las variables presión y temperatura a través del choque. En particular el resultado obtenido con *sonicFoam*, muestra un comportamiento oscilatorio en las proximidades de la discontinuidad, y en lo que respecta a la temperatura detrás de la onda se observa una tendencia a diverger respecto de la solución analítica. En contraste, los resultados obtenidos con *rhoCentralFoam* prácticamente carecen de oscilaciones, esto conduce a pensar que a medida que el patrón de flujo sea más complejo los resultados obtenidos por medio de *sonicFoam* serán cada vez más deficientes.

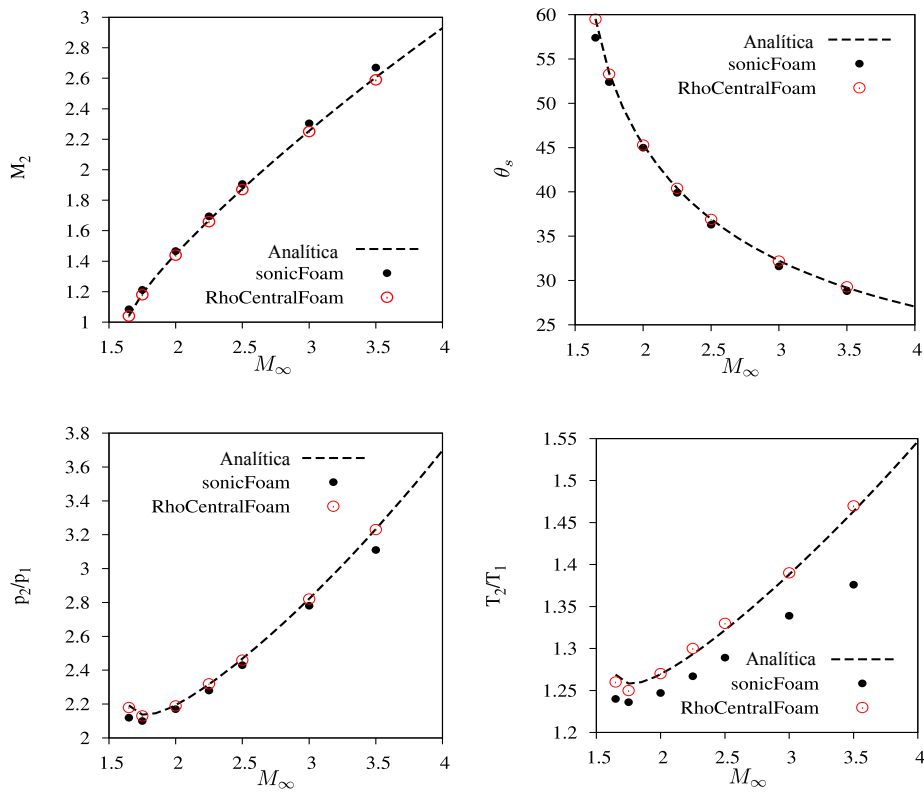


Figura 3.4.: Número de Mach detrás de la onda, ángulo del choque, relación de presiones y temperaturas: caso cuña.

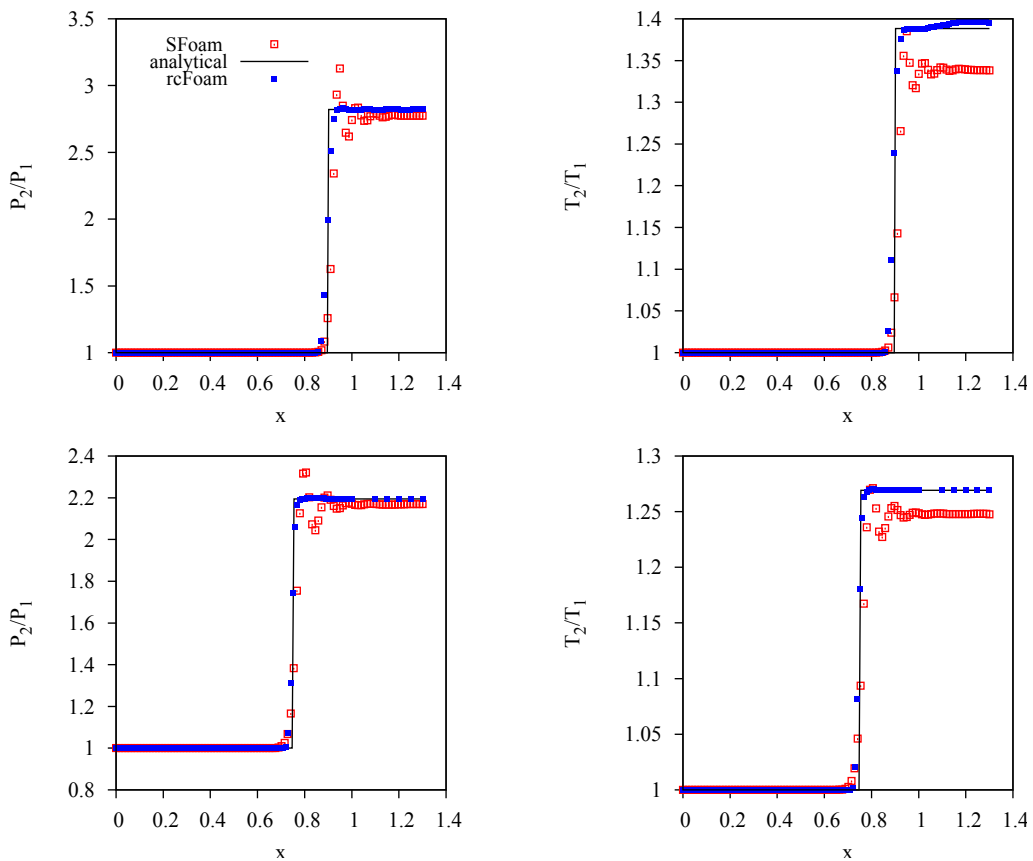


Figura 3.5.: Posición de la onda, relaciones de presión y temperatura sobre la cuña (superior $M_1 = 3$, inferior $M_1 = 2$)

La Fig. 3.6 muestra las distribuciones de Mach, presión, temperatura y entropía sobre la cuña. Se verifica el cambio de entropía a través del choque.

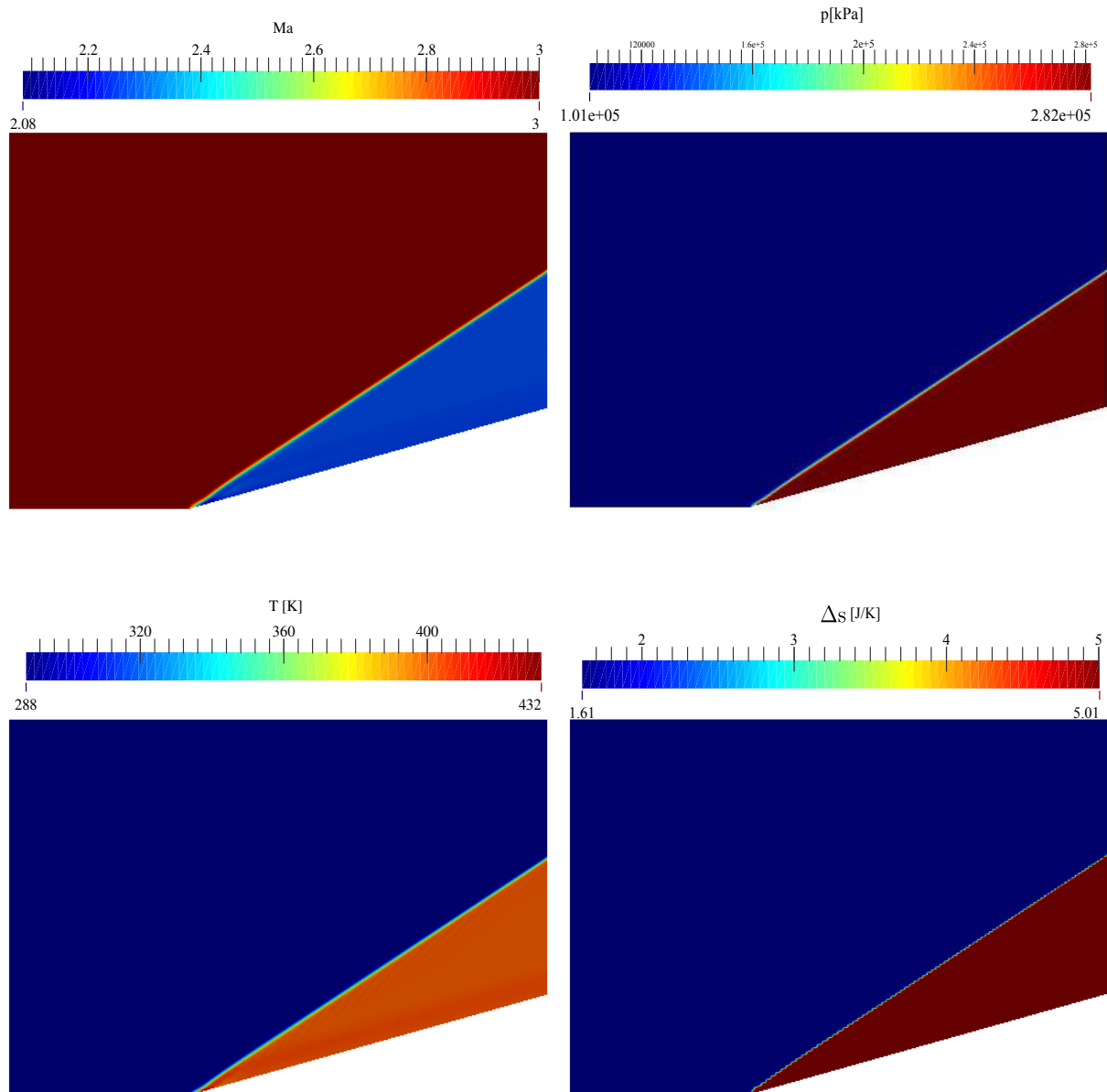


Figura 3.6.: Campos de velocidad, presión, temperatura y cambio entropía (*rhoCentralFoam*): caso cuña.

3.4.4. Flujo supersónico sobre un perfil tipo doble cuña

El segundo caso de prueba corresponde al flujo a $M_\infty = 3$ sobre un perfil tipo doble cuña. La configuración del modelo de prueba se observa en la Fig. 3.7.

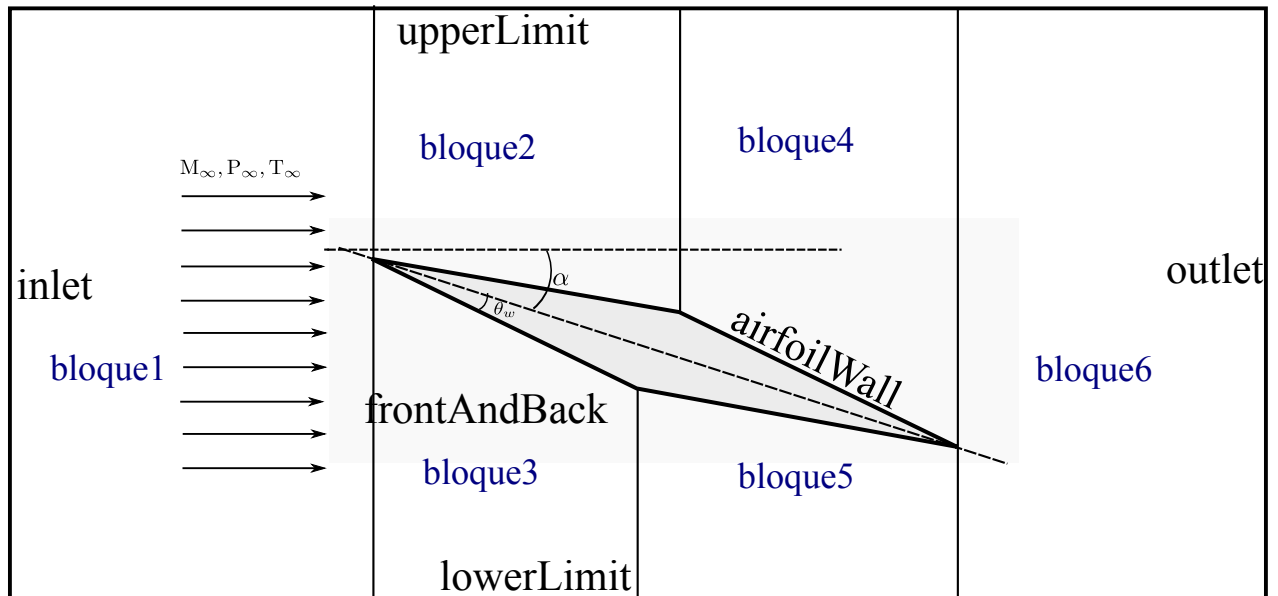


Figura 3.7.: Dominio de cálculo: perfil doble cuña.

Aquí, θ_w es el ángulo del perfil, α el ángulo de ataque y las condiciones de la corriente libre se identifican por medio del subíndice ∞ . Las condiciones de borde empleadas en este caso se detallan en la Tab. 3.4. Cabe notar, que en vista que a la salida se espera flujo supersónico se utiliza de nuevo la condición de gradiente nulo en dicho contorno.

Contorno	p [kPa]	T [K]	U [m/s]
inlet	101325	288.15	(1020.89, 0, 0)
lowerLimit	zG	zG	zG
airfoilWall	zG	zG	slip
outlet	zG	zG	zG
upperLimit	zG	zG	zG
frontAndBack	empty	empty	empty

Tabla 3.4.: Condiciones de borde: perfil doble cuña

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. 3.8 para $\alpha > 0$ se identifican las siguientes ondas en el campo de flujo:

- Entre las regiones I y II se presenta un abanico de expansión.
- 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 una abanico de expansión.
- Entre las regiones III y VI se presenta una onda de choque

La onda presente entre la región V y VI no puede ser definida ni siquiera de manera cualitativa y únicamente se puede 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 choque oblicuo.

Si se observa la evolución del flujo a través del extradós del perfil, el flujo se acelera por medio de los dos abanicos de expansión y luego cambia su dirección y disminuye su velocidad como consecuencia de la presencia de la onda de choque en el borde de salida, por otro lado, 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 la presencia de 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.

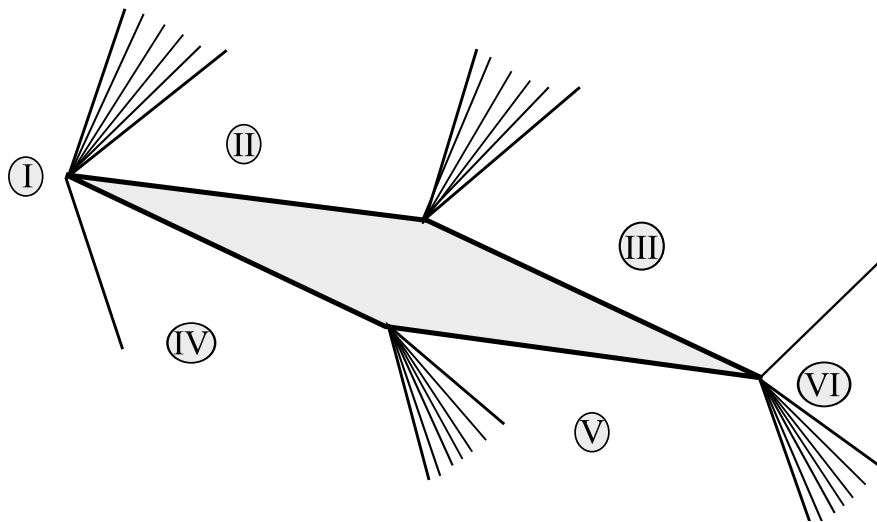


Figura 3.8.: Regiones de flujo: perfil doble cuña.

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. 3.7), una con 285300 celdas hexaédricas para ser utilizada con *sonicFoam* y otra con 86300 celdas para *rhoCentralFoam*. En la Tab. 3.5 se pueden observar las relaciones de presión y número de Mach obtenidos con los dos solvers para las diferentes regiones definidas en la Fig. 3.8.

La Tab. 3.5 muestra que si bien los resultados obtenidos con ambos *solvers* son de buena calidad, desde el punto de vista del costo computacional con *sonicFoam* se necesitó una

⁷El subíndice r hace referencia a las regiones I,II,...V

Región	Solución analítica		<i>sonicFoam</i>		<i>rhoCentral</i>	
	M	P_r/P_1^{γ}	M	P_r/P_1	M	P_r/P_1
I	3	1	3	1	3	1
II	3.27	0.67	3.28	0.65	3.27	0.66
III	4.78	0.09	4.78	0.086	4.8	0.087
IV	1.73	4.88	1.88	4.85	1.71	4.86
V	2.48	1.51	2.47	1.33	2.46	1.56

Tabla 3.5.: Relaciones de presión y Número de Mach: perfil doble cuña

mallas con alrededor de 3.3 veces más celdas para obtener resultados comparables a los obtenidos con *rhoCentralFoam*. Además se puede observar que la predicción de la presión en la región V por *sonicFoam* muestra un error que ronda el 12%.

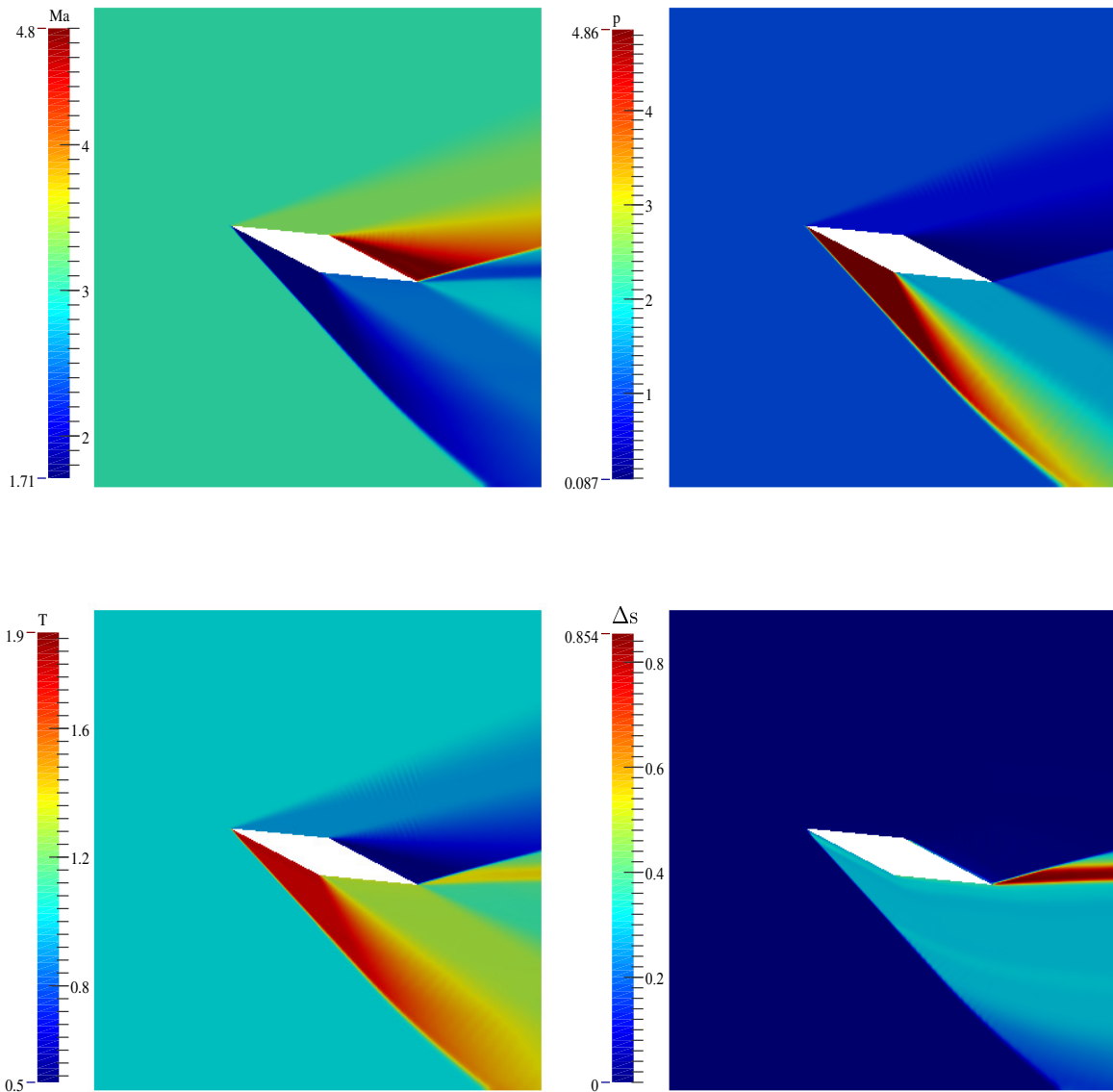


Figura 3.9.: Campos de velocidad, presión, temperatura y cambio entropía (*rhoCentralFoam*): perfil doble cuña.

En la Fig. 3.9 se pueden ver los campos de velocidad, presión, temperatura y cambio de entropía obtenidos a partir de la simulación realizada con *rhoCentralFoam*. De dicha figura queda explícito que el patrón de flujo obtenido corresponde al descrito con anterioridad (ver Fig. 3.8). De la solución para el número de Mach mostrada en Fig. 3.9, se pueden observar claramente las ondas de choque y abanicos de expansión presentes tanto en el intradós como en el extradós del perfil. De forma similar se confirma a partir de dicha figura que entre las regiones V y VI existe un abanico de expansión. Finalmente a partir de la visualización del campo de cambio de entropía se puede concluir que los cálculos efectuados respetan la condición de entropía a través de las diferentes ondas presentes, y por lo tanto los campos solución son físicamente posibles. También es interesante ver que el campo de entropía detecta de manera muy clara la presencia de 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.

La Fig. 3.10 muestra la convergencia expresada en la norma L_2 de los residuos de cada uno de los campos solución para la malla con el menor número de celdas. De dicha figura se puede observar que *sonicFoam* presenta una velocidad de convergencia mayor que *rhoCentralFoam*. Se puede afirmar que se alcanza una solución estacionaria en ambos casos, no obstante, la solución obtenida con el esquema PISO de dos etapas (*sonicFoam*) no garantiza igual calidad en los resultados cuando se comparan con los de *rhoCentralFoam*. Como se mencionara antes, se necesitaron 285300 celdas para obtener resultados similares a los calculados con 86300 celdas por *rhoCentralFoam*. Esto se refleja en un incremento del orden del 70% en el tiempo de cómputo para *sonicFoam*, el cual totaliza aproximadamente 3.5 horas.

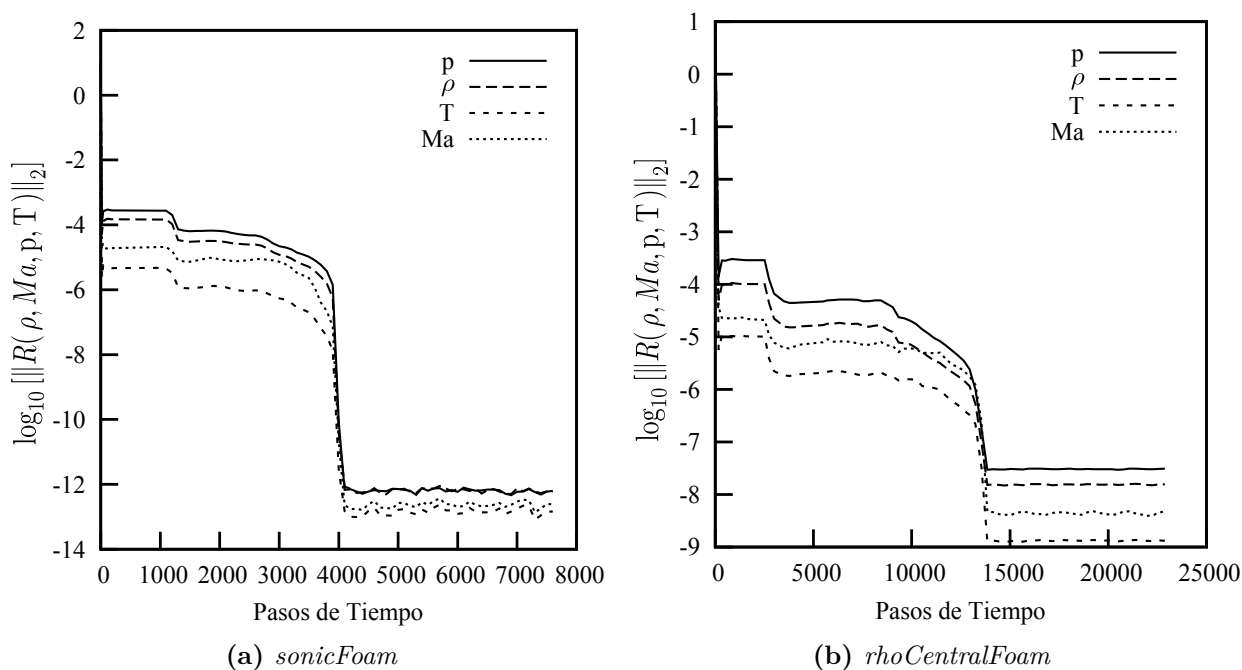


Figura 3.10.: Residuos en la norma L_2 de ρ , Ma , T y p : perfil doble cuña.

3.4.5. Flujo bidimensional y axisimétrico alrededor de un cuerpo romo

Se considera un cuerpo romo cuyo contorno en un plano xy se define por la función:

$$f(x) = x^{0.5} \quad \text{for } 0 \leq x \leq 1 \quad (3.41)$$

Este problema se resuelve considerando una configuración bidimensional y otra axisimétrica. La generatriz de la configuración axisimétrica es el contorno descrito por la Eq. 3.41. Dados los mejores resultados obtenidos previamente con *rhoCentralFoam*, las simulaciones correspondientes a este caso se llevarán a cabo únicamente con *rhoCentralFoam*.

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 $M = U$ por lo que $T = 1$, $a = 1$ m/s, $\gamma = 7/5$ y $W = 11640.3$ kg/kMol) [16].

3.4.5.1. 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. 3.11. Las condiciones de borde aplicadas en este caso corresponden a las descritas en la Tab. 3.6.

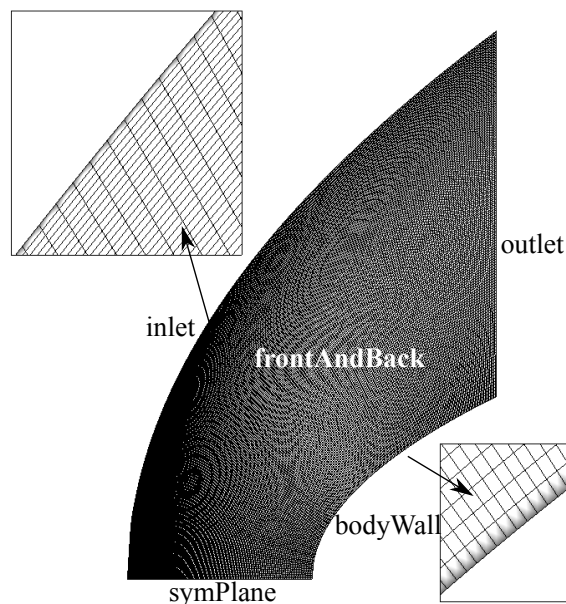


Figura 3.11.: Configuración de la malla: cuerpo romo configuración 2D.

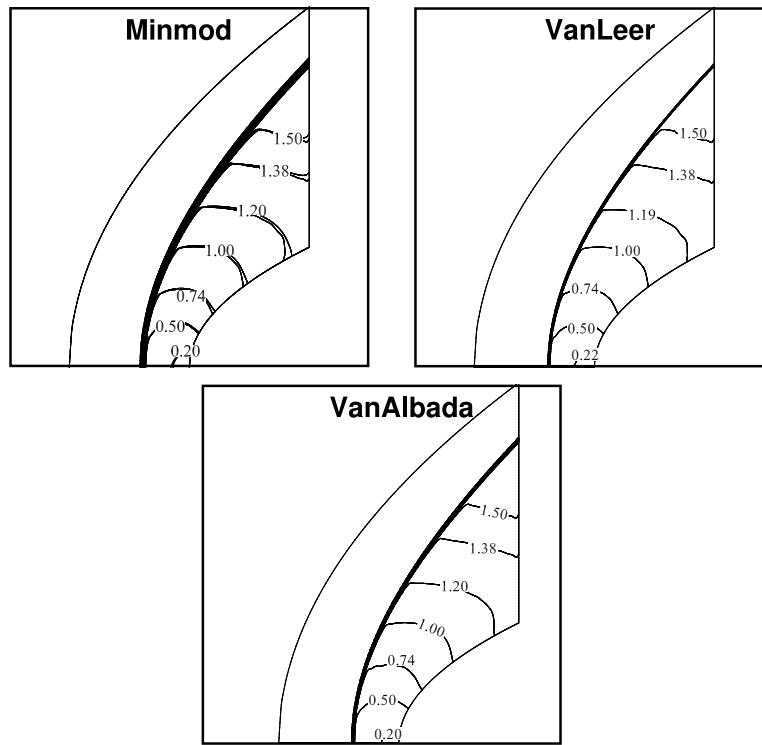
El problema se resuelve utilizando las funciones limitadoras de van Leer, van Albada y MinMod de Roe (ver Tab. 3.2). En las Fig. 3.12a y Fig. 3.12b se pueden ver las curvas de nivel de los campos de número de Mach y presión obtenidas para cada una de las

Contorno	p [kPa]	T [K]	U [m/s]
inlet	1	1	(3, 0, 0)
symPlane	symmetryPlane	symmetryPlane	symmetryPlane
bodyWall	zeroGradient	zeroGradient	slip
outlet	zG	zG	zG
frontAndBack	empty	empty	empty

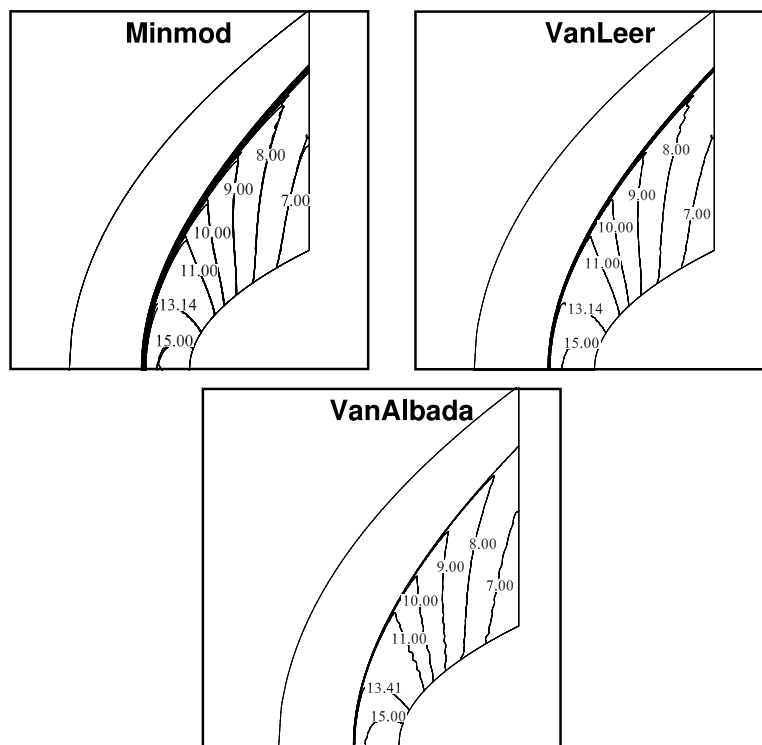
Tabla 3.6.: Condiciones de borde: cuerpo romo configuración 2D

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

Figura 3.12.: Distribuciones de número de Mach y presiones: cuerpo romo configuración 2D (Malla-1).

La Fig. 3.13 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.

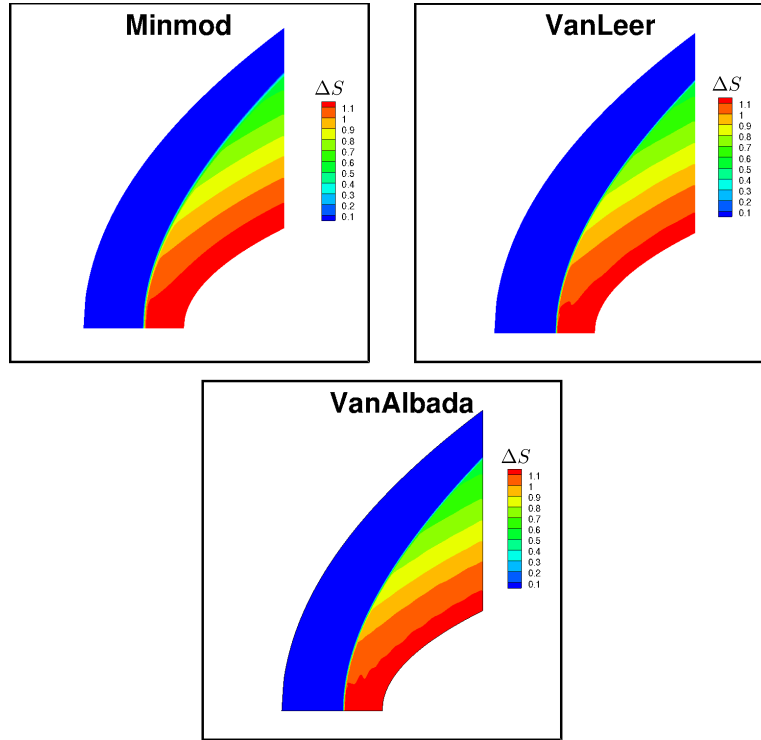


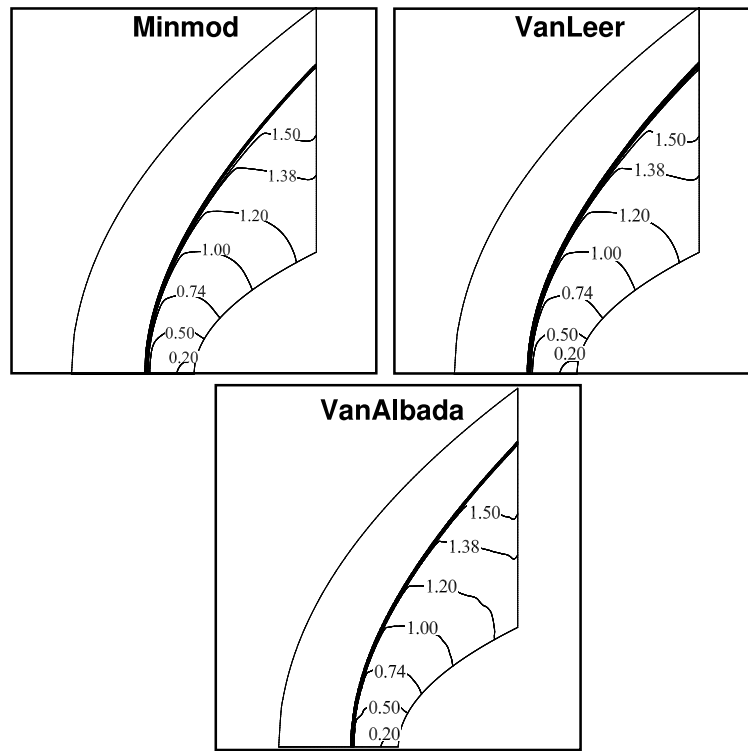
Figura 3.13.: Distribuciones de entropía: cuerpo romo configuración 2D (Malla-1).

La presión de impacto calculada por medio de la teoría de onda de choque normal para este problema resulta $P_0/P_\infty = 16.24$ [13]. En la Tab. 3.7 se pueden observar los valores obtenidos para presión y el error asociado con cada una de las funciones limitadoras.

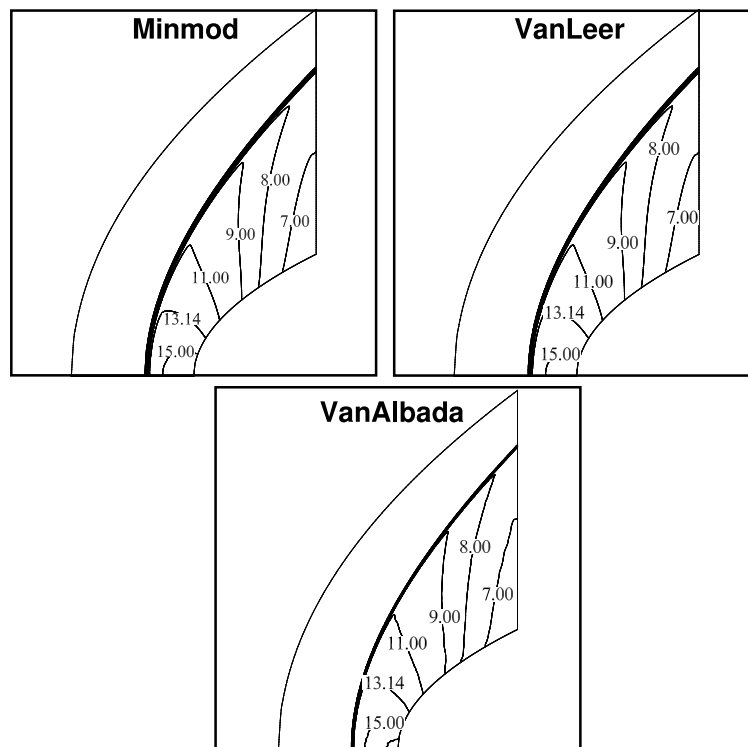
$\beta(r)$	Impact Pressure	%Error
VanLeer	16.21	0.18
Minmod	16.34	0.6
VanAlbada	16.22	0.12

Tabla 3.7.: 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. 3.14a y Fig. 3.14b . 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.



(a) Distribución número de Mach

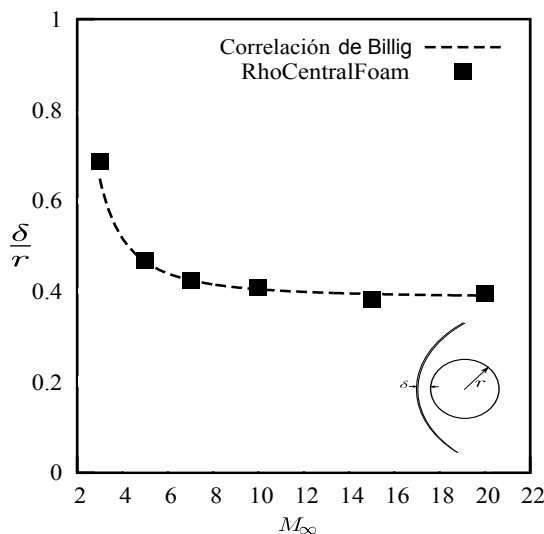


(b) Distribución de presiones

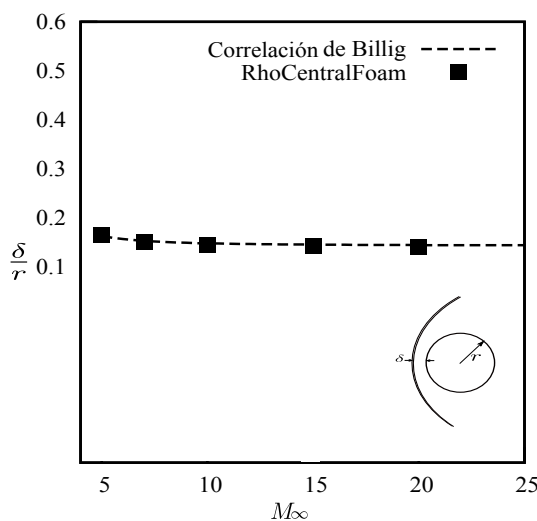
Figura 3.14.: Distribuciones de número de Mach y presiones: cuerpo romo configuración 2D (Malla-2)

La distancia desde el cuerpo hasta el choque normal se estima en 0.38 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 (ver Fig. 3.15) [17]. Por lo tanto se estima que el valor determinado para el cuerpo en estudio es confiable.



(a) Cilindro 2D



(b) Esfera: Configuración axisimétrica

Figura 3.15.: 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. 3.16 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 para 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.

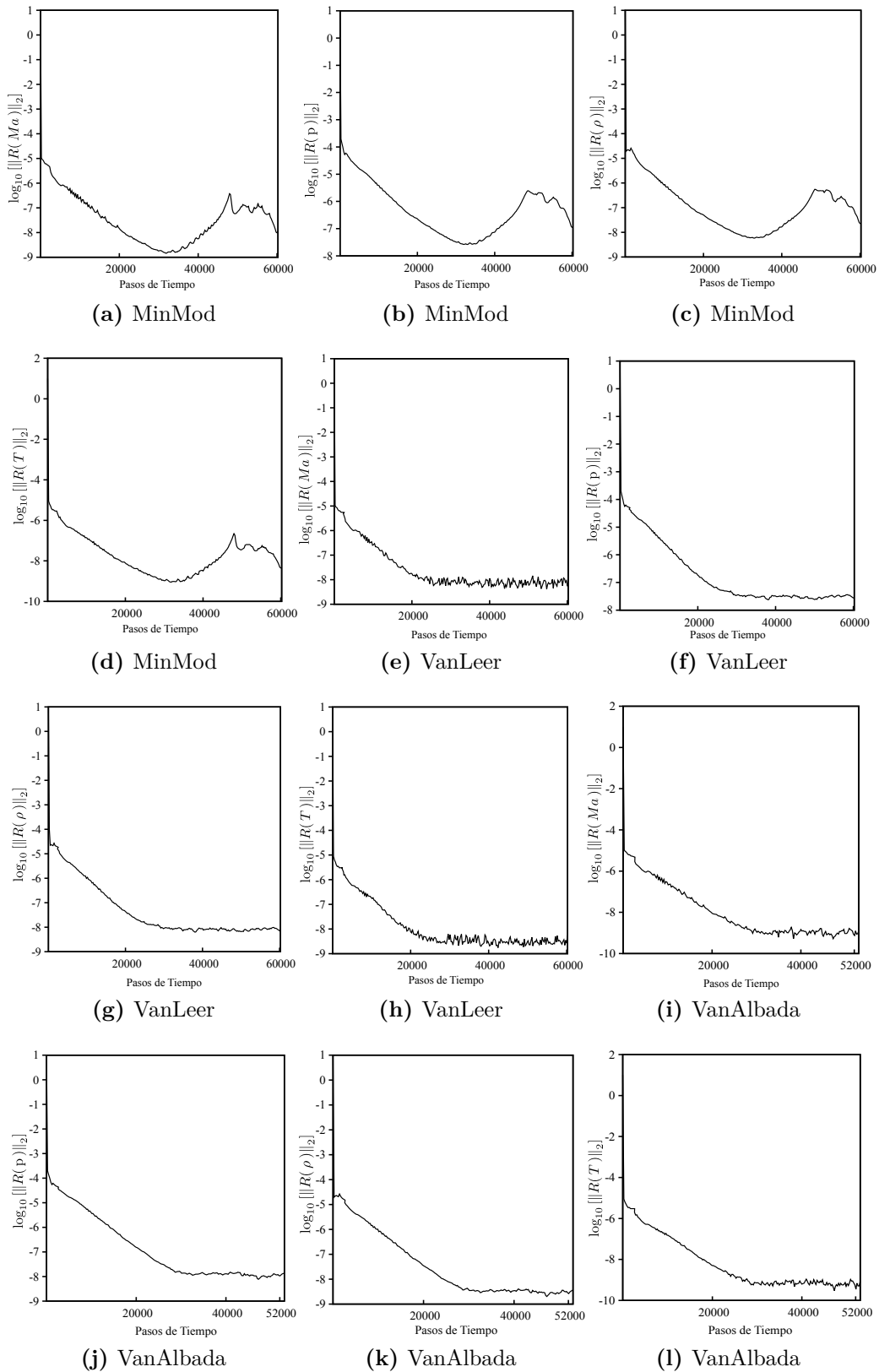


Figura 3.16.: Residuos en la norma L_2 de Ma, p, ρ y T para las diferentes funciones limitadoras: cuerpo romo configuración 2D.

3.4.5.2. 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 [6]. 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 (ver Fig. 3.17). 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 sec. A.6).

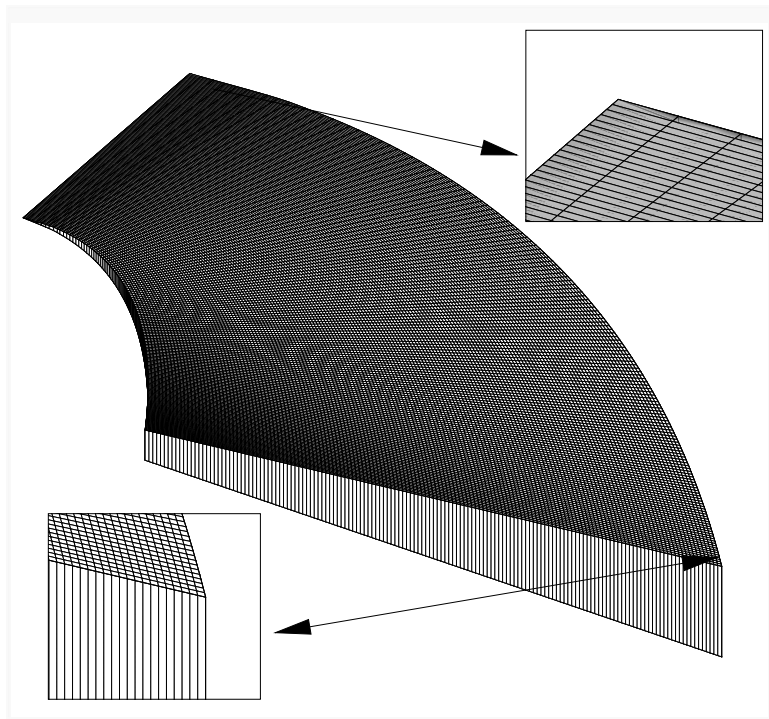


Figura 3.17.: Malla cuerpo romo: configuración axisimétrica.

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. 3.18 se presenta la distribución de presiones y número de Mach sobre el dominio. Se observa que la resolución de la onda de choque presentada es aceptable a pesar de la relativa poca cantidad de celdas utilizadas.

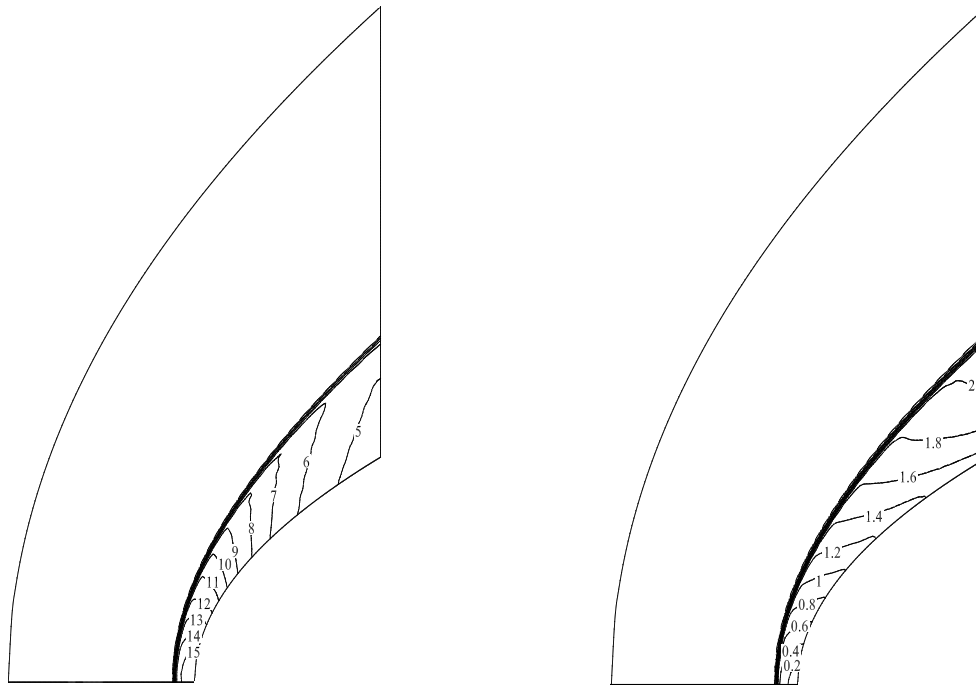


Figura 3.18.: Distribución de presiones (izq) y Mach (der): cuerpo romo (configuración axisimétrica).

En la Fig. 3.19 se muestra la comparación para el campo de Mach obtenido en esta simulación con el reportado por Brooks [16]. De dicha figura se observa una buena correspondencia entre los resultados obtenidos con *rhoCentralFoam* y los considerados como datos de verificación. De acuerdo a la simulación realizada, la distancia de la onda se estima en 0.10048 m lo cual resulta en una diferencia de 4.47 % con respecto a la reportada por Brooks. De igual forma 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 m, 0.5078 m) con respecto a un sistema de coordenadas (x, y) con origen en el punto de impacto, en este caso la diferencia resulta del 3.11 % y 1.57 % para las coordenadas x e y respectivamente.

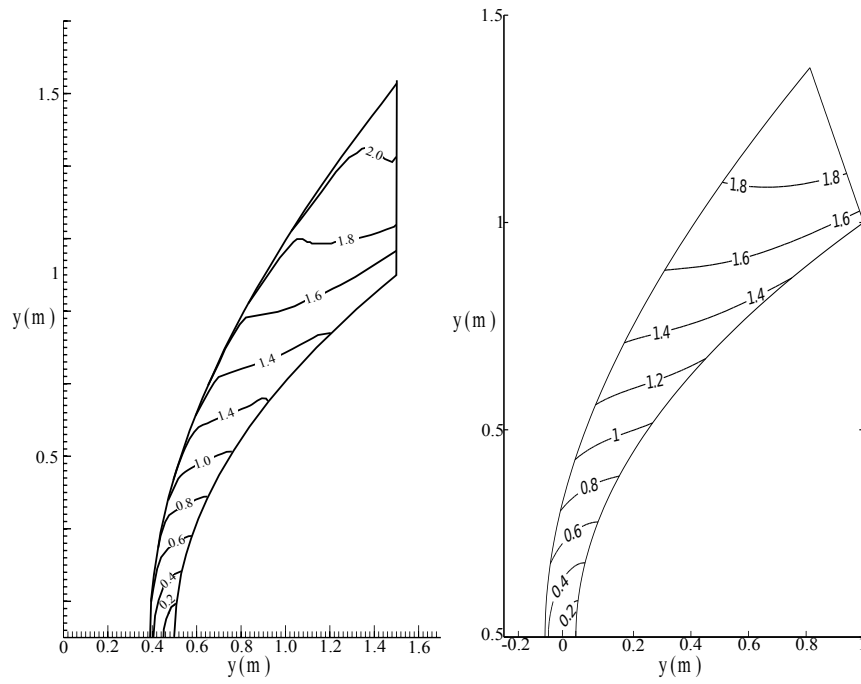


Figura 3.19.: Comparación distribución de Mach: *rhoCentralFoam*(izq) - Brooks [16] (der) : cuerpo romo (configuración axisimétrica).

De forma análoga, en la Fig. 3.20 se observa la comparación de la distribución de presiones sobre el cuerpo calculada con *rhoCentralFoam* con la distribución obtenida por Brooks [16]. De dicha figura se observa una buena correspondencia entre ambos campos.

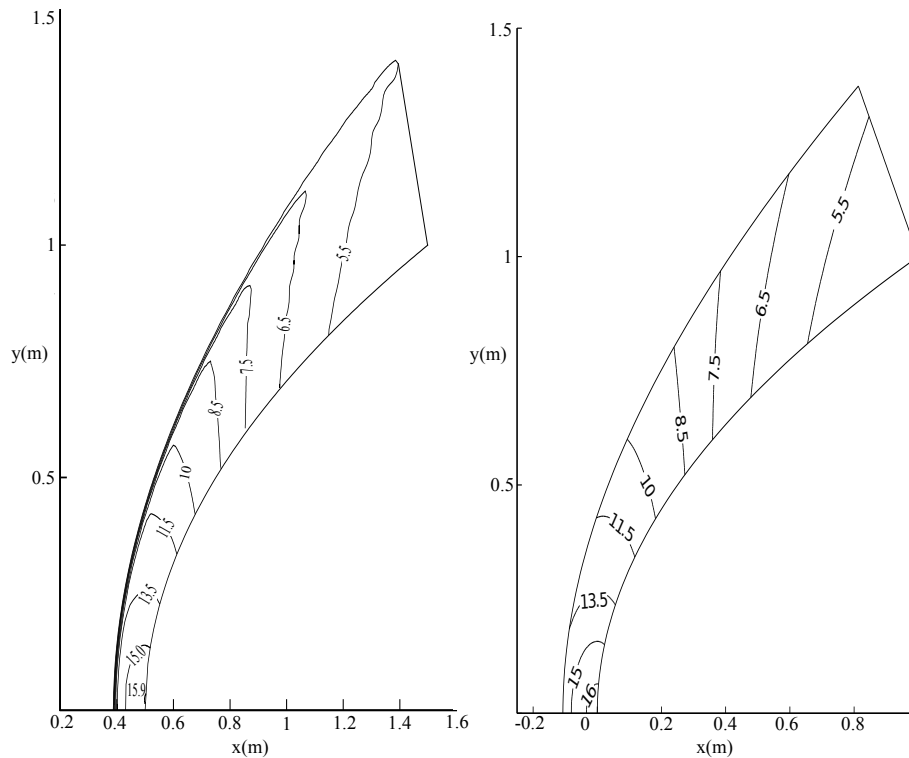


Figura 3.20.: Comparación distribución de presiones : *rhoCentralFoam* (izq) - Brooks [16] (der): cuerpo romo (configuración axisimétrica).

La simetría axial del problema permitiría utilizar la teoría newtoniana⁸ para estimar el coeficiente de presión (c_p) sobre el cuerpo [3]. Por lo tanto resulta útil comparar los resultados de la simulación numérica con los provenientes de dicha teoría. En la Fig. 3.21 se muestra dicha comparación.

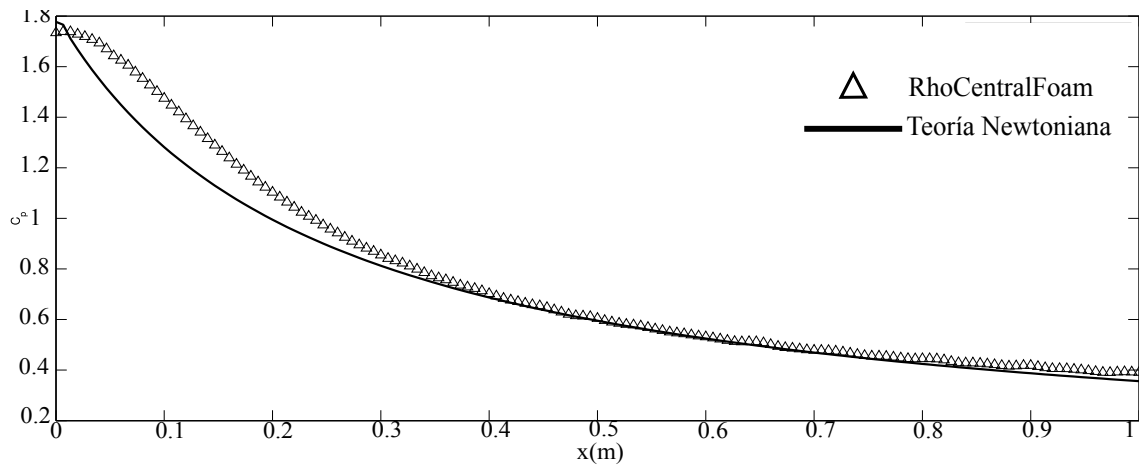


Figura 3.21.: Distribución del coeficiente de presión: cuerpo romo (configuración axisimétrica)

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 la teoría newtoniana para $M_\infty = 3.5$ es inusual. Finalmente en la Fig. 3.22 se puede observar los cambios experimentados por el Mach, presión, temperatura y densidad.

⁸Nótese que con fines de abreviar, al hablar de teoría newtoniana se hace referencia a la teoría newtoniana modificada.

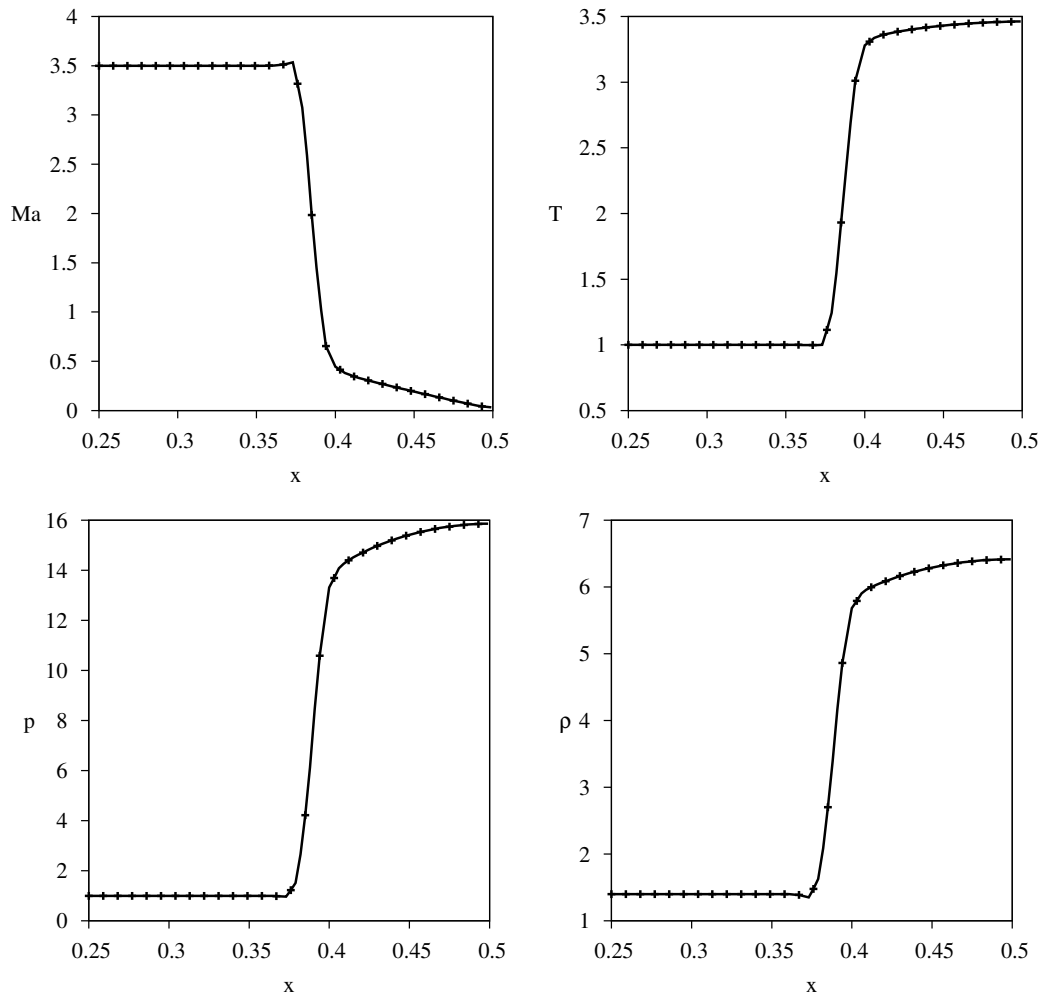


Figura 3.22.: Cambios de Mach, presión, temperatura y densidad a través del choque: cuerpo romo (configuración axisimétrica).

Referencias capítulo 3

- [1] **P. Roe**, *Characteristic-based schemes for the euler equations*, *Annual review of fluid mechanics*, vol. 18(1):pp. 337–365, 1986.
- [2] **G. Van Albada**, **B. Van Leer** and **W. Roberts Jr**, *A comparative study of computational methods in cosmic gas dynamics*, *Astronomy and Astrophysics*, vol. 108:pp. 76–84, 1982.
- [3] **J. Anderson**, *Hypersonic and High-Temperature Gas Dynamics*, AIAA Education Series, American Institute of Aeronautics and Astronautics, 2006.
- [4] **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.
- [5] **K. K. Kuo**, *Principles of combustion*, John Wiley & Sons, Inc., 2nd ed., 2005.
- [6] openFoam UserGuide, OpenCFD Ltd, 2010.
- [7] **A. Kurganov** and **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.
- [8] **A. Kurganov** and **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.
- [9] **A. Kurganov** and **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.
- [10] **A. Kurganov**, **S. Noelle** and **G. Petrova**, *Semidiscrete central-upwind schemes for hyperbolic conservation laws and hamilton – jacobi equations*, *J. Comput. Phys*, vol. 160:pp. 720–742, 2000.
- [11] **H. Nessyahu** and **E. Tadmor**, *Non-oscillatory central differencing for hyperbolic conservation laws*, *Journal of computational physics*, vol. 87(2):pp. 408–463, 1990.
- [12] **C. Greenshields**, **H. Weller**, **L. Gasparini** and **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.
- [13] **J. Anderson**, *Modern compressible flow : with historical perspective*, McGraw-Hill, Boston, Mass, 2003.
- [14] **T. Behrens**, *Openfoam’s basic solvers for linear systems of equations*, Tech. rep., Technical University of Denmark, 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] **G. Brooks** and **J. Powers**, *Standardized pseudospectral formulation of the inviscid supersonic blunt body problem*, *Journal of Computational Physics*, vol. 197(1):pp. 58–85, 2004.
- [17] **F. Billig**, *Shock-wave shapes around spherical-and cylindrical-nosed bodies.*, *Journal of Spacecraft and Rockets*, vol. 4:pp. 822–823, 1967.
- [18] **T. J. Chung**, *Computational fluid dynamics*, Cambridge University Press, 2nd ed., 2010.

4. Conclusiones y trabajo futuro.

4.1. Conclusiones

Con esta tesis se describen simulaciones numéricas de problemas fluidodinámicos en los cuales es esencial considerar la compresibilidad del medio. Las herramientas utilizadas, previamente seleccionadas acorde con su potencial para tratar el sistema de ecuaciones que representan el fenómeno en estudio, forman parte del conjunto que openfoam™ libremente pone a disposición de quienes desarrollan dichas simulaciones numéricas.

4.1.1. Simulación de la combustión difusiva turbulenta

En el Capítulo 2 se trata un problema de combustión difusiva turbulenta que, obviamente, debe incluir la interacción química-turbulencia. La técnica numérica seleccionada usa volúmenes finitos, en los cuales las ecuaciones son discretizadas según el teorema de Gauss y solucionadas mediante la aplicación del procedimiento PISO extendido a fluidos compresibles. PISO se basa en el uso de la presión y la velocidad como variables dependientes y es muy eficiente cuando las velocidades del flujo son bajas ($M < 0,3$). Una dificultad inherente a la aplicación presentada es la simulación de las reacciones químicas, las cuales dan origen a sistemas ODE del tipo *stiffs* que requieren de técnicas resolutivas apropiadas para garantizar la estabilidad en los cálculos y la precisión (por ej. la técnica SIBS que ofrece openfoam™). Con referencias al modelo químico de la combustión, se utiliza una única reacción global entre las especies primordiales (CH_4 , O_2 , H_2O , CO_2), y con los parámetros de Arrhenius determinados empíricamente.

De la comparación entre resultados numéricos y experimentales (llama D), se deduce que las mayores discrepancias ocurren en zonas donde la actividad química es más intensa (p. ej. hasta un 18 % de diferencia entre la temperatura calculada y la medida). En cuanto a las causas específicas de las diferencias entre resultados numéricos y datos experimentales, se estima pueden ser consecuencia de alguno de los factores que se mencionan a continuación o de combinaciones de los mismos.

Modelado de la turbulencia

Las tensiones de Reynolds, resultantes de promediar según Favre las ecuaciones de cantidad de movimiento, se determinan utilizando la hipótesis de Boussinesq la cual requiere

la evaluación previa de la viscosidad dinámica turbulenta. Esta viscosidad surge de relacionar la energía cinética turbulenta con su rapidez de disipación (modelo $\kappa - \varepsilon$). No obstante, esta relación exige añadir dos ecuaciones a las de conservación ya existentes y cuya solución demanda la determinación de seis constantes (*closure coefficients*). Sus valores de uso corriente, son determinados en base a procesos fluidodinámicos que no son químicamente activos. Además, en las ecuaciones de conservación de las especies y de la energía, es práctica común modelar los términos de transporte difusivo y térmico turbulentos mediante la hipótesis del gradiente, justificada sólo por analogía con los casos laminares.

Modelado de la cinética química

La cinética química de la combustión CH_4/Aire necesita de 53 especies y 800 reacciones elementales para ser descrita adecuadamente. No obstante, considerando el costo computacional y los objetivos de este trabajo, se optó por una única reacción global y cuatro especies reactivas (N_2 fue considerado una especie químicamente inerte). Debido a que las disociaciones que se producen a altas temperaturas no pueden ser capturadas utilizando una simple reacción y por ende, tampoco ser evaluados sus respectivos calores de formación, es de esperar que los niveles de temperatura computados excedan por un margen apreciable a los determinados experimentalmente.

Modelado de la interacción química-turbulencia

El modelado de la interacción química-turbulencia, debe ser válido para procesos en los cuales las reacciones químicas son lentas (la química es determinante del proceso), y también cuando las reacciones son rápidas (la mezcla de los reactantes controla a la actividad química). En muchos casos prácticos, esta escala de requerimientos puede ser satisfactoriamente aproximada utilizando el concepto PaSR (*partially stirred reactor*), es decir se asume que la reacción puede suceder solamente en una fracción del volumen de la celda computacional. La determinación de esta fracción reactiva requiere la definición y el cálculo de escalas temporales características (por ej., asociadas con la conversión local del combustible o del oxidante) las cuales, por su dependencia de una cinética que es aproximada, bien pueden no ser satisfactorias.

Ausencia de un modelo de radiación

Para cuantificar la influencia de la radiación en la combustión de hidrocarburos, hay que tener en cuenta la formación de emisores gaseosos como CO , NO_x y de partículas de carbón generadas por la pirólisis del combustible. La cinética química aquí empleada no contempla la generación de los mencionados emisores, por lo tanto es de esperar que la emisividad desde la zona reactiva sea de bajo impacto en los resultados obtenidos (aun con la hipótesis de que el medio es totalmente transmisor). Se estima un error inducido de no más del 4% sobre la temperatura máxima calculada por la simulación numérica [1].

Considerando la complejidad del problema, es problemático establecer a priori cual de los factores citados tiene la mayor incidencia en las discrepancias entre resultados de la simu-

lación numérica y los experimentales relativos a la llama D. La introducción de mejoras en los modelos de la turbulencia, de la cinética química, de la interacción química-turbulencia y la formulación e incorporación de un modelo para evaluar las pérdidas por radiación, son objetivos de trabajos futuros. No obstante, a los resultados obtenidos con la simulación de la combustión difusiva turbulenta y presentados, se los puede considerar como una buena aproximación considerando la gran cantidad de hipótesis que son necesarias efectuar para el cierre de la ecuaciones de conservación. De manera general, se puede concluir que *openfoam*TM es un proveedor interesante de herramientas para desarrollar simulaciones numéricas y tareas de investigación en diversas áreas de la dinámica de los fluidos, incluyendo flujos químicamente activos. Finalmente, es de hacer notar el comportamiento de los esquemas de discretización y resolutivos utilizados, ya que brindan al usuario estabilidad en los cálculos y la posibilidad de obtener resultados con un grado aceptable de difusión numérica (uso de un esquema limitador para los gradientes - sec. A.3.7.4).

4.1.2. Simulaciones numéricas de flujos supersónicos

Las simulaciones numéricas de flujos supersónicos (Capítulo 3) son desarrolladas empleando los ejecutables *sonicFoam* y *rhoCentralFoam*. Estos dos ejecutables difieren en que *sonicFoam* utiliza el método PISO para flujo compresible como técnica resolutiva, mientras que *rhoCentralFoam* mantiene la densidad como variable dependiente y emplea los esquemas centrados de Kurganov et al. El primer problema destinado a evaluar las ventajas y desventajas derivadas de la aplicación de ambos ejecutables, trata la simulación numérica del flujo sobre una cuña (o rampa) supersónica. Del análisis de los resultados de esta simulación surgen las siguientes observaciones:

- *sonicFoam* muestra una fuerte tendencia a incrementar errores de cálculo a medida que la velocidad del flujo excede $M = 2$. Dichos errores son más evidentes con la temperatura.
- Ambos *solvers* localizan bien la posición de la onda de choque, no obstante *sonicFoam* induce oscilaciones espurias detrás de la onda.

Con el fin de evaluar y comparar las *performances* de *sonicFoam* y *rhoCentralFoam* en la simulación de flujos supersónicos que simultáneamente contienen discontinuidades de choque, abanicos de expansión y superficies de deslizamiento, se estudia el perfil de doble cuña (o tipo diamante). No obstante que ambos ejecutables predicen de manera apropiada el fenómeno físico, el desempeño de *rhoCentralFoam* es superior desde el punto de vista de calidad de resultados y costo computacional. De los resultados presentados en el Capítulo 3, cabe enfatizar lo siguiente:

- Para conseguir resultados de calidad similar, *sonicFoam* necesita un mallado con 3.3 veces más celdas. Este incremento del número de celdas se traduce en mayor tiempo de cómputo.

- De la comparación entre resultados de las simulaciones numéricas y estimaciones teóricas (soluciones de Prandtl-Meyer y ecuaciones del choque oblicuo) en el campo de las presiones, se han detectado diferencias de hasta 12 % con los valores proporcionados por *sonicFoam*, mientras que con *rhoCentralFoam* las diferencias no exceden 3.3 %.
- Las variaciones de entropía determinadas numéricamente tanto por *sonicFoam* y como por *rhoCentralFoam*, son consistentes con las exigencias de la segunda ley de la termodinámica. En particular, se visualizan fuertes variaciones a través de los choques y de la superficie de deslizamiento que se generan desde el borde de fuga del perfil, mientras que permanece constante a través de las expansiones.
- De la convergencia de los campos solución obtenidos, se puede afirmar que *sonicFoam* describe una velocidad de convergencia superior que *rhoCentralFoam*. No obstante, dados los resultados obtenidos con *rhoCentralFoam*, el enfoque utilizado en dicho *solver* resulta ser más apropiado que el algoritmo PISO para tratar flujos supersónicos.

Lo expuesto contribuye a confirmar que la utilización de *rhoCentralFoam* presenta ventajas respecto de *sonicFoam*, cuando se pretende simular flujos no reactivos, pero con velocidades que no permiten prescindir de la compresibilidad del fluido (por ej. flujos supersónicos). Por lo tanto, se descarta el uso de *sonicFoam* en las simulaciones del Capítulo 3 que describen la interacción de la corriente libre supersónica, con un cuerpo como bidimensional o axisimétrico. El problema axisimétrico se simula sobre una malla originalmente tridimensional y aplicando después condiciones de contorno especiales mediante el uso de *wedge patches* [3]. El propósito fundamental de estas simulaciones es ahora, evaluar la influencia sobre los resultados de las funciones limitadoras identificadas como MinMod, van Leer y van Albada. Del análisis de los resultados cabe efectuar las siguientes observaciones:

- En el caso bidimensional, se observa que con MinMod la captura del choque frontal muestra un alto nivel de difusión, si se compara con resultados obtenidos con las otras dos funciones. La captura de van Albada es la de mejor calidad, sin embargo tiende a inducir oscilaciones en el campo de las presiones.
- En la determinación de la presión de impacto, las funciones de van Albada y van Leer muestran errores del mismo orden (0.1 %). MinMod proporciona el valor más alto (0.6 %).
- Tanto con la función van Albada como la de van Leer se alcanzan soluciones estacionarias en aproximadamente 35000 pasos de tiempo. Por el contrario la función MinMod para la misma cantidad de pasos de tiempo aún no alcanza la solución estacionaria.
- Como es de esperar, el refinamiento de la malla mejora la calidad de los resultados numéricos. No obstante, el mejor compromiso entre un campo de presiones libre de oscilaciones y una buena captura del choque, se consigue con la función de van Leer.

- El comportamiento de la entropía, cualquiera sea la función limitadora empleada, es consistente con los cambios en la curvatura del choque frontal, es decir, máximo ΔS cuando el choque es normal y disminución continua de ΔS a medida que el choque se va debilitando hasta convertirse, eventualmente, en una onda de Mach. El andar de la entropía corrobora la factibilidad física de la solución.
- La simulación del cuerpo romo con simetría axial, es desarrollada utilizando la función limitadora de van Leer y una malla cuya cantidad de celdas es aproximadamente 66 % menor que la cantidad usada con la malla menos densa del caso bidimensional. No obstante, se lograron resultados numéricos de buena calidad (p. ej., el error incurrido en la determinación del coeficiente de presión en el punto de impacto es 1.6 %).
- Si se determinan los coeficientes de presión sobre el cuerpo romo axisimétrico utilizando la teoría newtoniana y se comparan sus resultados con la simulación numérica de *rhoCentralFoam*, es dable observar una aceptable concordancia (máxima diferencia 15 %). Nótese que $M_\infty = 3, 5$, por lo tanto se fuerza la aplicación de la teoría newtoniana a valores de M_∞ no usuales.
- Aunque en el cuerpo en estudio es susceptible utilizar mallas de tipo elíptico (la curva generatriz del contorno es una curva analítica suave), no obstante se optó por una malla compuesta por bloques de celdas hexaédricas (propuesta por defecto en *openfoam*TM). La malla así construida, no garantiza calidad en términos de ortogonalidad u oblicuidad de las celdas, y del número de determinantes no deseables. Si no se actúa sobre la malla para eliminar en su totalidad o al menos minimizar estas anomalías, los resultados que se obtienen con la simulación pueden no ser confiables, incluso, inducir divergencias numéricas. En ciertas ocasiones, la alternativa válida es rediseñar la malla.

De lo expuesto se concluye que la técnica de esquemas centrados propuesta por Kurganov et al. aplicada a la simulación de flujos supersónicos, produce resultados de buena calidad, incluso puede competir con métodos basados en *solvers* de Riemann. Cabe hacer notar que el cambio de entropía a través de las diferentes discontinuidades presentes en el flujo siempre es evaluado como corresponde sin necesidad de recurrir a correctores. El algoritmo PISO, al menos en la forma que se encuentra implementado en *sonicFoam* (esquema de dos etapas), ha mostrado una clara tendencia a producir resultados incorrectos a medida que el Mach del flujo se incrementa.

Con referencia a *openfoam*TM, se puede afirmar que el paquete de herramientas que ofrece es confiable y posee características muy interesantes para su utilización en la simulación numérica de muchos problemas de la mecánica de los fluidos. Por ser un código abierto, permite la implementación de nuevas técnicas aplicables a la simulación de nuevos problemas. Combinando estas técnicas con la amplia gama de procedimientos numéricos con que cuenta actualmente, pueden construirse los correspondientes nuevos ejecutables.

Puede afirmarse que el paquete de *solvers* y utilidades de *openfoam*TM están en constante evolución y desarrollo por comunidades de usuarios (científicos, informáticos, etc.), distribuidas por todos los países.

4.2. Trabajo futuro

Como posibles causas de discrepancias entre las simulaciones numéricas y los datos experimentales, ha sido mencionada la utilización de una cinética química excesivamente simple basada en una única reacción global. Esta simplificación del proceso químico podría ser un causante de las diferencia observada entre la máxima temperatura calculada y la experimental [2], recomendándose la utilización de cinéticas químicas más complejas. El modelo cinético de Westbrook y Dryer (1981) para la combustión de hidrocarburos, ha dado en varias aplicaciones la mejor concordancia con las mediciones y además la demanda computacional no es excesiva, en consecuencia es el primer modelo a tener en cuenta para reemplazar al utilizado hasta ahora. Este modelo cinético consiste de 21 reacciones elementales reversibles con 10 especies y una reacción global. Esta reacción global aplicable a combustibles n-parafínicos es similar a la propuesta por Edelman y Fortune (1969).

La utilización de métodos RANS para las simulaciones de flujos turbulentos químicamente activos es cuestionada porque no describirían de manera apropiada, la interacción entre los cambios de la composición química de la mezcla reactiva y las propiedades del flujo turbulento. Con la intención de acceder a métodos estocásticos considerados más apropiados para la simulación de flujos turbulentos reactivos, se introduce el concepto de la función denominada fracción de mezcla. Esto implica derivar una ecuación de conservación promediada según Favre para la fracción de mezcla que reemplaza a la ecuación de la energía, pero se retienen las de conservación de cantidad de movimiento, de la masa y de las especies, también promediadas según Favre. Al considerar en la simulación de las llamas difusivas la fracción de mezcla como variable dependiente, es posible distinguir dos problemas: el de mezclado no reactivo y el de la estructura de la llama. Estos dos problemas pueden tratarse de manera desacoplada. Así, el problema de mezclado resuelto con métodos de la clase RANS, provee valores para construir el campo de la función fracción de mezcla (promediada según Favre), mientras que con el problema de la estructura de la llama donde las fracciones de masa de las especies, la temperatura y las velocidades de las reacciones finitas se expresan en términos de la fracción de mezcla, se construye toda la actividad química.

El promedio condicional de una cantidad escalar Q para un determinado valor z de la fracción de mezcla, se determina utilizando hipótesis hechas sobre la estructura de la llama, por ejemplo *flamelets* (capas reactivas delgadas localizadas dentro de un flujo turbulento que sin dichas capas no sería reactivo). Cuando las ecuaciones *flamelets* son solucionadas,

es decir se han computado las funciones $Q(z, \chi_{st})$, el valor promediado según Favre se obtiene a partir de

$$\bar{\rho}\tilde{Q} = \int_0^1 \int_0^\infty \rho Q(z, \chi_{st}) p(z, \chi_{st}) d\chi_{st} dz$$

donde χ_{st} es la disipación escalar sobre la superficie de mezcla estequiométrica y $p(z, \chi_{st})$ es la función distribución de probabilidades. Si se asume la independencia estadística de la función fracción de mezcla de la disipación χ_{st} , entonces $p(z, \chi_{st}) = p(z) p(\chi_{st})$. $p(z)$ es la función de probabilidad *pdf* $p(z)$ que se supone conocida (su forma es supuesta mediante una función analítica, por ejemplo la de la función β) y para *pdf* $p(\chi_{st})$, una distribución log normal es usada (Effelsberg y Peters, 1988). La implementación en openfoamTM de esta técnica estadística o similar como alternativa de la utilizada hasta ahora basada en el concepto PaSR , está contemplada como posible trabajo futuro.

Las simulaciones numéricas de flujos supersónicos realizadas con el ejecutable de openfoamTM denominado *rhoCentralFoam* han sido exitosas. Se buscará mediante trabajos futuros extender el campo de aplicación de dicho ejecutable a flujos que por su elevado número de Mach son caracterizados como hipersónicos ($M > 6$). Esta extensión implica considerar un comportamiento más real del aire, o sea tener en cuenta que por efecto de las altas temperaturas involucradas en ciertos problemas (por ej. cuerpos romos), existen procesos físicos y químicos conducentes a nuevos estados de equilibrio para la composición del aire. Para computar estos nuevos estados de equilibrio se incorporará al ejecutable *rhoCentralFoam* un *solver* para ser aplicado en procesos donde es válido asumir que la química es infinitamente rápida, así la disociación de especies moleculares, las reacciones para formar nuevos componentes y la ionización de elementos se regirán por constantes de equilibrio.

Referencias capítulo 4

- [1] **D. Poitou, M. EI HAFI and 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), 2011.
- [2] **O. A. Marzouk and E. D. Huckaby**, *A comparative study of eight finite-rate chemistry kinetics for CO/h₂ combustion*, *Engineering Applications of Computational Fluid Mechanics*, vol. Vol. 4(No. 3):pp. 331–356, 2010.
- [3] openFoam UserGuide, OpenCFD Ltd, 2010.

A. Técnicas numéricas

Introducción

En este apéndice se presentan los aspectos relevantes para el desarrollo de este trabajo referentes al manejo de la malla, discretización geométrica, espacial y temporal de las ecuaciones de transporte, uno de los algoritmos para tratar el acoplamiento presión-velocidad (algoritmo PISO) y algunas de las condiciones de borde disponibles dentro de openfoamTM. Todo esto con el fin de esbozar de manera adecuada y concisa la interacción entre la teoría y la implementación dentro de dicho paquete de simulación. La razón de exponer esto como un apéndice, parte de la base de mostrar de forma genérica la manera en que se tratan dichas ecuaciones dentro de openfoamTM y brindar un material de soporte que será continuamente referenciado en los capítulos que conforman la presente tesis. El proceso de discretización se puede dividir en tres partes fundamentales [19, 22].

1. Discretización espacial o del dominio mediante la generación de la malla.
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 openfoamTM fue implementar un código numérico que fuera generalizado y flexible al mismo tiempo; atendiendo a esto, hay que tener en cuenta todas las etapas que se deben considerar a la hora de la elaboración de un código numérico. Lo primero es seleccionar el método numérico a utilizar, en este caso volúmenes finitos, y de acuerdo a esto 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 openfoamTM 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. 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.

Nomenclatura

Abreviaturas

CFL	Condición de Courant–Friedrichs–Lewy
EDPs	Ecuaciones en derivadas parciales
FPCD	Factor de ponderación convección-difusión
fV	fixed Value.
MinMod	Funcion 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
Co	Número de courant
D	Coefficiente de difusión
\mathbf{d}	Vector posición entre los centroides de las celda propietaria y vecina
\mathbf{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
\mathbf{g}	Aceleración de la gravedad
\mathbf{k}	Vector que mide la no-ortogonalidad
\mathbf{m}	Vector que mide la oblicuidad de la celda
N	Centroide de la celda vecina
\mathbf{n}	Vector normal
Pe	Número de Peclet
P	Centroide de la celda propietaria
p	Presión
p^*	Presión de inicio algoritmo PISO
\mathbf{Q}	Vector que representa otras fuentes de calor externas

\mathbf{q}	Vector que representa al flujo de calor por conducción (difusión)
\mathbf{R}	Vector columna de términos fuente
\mathbf{r}	Vector posición del centroide de la celda
\mathbf{r}_{fN}	Vector desde el centroide de la región intercelda (cara) al centroide de la celda vecina
$S(\psi)$	Término fuente
\mathbf{S}_f	Vector de superficie de la cara de la celda
T	Temperatura
t	Tiempo
\mathbf{U}	Velocidad de transporte
V_p	Volumen de la celda

Alfabeto Griego

$\beta(r)$	Función limitadora
Γ	Factor de interpolación
Δt	Paso de tiempo fluidodinámico
μ	Viscosidad molecular
ρ	Densidad
$\underline{\underline{\sigma}}$	Tensor de tensiones
$\underline{\underline{\tau}}$	Tensor de tensiones viscosas
ϕ_c	Flujo convectivo de una cantidad escalar
ϕ_d	Flujo difusivo de una cantidad escalar
χ	factor de ponderación convección-difusión
ψ	Compresibilidad
$\underline{\underline{\psi}}$	Cantidad tensorial genérica
Ω	Dominio computacional
ω	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

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
Tr	Traza
$\Delta,(),_i$	Operador divergencia discreto

A.1. 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 lograr 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 $\Delta t \rightarrow 0 \wedge \Delta \mathbf{x} \rightarrow 0$ se puede decir que el esquema es consistente [9, 28].

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 proveniente de la discretización.
- **Errores de convergencia iterativa**¹: Es el error introducido por la diferencia obtenida entre 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 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 analizar, 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-relajación² a fin de garantizar la estabilidad [28].

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 de conservación 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 [37]. Hay que tener en cuenta que un esquema puede ser consistente, estable y no-conservativo, e incluso así producir soluciones correctas al utilizar niveles altos de refinamiento espacial [28]. No obstante, esto es costoso desde el punto de vista computacional, de aquí que es recomendable en lo posible utilizar esquemas numéricos conservativos.

¹También conocidos como errores iterativos. Aquí se trata de errores de convergencia en el sentido de la convergencia del método iterativo utilizado para resolver el sistema de ecuaciones, no en el sentido de la convergencia a una solución independiente de la malla [28].

²Al 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.

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 [28]. 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 [10].

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 (ρ) 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 de refinamiento no apropiados [28]. Sin embargo para resolver este inconveniente en dichos esquemas numéricos aparecen las funciones limitadoras.

Factibilidad

Aunque 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 cierto fenómeno físico, las cuales deben garantizar soluciones físicamente realistas. Esto se relaciona con la parte numérica en el sentido de que si se parte de hipótesis incorrectas es probable que el método numérico adoptado diverga [28].

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 [14, 18, 22, 23, 26, 28, 37, 39], 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.

A.2. Discretización geométrica

La discretización geométrica es una parte integral del proceso de solución de cualquier problema abordado mediante el método de volúmenes finitos. En particular openfoamTM fue diseñado para soportar mallas no estructuradas compuestas de celdas poliédricas arbitrarias en tres dimensiones, es decir que soporta distintos tipos de celdas en el sentido geométrico (hexaedros, pirámides, celdas tipo cuña, tetraedros, etc). De forma general admite definir celdas con cantidad arbitraria de caras poligonales, donde para las caras no existe restricción en cuanto al número y alineamiento de los ejes que la 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, lo cual no quiere decir que no se puedan tratar casos unidimensionales, bidimensionales o axisimétricos. Estos problemas son factibles de abordar empleando condiciones de borde especiales (ver sec. A.6).

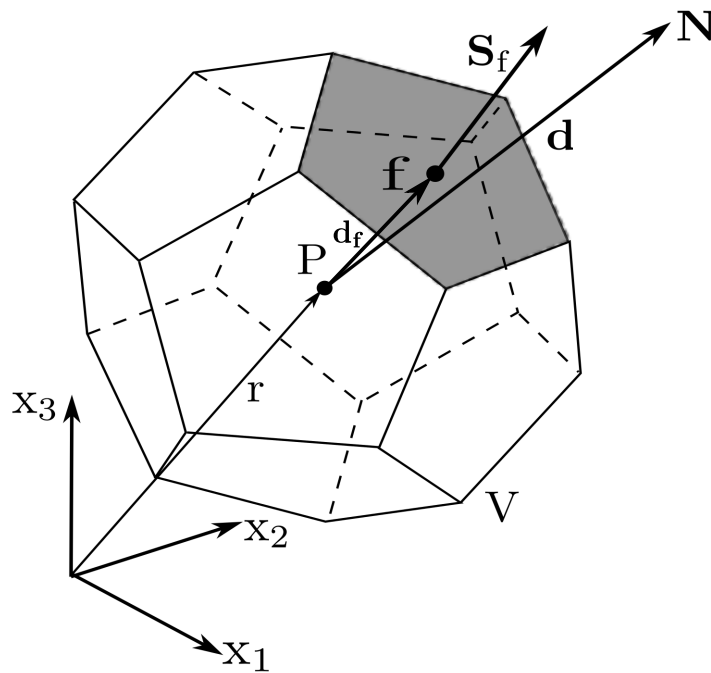


Figura A.1.: Celda poliédrica arbitraria.

En la Fig. A.1 se puede ver una celda poliédrica arbitraria, donde:

P : Centroide de la celda propietaria.

\mathbf{r} : Vector posición del centroide de la celda.

f : Cara que delimita el contorno de una celda adyacente a otra (región intercelda).

\mathbf{d} : Vector posición entre los centroides de la celda propietaria y de la celda vecina.

\mathbf{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.

\mathbf{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 caras de las celdas se dividen en dos grupos: el primero las celdas internas, que delimitan dos volúmenes de control y ninguna de sus caras se encuentra sobre el contorno; el segundo las celdas que coinciden con el contorno del dominio, en las cuales al menos una de sus caras coincidirá con la frontera del dominio. Se construye el vector de superficie de cada cara (\mathbf{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 dicha cara. 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. A.1, la cara sombreada pertenece a la celda propietaria, por lo tanto los centros de las celdas propietaria y vecina en este caso serán P y N . El punto central de la celda P , está localizado en el centroide de la misma, en consecuencia:

$$\int (\mathbf{x} - \mathbf{x}_p) dV = 0 \quad (\text{A.1})$$

A su vez, la malla satisface las siguiente condiciones:

- Debe cubrir enteramente el dominio.
- No deben existir espacios vacíos interceldas.
- Las celdas no se superponen (no debe existir solapamiento).

Dichas condiciones deben satisfacerse de forma de preservar las propiedades de conservación de las ecuaciones de gobierno en el dominio computacional [23]. Otro punto a destacar de esta metodología de mallado es que también se adapta de forma adecuada con el refinamiento local, lo que permite añadir celdas en zonas del dominio donde se requiere mayor resolución, por ejemplo en zonas donde se espera la aparición de discontinuidades [29]. En general los valores de las variables dependientes se almacenan en el centro 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*) (ver sec. A.5.1)[28]. Esta corrección es proporcional a la diferencia entre el gradiente de presión en el centro de la celda y su valor interpolado a la cara (ver sec. A.5.1) [27, 33].

A.2.1. 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 [32].

Puntos: Se definen como un vector en tres dimensiones cuyas componentes deben estar en metros (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 tal forma 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. A.2). 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 que los puntos que las definen no necesariamente deben ser coplanares, pero el centro de la celda debe estar contenido dentro de la misma.

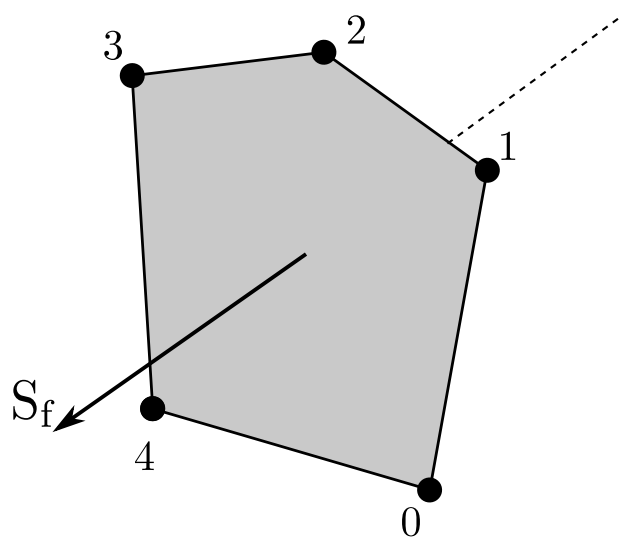


Figura A.2.: Vector normal a una cara según el sentido de numeración de los puntos.

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 [29]:

- Una celda geoméricamente cerrada, se define como 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. Se define para todas las celdas internas el vector que conecta los centroides de las mismas, éste se orienta de forma que apunte 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° .

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.

A.3. Discretización de las ecuaciones (método de los volúmenes finitos)

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

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

donde ρ 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 fuente 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 (Eq. A.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 al término fuente, éste puede ser escrito en la forma [18]:

$$S(\underline{\underline{\psi}}) = \underbrace{S_r \underline{\underline{\psi}}}_{(6)} + \underbrace{S_q}_{(7)} \quad (\text{A.3})$$

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 $\underline{\psi}$ como $\underline{\psi} = \begin{bmatrix} 1 & \mathbf{U} & e \end{bmatrix}$ se obtienen las **ecuaciones de Navier-Stokes**³[35, 41]:

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U}) = 0 \quad (\text{A.4})$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \mathbf{U}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \mathbf{U}) = \rho \mathbf{g} + \nabla \cdot \underline{\boldsymbol{\sigma}} \quad (\text{A.5})$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho e) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} e) = \rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{U} + \nabla \cdot (\underline{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{U}) - \nabla \cdot \mathbf{q} + \rho \mathbf{Q} \quad (\text{A.6})$$

Retomando la Eq. A.2, al ser ésta de segundo orden, requiere para obtener un orden apropiado de precisión, que el orden de la discretización sea de segundo orden. Considerando una celda arbitraria sobre la cual se define el dominio computacional Ω e integrando la Eq. A.2 sobre dicho dominio, se tiene:

$$\int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial t} (\rho \underline{\psi}) \, d\Omega + \int_{\Omega} \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \underline{\psi}) \, d\Omega - \int_{\Omega} \nabla \cdot \rho D \nabla \underline{\psi} \, d\Omega = \int_{\Omega} S(\underline{\psi}) \, d\Omega \quad (\text{A.7})$$

Empleando el teorema de la divergencia (teorema de Gauss), el segundo y tercer término del lado izquierdo en la Eq. A.7 se transforman de integrales sobre el dominio a integrales sobre el contorno :

$$\int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial t} (\rho \underline{\psi}) \, d\Omega + \int_{\delta\Omega} (\rho \mathbf{U} \underline{\psi}) \cdot \mathbf{n} \, d\delta\Omega - \int_{\delta\Omega} (\rho D \nabla \underline{\psi}) \cdot \mathbf{n} \, d\delta\Omega = \int_{\Omega} S(\underline{\psi}) \, d\Omega \quad (\text{A.8})$$

Integrando la Eq. A.8 en el tiempo [19, 29, 37]:

$$\begin{aligned} \int_t^{t+\Delta t} \left\{ \frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \rho \underline{\psi} \, d\Omega + \int_{\delta\Omega} (\rho \mathbf{U} \underline{\psi}) \cdot \mathbf{n} \, d\delta\Omega - \int_{\delta\Omega} (\rho D \nabla \underline{\psi}) \cdot \mathbf{n} \, d\delta\Omega \right\} dt \\ = \int_t^{t+\Delta t} \left\{ \int_{\Omega} S(\underline{\psi}) \, d\Omega \right\} dt \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

Se obtiene la forma genérica de las ecuaciones que en general se debe satisfacer sobre el volumen de control. El grado de aproximación requerido para obtener resultados que cuenten con la suficiente precisión, como ya se mencionó debe ser de segundo orden. Este grado de aproximación depende del tipo de variación que se adopte para $\underline{\psi}(\mathbf{x}, t)$. Para

³Nótese que el coeficiente de difusión se modifica de acuerdo a la cantidad transportada, para simplificar se utiliza el tensor de tensiones $\underline{\boldsymbol{\sigma}} = -\nabla \cdot \mathbf{P} + \underline{\boldsymbol{\tau}}$, donde $\underline{\boldsymbol{\tau}}$ es el tensor de tensiones viscosas.

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 $\underline{\psi}(\mathbf{x}, t)$ en este caso 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 [29]:

$$\varphi(\mathbf{x}) = \varphi_P + \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{x}_P) \cdot (\nabla\varphi)_P \quad (\text{A.10})$$

$$\varphi(t + \Delta t) = \varphi^t + \Delta t \left(\frac{\partial\varphi}{\partial t} \right)_t \quad (\text{A.11})$$

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

$$\begin{aligned} \varphi(\mathbf{x}) &= \varphi_P + (\mathbf{x} - \mathbf{x}_P) \cdot (\nabla\varphi)_p \\ &+ \frac{1}{2} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_P)^2 : (\nabla\nabla\varphi)_p \\ &+ \frac{1}{3!} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_P)^3 :: (\nabla\nabla\nabla\varphi)_p + \frac{1}{n!} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_P)^n G^n \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

donde:

$$G^n = (: n) (n\nabla\varphi)_p \quad (\text{A.13})$$

Aquí $(\mathbf{x} - \mathbf{x}_P)^n$ 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 φ . Comparando el desarrollo en serie expuesto con la Eq. A.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:

$$\varphi(t + \Delta t) = \varphi(t) + \Delta t \left(\frac{\partial\varphi}{\partial t} \right)_t + \frac{\Delta t^2}{2} \left(\frac{\partial^2\varphi}{\partial t^2} \right) + H \quad (\text{A.14})$$

Es posible concluir que la aproximación temporal también 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 refinan. A continuación se mostrará como se evalúan cada uno de los términos involucrados en la Eq. A.9.

A.3.1. Aproximación de las integrales de volumen

Luego de integrar sobre el dominio a la ecuación de transporte genérica presentada con anterioridad (Eq. A.2), aparecen integrales que deben ser evaluadas sobre el volumen de

la celda (Eq. A.9):

$$\int \boldsymbol{\psi}(\mathbf{x})dV \quad (\text{A.15})$$

En consecuencia aparece la necesidad de establecer una metodología para evaluar las mismas. Reemplazando en la expresión anterior la aproximación espacial propuesta en la sección anterior:

$$\int_V \boldsymbol{\psi}(\mathbf{x})dV = \int_V \{ \boldsymbol{\psi}_p + (\mathbf{x} - \mathbf{x}_P) \cdot (\nabla \boldsymbol{\psi})_p \} dV \quad (\text{A.16})$$

y teniendo en cuenta que $\int_V (\mathbf{x} - \mathbf{x}_P) dV = 0$, se tiene:

$$\begin{aligned} \int_V \boldsymbol{\psi}(\mathbf{x})dV &= \int_V \boldsymbol{\psi}_p dV \\ &= \boldsymbol{\psi}_P \int_V dV \\ &= \boldsymbol{\psi}_P V_P \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

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 misma⁴.

A.3.2. Aproximación de las integrales de de superficie

De aplicar el teorema de Gauss a los términos que involucran divergencias en la forma integral de la ecuación de transporte genérica (Eq. A.9), aparecen términos del tipo:

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot \boldsymbol{\psi} d\Omega = \oint_{\delta\Omega} \boldsymbol{\psi} \cdot \mathbf{n} d\delta\Omega \quad (\text{A.18})$$

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

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot \boldsymbol{\psi} d\Omega = \oint_{\delta\Omega} \boldsymbol{\psi} \cdot d\mathbf{S} \quad (\text{A.19})$$

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

⁴Se 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 $\underline{\boldsymbol{\psi}}$ como un tensor de orden arbitrario, sin embargo la notación se cambiara a $\boldsymbol{\psi}$ de aquí en adelante, a menos que se indique lo contrario.

sobre todas las caras:

$$\oint_{\delta\Omega} \boldsymbol{\psi} \cdot d\mathbf{S} = \sum_f \left(\int_f \boldsymbol{\psi} \cdot d\mathbf{S} \right) \quad (\text{A.20})$$

Reemplazando la aproximación espacial propuesta (Eq. A.10) en la integral sobre las caras se consigue

$$\begin{aligned} \int_f \boldsymbol{\psi} \cdot d\mathbf{S} &= \int_f \{ \boldsymbol{\psi}_f + (\mathbf{x} - \mathbf{x}_f) \cdot (\nabla \boldsymbol{\psi})_f \} d\mathbf{S} \\ &= \int_f \boldsymbol{\psi}_f \cdot d\mathbf{S} + \left\{ \int_f (\mathbf{x} - \mathbf{x}_f) d\mathbf{S} \right\} \cdot (\nabla \boldsymbol{\psi})_f \\ &= \boldsymbol{\psi}_f \cdot \mathbf{S} \end{aligned} \quad (\text{A.21})$$

En la Eq. A.17 se observó, como 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 Eq. A.18 como el producto de $\nabla \cdot \boldsymbol{\psi}$ por el volumen de la celda, entonces, reemplazando la Eq. A.20 en el lado derecho y empleando la Eq. A.21 se obtiene la siguiente expresión para evaluar las integrales de superficie:

$$\begin{aligned} (\nabla \cdot \boldsymbol{\psi}) V_P &= \sum_f (\boldsymbol{\psi}_f \cdot \mathbf{S}) \\ (\nabla \cdot \boldsymbol{\psi}) &= \frac{1}{V_P} \sum_f (\boldsymbol{\psi}_f \cdot \mathbf{S}) \end{aligned} \quad (\text{A.22})$$

La Eq. A.22, corresponde a una versión discreta de segundo orden del teorema de Gauss [29, 35], 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 de la celda 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 centro 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:

$$\sum_f (\boldsymbol{\psi}_f \cdot \mathbf{S}) = \sum_{f_o} (\boldsymbol{\psi}_f \cdot \mathbf{S}_f) - \sum_{f_v} (\boldsymbol{\psi}_f \cdot \mathbf{S}_f) \quad (\text{A.23})$$

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

A.3.3. Término convectivo

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** ϕ_c ; empleando lo expuesto en la sec. A.3.2, esta integral se puede aproximar de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} \int_{\delta\Omega} (\rho \mathbf{U} \psi) \cdot \mathbf{n} \, d\delta\Omega &= \sum_{\mathbf{f}} (\rho \mathbf{U} \psi)_{\mathbf{f}} \cdot \mathbf{S} \\ &= \sum_{\mathbf{f}} ((\rho \mathbf{U})_{\mathbf{f}} \cdot \mathbf{S}) \psi_{\mathbf{f}} \\ &= \sum_{\mathbf{f}} \phi_c \psi_{\mathbf{f}} \end{aligned} \quad (\text{A.24})$$

Para calcular los flujos convectivos (Eq. A.24) es necesario conocer el valor de ψ en las caras, el cual se determina a partir del valor en el centro de la celda. Para determinar el valor de $\psi_{\mathbf{f}}$ se utilizan los **esquemas de interpolación**. Un punto a tener en cuenta al seleccionar un esquema de interpolación, es que éste garantice que la variable se mantenga acotada y no dé lugar a la aparición de valores espurios.

A.3.4. Esquemas de interpolación

Se puede considerar como paso fundamental en el método de los volúmenes finitos contar con procedimientos adecuados que permitan interpolar la variable transportada desde el centro de las celdas ψ_P al centro de las caras $\psi_{\mathbf{f}}$. Puesto que el *software* empleado en este trabajo, utiliza mallas no estructuradas, resulta poco conveniente emplear otros puntos que no sean P y N [29]. Es decir que 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 centro de la celda. A continuación se describen brevemente algunos de ellos.

A.3.4.1. 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. De acuerdo con la Fig. A.3, el valor de $\psi_{\mathbf{f}}$ dada la variación lineal supuesta,

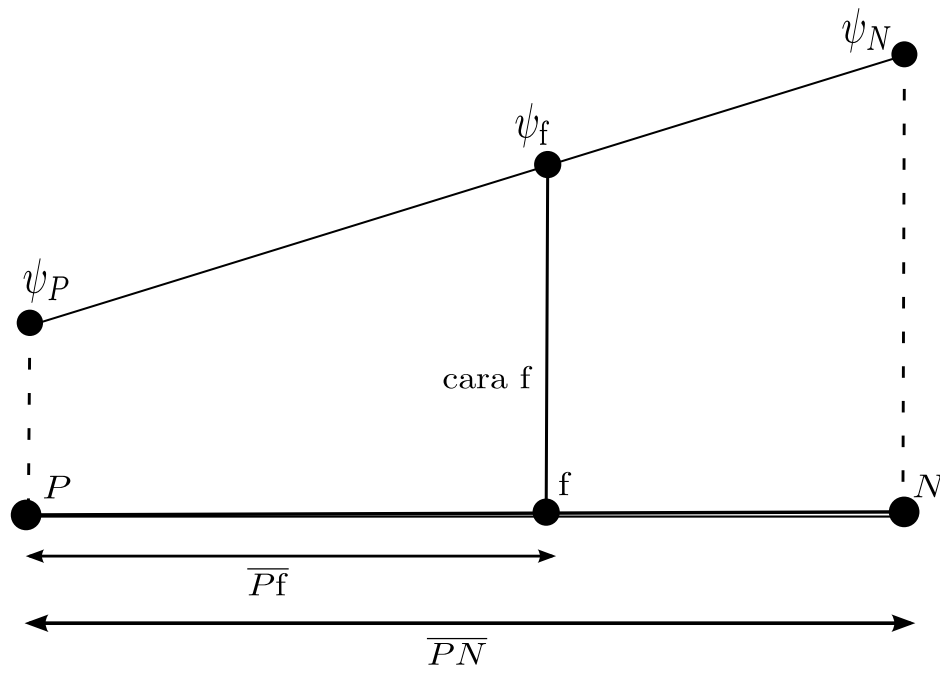


Figura A.3.: Interpolación lineal en las caras.

resulta:

$$\begin{aligned} \psi_f &= \frac{\psi_N - \psi_P}{\overline{PN}} (\overline{PN} - \overline{fN}) + \psi_P \\ &= \psi_N \left(1 - \frac{\overline{fN}}{\overline{PN}}\right) + \psi_P \frac{\overline{fN}}{\overline{PN}} \end{aligned} \tag{A.25}$$

Mediante expansión en serie de Taylor, es simple mostrar que este esquema es de segundo orden (sec. A.3) inclusive en mallas no uniformes [28], 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. Estos esquemas se conocen como esquemas tipo *upwind*, se construyen atendiendo a ciertas características físicas de las ecuaciones a resolver. Una de las más remarcables 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 [23].

A.3.4.2. Esquema *upwind*

En un flujo con efectos convectivos fuertes, al determinar el valor de una variable dependiente en una cara ψ_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 dependiendo de la dirección del flujo. El esquema central 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 central aparece el esquema *upwind*.

Con el esquema *upwind*, los valores en las caras se evalúan dependiendo de la dirección del flujo [23]:

$$\psi_f = \frac{\max(\phi_c, 0)\psi_P + \min(\phi_c, 0)\psi_N}{\phi_c} \quad (\text{A.26})$$

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 [28], se observa que únicamente retiene el primer término de la serie, por lo cual a diferencia del esquema central, 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** en la solución [18]. No obstante, la aparición de dicha difusión numérica no sólo se asocia al 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 [37]. La falsa difusión se reduce a medida que la malla se refina y mediante la utilización de esquemas con un orden de aproximación superior.

A.3.4.3. Esquema central *upwinded*

El esquema central *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 propietaria. Para expresar la idea fundamental, se considerará un arreglo unidimensional como el que se mostró en la Fig. A.3 y se supondrá el flujo en la dirección positiva de P hacia N . Este esquema interpola el valor en la cara utilizando la siguiente expresión:

$$\psi_f = \psi_{f,UP} + \nabla\psi_{AR_f} \cdot \mathbf{r}_{fAR_c} \quad (\text{A.27})$$

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 ψ 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. Para el caso unidimensional de la Fig. A.3 se tiene:

$$\psi_f = \psi_p + \nabla\psi_N \cdot \mathbf{r}_{fN} \quad (\text{A.28})$$

Nótese que para utilizar este 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 como se realiza esta estimación (ver sec. A.3.7). Este esquema es de segundo orden y limita la difusión de acuerdo a la aproximación que se utilice para evaluar el gradiente.

A.3.4.4. Esquema híbrido o combinado

El esquema híbrido es una combinación del esquema *upwind* y el centrado en un sentido más general que el esquema central *upwinded* [37]. Este esquema se basa en el número de Peclet local para evaluar el flujo neto a través de las caras.

$$\text{Pe} = \frac{\text{flujo convectivo}}{\text{flujo difusivo}} = \frac{\phi_c}{\phi_d} \quad (\text{A.29})$$

De la definición del número de Peclet, es evidente que para altos valores del mismo los efectos convectivos serán preponderantes sobre los difusivos y para números bajos los difusivos serán de mayor importancia. El esquema híbrido propuesto por Spalding en 1972 [21], intercambia el esquema de discretización entre centrado y *upwind* acorde a un criterio similar al presentado aquí. En este caso la interpolación de ψ_f resulta:

$$\psi_f = (1 - \chi) (\psi_f)_{UP} + \chi (\psi_f)_{CD} \quad (\text{A.30})$$

donde los subíndices *CD* y *UP* representan respectivamente a los valores obtenidos al interpolar con los esquemas centrado y *upwind* respectivamente. El parámetro χ (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. También proporciona un primer indicio de que es factible escribir los esquemas numéricos de tal forma que se pueda llegar a una expresión genérica de los mismos.

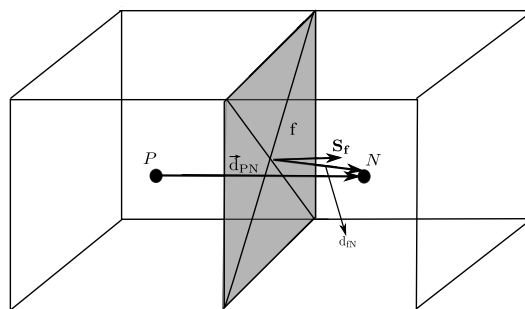


Figura A.4.: Discretización en un dominio unidimensional.

A.3.4.5. Generalización de los esquemas de interpolación

Considérese el transporte por convección de una cantidad escalar ψ en un dominio unidimensional como el mostrado en la Fig. A.4, supóngase que se interpola el valor de la

variable de interés hacia la cara de la siguiente forma [29, 41]:

$$\psi_f = \Gamma \psi_P + (1 - \Gamma) \psi_N \quad (\text{A.31})$$

donde al **factor de interpolación** (Γ) 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 (sec. A.3.4.1) dicho factor toma la forma:

$$\Gamma_{CD} = \frac{\overline{fN}}{\overline{PN}} \quad (\text{A.32})$$

Operando con Γ_{CD} sobre la Eq. A.31, es evidente que se recupera la aproximación para ψ_f provista por el esquema centrado (Eq. A.25):

$$\psi_f = \left(1 - \frac{\overline{fN}}{\overline{PN}}\right) \psi_N + \frac{\overline{fN}}{\overline{PN}} \psi_P \quad (\text{A.33})$$

Esto conduce a pensar que cualquier esquema de discretización puede ser implementado proporcionando al factor de interpolación (Γ) la forma apropiada. Ahora considérese que se aplica el esquema *upwind* (sec. A.3.4.2), según lo indicado por la Eq. A.26, es claro que el flujo convectivo ($\phi_c = \mathbf{U} \cdot \psi_f$) resulta en la dirección positiva si $\phi_c > 1$, con lo que:

$$\phi_c = \phi_P \quad (\text{A.34})$$

De esta forma para un flujo convectivo en la dirección positiva si se toma el factor de interpolación (Γ) en la Eq. A.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 Γ será nulo. De acuerdo a esto, el factor de interpolación correspondiente al esquema *upwind* se define como:

$$\Gamma_{UP} = \frac{\max(\phi_c, 0)}{\phi_c} \quad (\text{A.35})$$

Recordando que para el esquema híbrido (sec. A.3.4.4) la interpolación de la variable de interés resulta:

$$\psi_f = (1 - \chi) (\psi_f)_{UP} + \chi (\psi_f)_{CD} \quad (\text{A.36})$$

Luego, reemplazando en la ecuación anterior (Eq. A.36) la Eq. A.31 se tiene:

$$\begin{aligned}
\psi_f &= (1 - \chi) (\psi_f)_{UP} + \chi (\psi_f)_{CD} \\
&= (1 - \chi) \left(\Gamma \psi_p + (1 - \Gamma) \psi_N \right)_{UP} + \chi \left[\Gamma \psi_p + (1 - \Gamma) \psi_N \right]_{CD} \\
&= (1 - \chi) \left[\Gamma_{UP} \psi_p + (1 - \Gamma_{UP}) \psi_N \right] + \chi \left[\Gamma_{CD} \psi_p + (1 - \Gamma_{CD}) \psi_N \right] \\
&= [(1 - \chi) \Gamma_{UP} + \chi \Gamma_{CD}] (\psi_p - \psi_N) + \psi_N
\end{aligned} \tag{A.37}$$

De esta forma es posible generalizar los esquemas numéricos mediante el ya definido FPCD (ver Eq. A.30) y un **factor limitador** ($\omega = ((1 - \chi) \Gamma_{UP} + \chi \Gamma_{CD})$), dicha generalización se conoce como esquemas tipo *upwind* sesgados [37], puesto que combinan una contribución del esquema centrado y una del *esquema upwind* en la interpolación.

A.3.4.6. 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. En la sección anterior 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. Sin embargo ninguno de los esquemas definidos hasta el momento 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) [11, 12] 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. 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 [14, 23, 37, 39]:

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

Es decir, para cualquier condición inicial $\psi(0, \mathbf{x})$ la cual no es decreciente o creciente, la solución numérica ψ^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 TDV introducida por Harten [11] 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) [23]. La condición que debe satisfacer un

esquema TVD es que la variación total (TV), definida a nivel discreto como:

$$\text{TV}(\psi^n) = \sum_i (\psi^n_N - \psi^n_P) \quad (\text{A.38})$$

satisfaga [12]:

$$\text{TV}(\psi^{n+1}) \leq \text{TV}(\psi^n) \quad (\text{A.39})$$

Con lo cual se garantiza la condición de monotonicidad. Sweby demostró que este tipo de esquemas satisfacen la **condición de entropía**⁵ lo que es de suma importancia para obtener soluciones físicamente posibles [12].

Retomando la Eq. A.37 en la forma:

$$\psi_f = \omega(\psi_P - \psi_N) + \psi_N \quad (\text{A.40})$$

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 apropiada 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 ($\chi = \Psi(r)$) [11, 12, 22, 37] (ver Fig. A.5):

$$r = \frac{\psi_C - \psi_U}{\psi_D - \psi_C} \quad (\text{A.41})$$

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

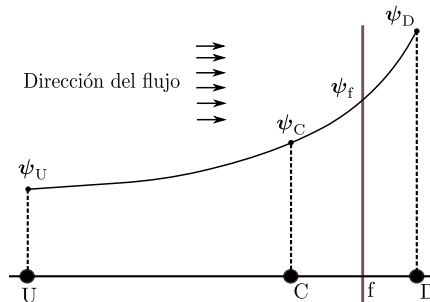


Figura A.5.: Variación de ψ alrededor de la cara de la celda.

Para garantizar que un esquema numérico sea TVD, éste debe satisfacer la condición

⁵Al 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.

(Fig. A.6.a) [12]:

$$0 \leq \left(\frac{\psi(r)}{r}, \psi(r) \right) \leq 2 \quad (\text{A.42})$$

En la Fig. A.6.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 de segundo orden corresponde a $\psi(r) = 1$, es decir que el hecho de que la función $\psi(r)$ se encuentre sobre la región TVD 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:

$$\psi(1) = 1 \quad (\text{A.43})$$

Por lo tanto, una función limitadora que cumpla la condición TVD (Eq. A.42) 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. A.6.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 [24], la de Sweby [12], la de van Albada [17] y las funciones Min-Mod y SUPERBEE de Roe [13]. Puesto que no es el objetivo central de este trabajo analizar cada una de ellas, únicamente se mencionarán algunas de las existentes (ver Tab. A.2), de las cuales a su vez se seleccionarán las adecuadas para el desarrollo de algunas de las simulaciones numéricas objeto de la presente tesis. Una propiedad importante de todas las funciones limitadoras citadas aquí, es que todas son simétricas, es decir se verifica que[37]:

$$\frac{\psi(r)}{r} = \psi\left(\frac{1}{r}\right) \quad (\text{A.44})$$

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.

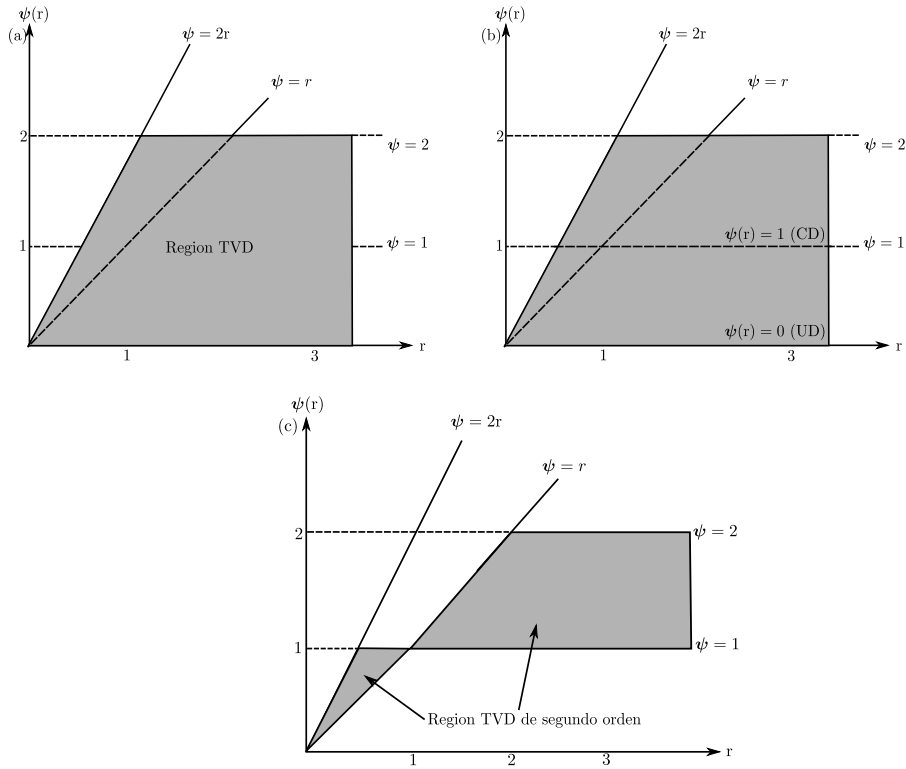


Figura A.6.: (a) Región TVD, (b) Esquemas central y *upwind* dentro de la región TVD, (c) Región TVD de segundo orden.

	$\psi(r)$
van Leer	$\frac{r + r }{1 + r}$
Sweby ⁶	$\max [0, \min (\beta r, 1), \min (r, \beta)]$
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 A.2.: Funciones limitadoras: van Leer, Sweby, van Albada, MinMod y SUPERBEE

En esta sección se mostró que dentro de `openfoam`TM 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 hablo de ello, dentro de `openfoam`TM existen enfoques alternativos en lo que respecta a esquemas de alto orden. En lugar de emplear esquema basados en la técnica TVD, dentro de los esquemas implementados se encuentran los basados en el enfoque alternativo denominado *Normalised Variable Diagram* (NVD) [15, 16, 29], puesto que aquí no se emplea dicho enfoque únicamente se menciona a nivel informativo.

⁶Aquí β es una constante definida dentro del intervalo $1 \leq \beta \leq 2$. Cabe notar que para $\beta = 1$ el limitador de Sweby se reduce al Min-Mod, y para $\beta = 2$ toma la forma del SUPERBEE

A.3.5. Término difusivo

Al aplicar el teorema de Gauss al término difusivo de la Eq. A.2 se convierte dicho término de una integral de volumen a una integral 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 sec. A.3.2, es posible aproximar el término del lado derecho de la ecuación anterior en la forma:

$$\int_{\delta\Omega} (\rho D \nabla \psi) \cdot \mathbf{n} d\delta\Omega = \sum_f (\rho D \nabla \psi)_f \cdot \mathbf{S} + \sum_f (\rho D)_f \mathbf{S} \cdot (\nabla \psi)_f \quad (\text{A.45})$$

Se observa que es necesario realizar un procedimiento de interpolación para evaluar el coeficiente de difusión en las caras. De acuerdo a lo expuesto en la sec. A.3.4, esto 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. Se requiere entonces implementar un procedimiento que permita evaluar gradientes teniendo en cuenta los efectos de la no ortogonalidad y al mismo tiempo obtener una aproximación del orden adecuado.

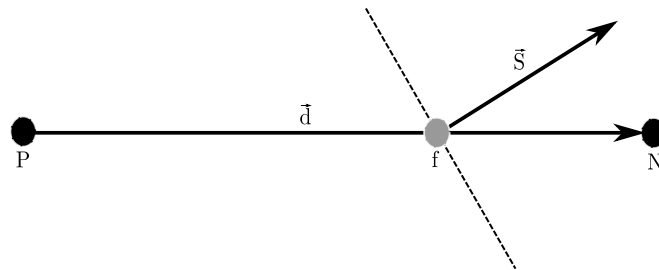


Figura A.7.: Corrección de la no-ortogonalidad.

Supóngase que el producto entre el vector de superficie \mathbf{S} y el gradiente de la variable de interés $(\nabla \psi)$ se puede dividir en una contribución de la parte ortogonal y una corrección debida a la parte no ortogonal [29]:

$$\mathbf{S} \cdot (\nabla \psi)_f = \underbrace{\Delta \cdot (\nabla \psi)_f}_{\text{Contribucion Ortogonal}} + \underbrace{\mathbf{k} \cdot (\nabla \psi)_f}_{\text{Correccion No Ortogonal}} \quad (\text{A.46})$$

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

$$\mathbf{S} = \Delta + \mathbf{k} \quad (\text{A.47})$$

A su vez, el vector Δ se selecciona buscando que sea paralelo al vector de posición \mathbf{d} que conecta los centroides de las celdas (Fig. A.7). Esto permite evaluar dicha contribución ortogonal como⁷:

$$\Delta \cdot (\nabla \psi)_f = |\Delta| \frac{\psi_N - \psi_P}{|\mathbf{d}|} \quad (\text{A.48})$$

Ahora sólo resta evaluar la corrección de la no-ortogonalidad de alguna forma. Para hacer esta corrección existen distintos métodos, los cuales se discuten brevemente a continuación [29, 35].

A.3.5.1. Método de la corrección mínima

Se descompone el vector de superficie (\mathbf{S}) de forma tal que el término de corrección en la Eq. A.47 aporte la mínima contribución posible. Tomando ortogonales a Δ y \mathbf{k} :

$$\Delta = \frac{\mathbf{d} \cdot \mathbf{S}}{\mathbf{d} \cdot \mathbf{d}} \mathbf{d} \quad (\text{A.49})$$

Con lo que \mathbf{k} resulta:

$$\mathbf{k} = \mathbf{S} - \frac{\mathbf{d} \cdot \mathbf{S}}{\mathbf{d} \cdot \mathbf{d}} \mathbf{d} \quad (\text{A.50})$$

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

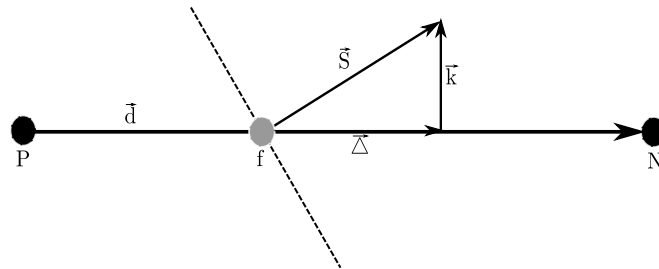


Figura A.8.: Método de la corrección mínima.

A.3.5.2. Método de la corrección ortogonal

Mantiene la misma contribución de los nodos involucrados independiente de la no ortogonalidad (Fig. A.9), se define al vector Δ :

$$\Delta = \frac{\mathbf{d}}{|\mathbf{d}|} |\mathbf{S}| \quad (\text{A.51})$$

⁷Esta contribución ortogonal responde a la componente del gradiente en la dirección de \mathbf{d} .

De esta forma para \mathbf{k} se tiene:

$$\mathbf{k} = \mathbf{S} - \frac{\mathbf{d}}{|\mathbf{d}|} |\mathbf{S}| \quad (\text{A.52})$$

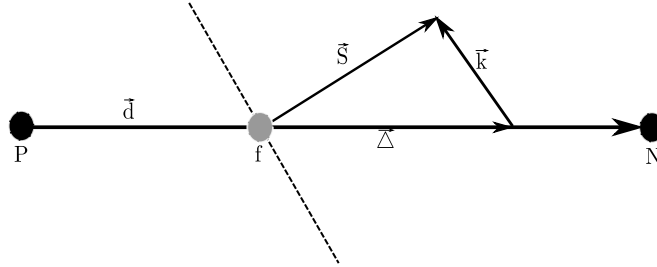


Figura A.9.: Método de la corrección ortogonal.

A.3.5.3. Método de sobre-relajación

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

$$\Delta = \frac{\mathbf{d}}{\mathbf{d} \cdot \mathbf{S}} |\mathbf{S}|^2 \quad (\text{A.53})$$

Es interesante ver que la versión discretizada del término difusivo únicamente satisface la propiedad de acotación (*boundedness property*) en mallas ortogonales, es decir que el enfoque de corrección afecta de manera contundente la acotación de la solución [28, 37]. 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 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 su precisión y estabilidad de acuerdo a la no-ortogonalidad de la malla [29].

Finalmente, la forma discreta del término difusivo resulta:

$$\mathbf{S} \cdot (\nabla \psi)_f = |\Delta| \frac{\psi_N - \psi_P}{|\mathbf{d}|} + \mathbf{k} \cdot (\nabla \psi)_f \quad (\text{A.54})$$

Donde Δ y \mathbf{k} quedan determinados de acuerdo a alguna de las metodologías expuestas (sec. A.3.5.1, sec. A.3.5.2, sec. A.3.5.3) y el gradiente en la cara de la celda de la propiedad transportada puede ser interpolado por ejemplo utilizando el esquema centrado:

$$(\nabla \psi)_f = \left(1 - \frac{\overline{fN}}{\overline{PN}}\right) (\nabla \psi)_N + \frac{\overline{fN}}{\overline{PN}} (\nabla \psi)_P \quad (\text{A.55})$$

Y en general:

$$(\nabla\psi)_f = (1 - \Gamma) (\nabla\psi)_N + \Gamma (\nabla\psi)_N \quad (\text{A.56})$$

A.3.6. Término fuente

El término fuente puede ser en general una 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 término fuente [29]. Es importante tener presente el impacto de la discretización seleccionada para los términos fuentes con respecto a los otros términos de la ecuación tanto en la acotación como en la precisión de la solución. Existen distintas metodologías para tratar los términos fuentes [18, 25]. openfoam™ ofrece 3 alternativas:

- 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 se reduce la dominancia diagonal de dicha matriz, se puede afectar la estabilidad del método iterativo seleccionado para solucionar el sistema. Dado este inconveniente, openfoam™ ofrece un procedimiento de discretización mixto, el cual trata a los términos fuentes de forma implícita si los coeficientes (a_{ij}) satisfacen:

$$a_{ij} > 0 \quad (\text{A.57})$$

Es decir no son negativos, de lo contrario los trata de forma explícita.

A.3.6.1. Tratamiento implícito de los términos fuentes

De acuerdo a lo expresado en la sección anterior y recordando que en la sec. A.3 se definió que el término fuente puede expresarse en la forma:

$$S_\psi(\psi) = S_r\psi + S_q \quad (\text{A.58})$$

Utilizando lo expuesto en (sec. A.3.1), la discretización del término fuente resulta:

$$\int_V (S_r\psi + S_q) dV = S_r V_p \psi_p + S_q V_p \quad (\text{A.59})$$

En la sección donde se abordan los métodos de solución a los sistemas de ecuaciones provenientes de la discretización (sec. A.4), se ampliará un poco más la importancia del tratamiento implícito de los términos fuentes de acuerdo a lo expuesto por Jasak [29].

A.3.7. Evaluación de los gradientes.

Los gradientes resultan ser términos explícitos y pueden ser evaluados empleando diferentes tipos de técnicas. En la sec. A.3.4.3 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™` que permiten dicha estimación.

A.3.7.1. Enfoque gaussiano

El primer método susceptible acorde a lo expuesto hasta el momento, es utilizar el teorema de Gauss para convertir un término que involucre el gradiente de una integral de volumen a una integral de superficie (sec. A.3.2):

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \nabla(\psi) dV &= \int_S \psi d\mathbf{S} \\ &= \sum_f \mathbf{S}_f \psi_f \end{aligned} \quad (\text{A.60})$$

Al utilizar el esquema centrado para interpolar a ψ , el gradiente resulta ser constante sobre la celda, con lo que:

$$\nabla(\psi)_P V_p = \sum_f \mathbf{S}_f \psi_f \quad (\text{A.61})$$

Entonces el gradiente en el centroide de la celda resulta:

$$\nabla(\psi)_p = \frac{1}{V_P} \sum_f \mathbf{S}_f \psi_f \quad (\text{A.62})$$

Para obtener ψ_f se puede utilizar por ejemplo, el esquema central o alguno de los expuestos en la sec. A.3.4.

A.3.7.2. Método de los mínimos cuadrados

Este método se basa en tres ideas fundamentales [33]:

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 $\underline{\mathbf{G}}$:

$$\underline{\mathbf{G}} = \sum w_N^2 \mathbf{d}\mathbf{d} \quad (\text{A.63})$$

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

$$w_N = \frac{1}{|\mathbf{d}|} \quad (\text{A.64})$$

El gradiente en P puede ser evaluado:

$$\nabla(\psi)_P = \sum_N w_N^2 \mathbf{G}^{-1} \cdot \mathbf{d} (\psi_N - \psi_P) \quad (\text{A.65})$$

A.3.7.3. Cómputo del gradiente normal a la cara de la celda (Reconstrucción)

En algunas ocasiones se requiere evaluar el componente normal del gradiente entre dos celdas adyacentes. Dicho componente resulta [19, 29, 33]:

$$\mathbf{S}_f \cdot \nabla(\psi)_f = |\mathbf{S}_f| \frac{\psi_N - \psi_P}{|\mathbf{d}|} \quad (\text{A.66})$$

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 sec. A.3.4 y sec. A.3.5).

A.3.7.4. Limitadores para el gradiente

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)[23]. Una alternativa para contribuir a la acotación y evitar la aparición de dichas oscilaciones espurias en el campo reconstruido de alguna propiedad transportada, 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 o 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 [36]. Considérese un campo reconstruido el cual presenta oscilaciones locales en alguna dirección s (Fig. A.10.a):

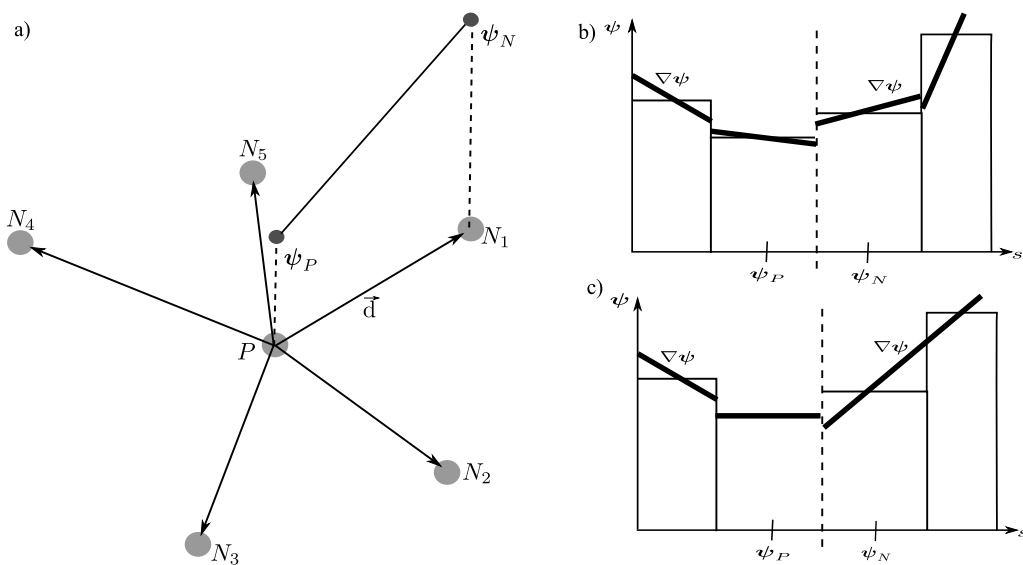


Figura A.10.: Limitación del gradiente: b) reconstrucción sin limitador c) reconstrucción con limitador.

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 Jasperesen [8] 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 Jasperesen consiste en determinar un factor escalar Ψ tal que limite el gradiente utilizado para la reconstrucción:

$$\nabla\psi_N = \Psi_p \nabla\psi_N \quad (\text{A.67})$$

El objetivo es encontrar un valor Ψ con tal magnitud que prevenga la formación de extremos en el campo reconstruido [20]. La evaluación de Ψ propuesta por Barth y Jasperesen

resulta [8, 20, 23]:

$$\Psi_P = \min_N \begin{cases} \min\left(1, \frac{\psi_{\max} - \psi_P}{\Delta_2}\right) & \text{si } \Delta_2 > 0 \\ \min\left(1, \frac{\psi_{\min} - \psi_P}{\Delta_2}\right) & \text{si } \Delta_2 < 0 \\ 1 & \text{si } \Delta_2 = 0 \end{cases} \quad (\text{A.68})$$

donde Δ_2 , ψ_{\min} y ψ_{\max} están dados por:

$$\Delta_2 = \text{sign}\{(\nabla\psi)_P \cdot \mathbf{d}_f\} \{ |(\nabla\psi)_P \cdot \mathbf{d}_f| + \omega_m \} \quad (\text{A.68a})$$

$$\psi_{\max} = \max(\psi_P, \max_N \psi_N) \quad (\text{A.68b})$$

$$\psi_{\min} = \min(\psi_P, \min_N \psi_N) \quad (\text{A.68c})$$

Aquí Δ_2 es el producto entre el gradiente y el vector posición de la cara intercelda con respecto al centroide de la celda propietaria, ω_m resulta ser la precisión de la computadora y se introduce en la Eq. A.68a con la finalidad de evitar que aparezcan valores muy chicos. En la Fig. A.10.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. A.10.c se observa el efecto del limitador⁸. En el caso multidimensional se aplica el factor limitador por separado en la dirección de cada cara involucrada en el cálculo, por el contrario en el caso estándar se aplica el limitador a cada una de las componente del gradiente [31].

A.3.8. Esquemas de integración temporal

Hasta ahora se hablo de como tratar a cada uno de los términos de la ecuación de transporte genérica (Eq. A.2), pero no se ha introducido la forma de realizar la integración en el tiempo. Partiendo de la Eq. A.9:

$$\int_t^{t+\Delta t} \left\{ \frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho \psi d\Omega + \int_{\delta\Omega} (\rho \mathbf{U} \psi) \cdot \mathbf{n} d\delta\Omega - \int_{\delta\Omega} (\rho D \nabla \psi) \cdot \mathbf{n} d\delta\Omega \right\} dt \quad (\text{A.69})$$

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

⁸Cabe notar que el objetivo de este tipo de limitación es similar al que se realiza al utilizar esquemas de interpolación TVD.

Reemplazando en la Eq. A.69 las aproximaciones propuestas en las secciones anteriores para el término convectivo, difusivo, fuente (Eq. A.24, Eq. A.48 y Eq. A.59) y suponiendo que el volumen de control no cambia en el tiempo⁹:

$$\begin{aligned} \int_t^{t+\Delta t} \left\{ \left(\frac{\partial}{\partial t} (\rho\psi) \right)_p V_p + \sum_f \phi_c \psi_f - \sum_f (\rho D)_f \mathbf{S} \cdot (\nabla \psi)_f \right\} dt \\ = \int_t^{t+\Delta t} \{ S_r V_p \psi_p + S_q V_p \} dt \end{aligned} \quad (\text{A.70})$$

Se llega a lo que se conoce como forma **semi-discretizada** de la ecuación de transporte [22, 29]. Existen varias formas de tratar tanto las integrales temporales como la variación temporal de cada uno de los términos en la Eq. A.70. Denotando por $f(t, \psi(\mathbf{x}, t))$ a todos los términos espaciales, la Eq. A.70 se puede escribir en la siguiente forma compacta [30]:

$$V_p \int_t^{t+\Delta t} \left\{ \left(\frac{\partial}{\partial t} (\rho\psi) \right)_p \right\} dt = \int_t^{t+\Delta t} f(t, \psi(\mathbf{x}, t)) dt \quad (\text{A.71})$$

Integrando el miembro derecho de Eq. A.71:

$$V_p (\rho^n \psi^n - \rho^{n-1} \psi^{n-1}) = \int_t^{t+\Delta t} f(t, \psi(\mathbf{x}, t)) dt \quad (\text{A.72})$$

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 Eq. A.72, para lo cual existen diferentes alternativas. En lo que sigue se expondrán tres de las formas habituales dentro de openfoamTM.

■ Método de Euler Explícito

Se aproxima el miembro derecho de la Eq. A.72 en la siguiente forma [30]:

$$\int_t^{t+\Delta t} f(t, \psi(\mathbf{x}, t)) dt = f(t, \psi(\mathbf{x}, t^{n-1})) \Delta t \quad (\text{A.73})$$

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 a 0.5 [14, 22, 28], el número de Courant dentro de

⁹Al suponer que el volumen de control no cambia en el tiempo, utilizando el teorema del transporte de Reynolds se verifica: $\frac{d}{dt} \int_{\Omega} f dV = \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial t} f dV$

openfoam™ está definido¹⁰ [29] :

$$C_o = \frac{\mathbf{U}_f \cdot \mathbf{d}}{\Delta t} \quad (\text{A.74})$$

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

$$\frac{\mathbf{U}_f \cdot \mathbf{d}}{\Delta t} < \frac{1}{2} \quad (\text{A.75})$$

Este esquema de integración temporal resulta ser el más sencillo y al realizar la expansión en serie de Taylor es fácil comprobar que es de primer orden de precisión [28]. 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 varias 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 [1, 22, 23, 28, 39].

■ Método de Euler implícito

Utilizando este método, el miembro derecho de la Eq. A.72 es aproximado en la siguiente forma [30]:

$$\int_t^{t+\Delta t} f(t, \boldsymbol{\psi}(\mathbf{x}, t)) dt = f(t, \boldsymbol{\psi}(\mathbf{x}, t^n)) \Delta t \quad (\text{A.76})$$

Es decir que se evalúan los términos espaciales en $f(t, \boldsymbol{\psi}(\mathbf{x}, t))$ utilizando los valores de $\boldsymbol{\psi}$ correspondientes al paso de tiempo n , los cuales se obtienen de resolver un sistema de ecuaciones [28, 39]. El método resulta incondicionalmente estable en la medida que no se encuentren involucrados términos fuente del tipo *stiff* en la ecuación a tratar, 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 [28].

■ Método de Crank-Nicholson

Este esquema de integración temporal supone una variación lineal en el tiempo para $f(t, \boldsymbol{\psi}(\mathbf{x}, t))$ [28] :

$$\int_t^{t+\Delta t} f(t, \boldsymbol{\psi}(\mathbf{x}, t)) dt = \frac{1}{2} [f(t, \boldsymbol{\psi}(\mathbf{x}, t^{n-1})) + f(t, \boldsymbol{\psi}(\mathbf{x}, t^n))] \Delta t \quad (\text{A.77})$$

Requiere la evaluación de los términos espaciales tanto en el paso de tiempo n como en $n - 1$. Al igual que el esquema de Euler implícito involucra la solución de un sistema algebraico, es de segundo orden de precisión, también resulta incondi-

¹⁰Satisfacer el número de Courant (también conocido como condición CFL) es condición necesaria pero no suficiente para garantizar la convergencia del método.

cionalmente estable, pero no garantiza que se satisfaga la propiedad de acotación [28].

Resulta interesante observar que los esquemas de integración temporal pueden ser escritos en forma compacta:

$$\int_t^{t+\Delta t} f(t, \boldsymbol{\psi}(\mathbf{x}, t)) dt = (1 - C)f(t, \boldsymbol{\psi}(\mathbf{x}, t^{n-1})) \Delta t + Cf(t, \boldsymbol{\psi}(\mathbf{x}, t^n)) \Delta t \quad (\text{A.78})$$

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

A.4. Métodos de solución a 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 (Eq. A.2), el resultado de la discretización puede ser escrito como [19, 28, 29]:

$$a_p \boldsymbol{\psi}_p^n + \sum a_N \boldsymbol{\psi}_N^n = R_p \quad (\text{A.79})$$

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:

$$[\mathbf{A}] \boldsymbol{\psi} = \mathbf{R} \quad (\text{A.80})$$

donde $[\mathbf{A}]$ es una matriz dispersa¹¹ cuya diagonal corresponde a las contribuciones de $\boldsymbol{\psi}_P$ y los coeficientes fuera de la diagonal corresponden a las contribuciones de $\boldsymbol{\psi}_N$. En este caso $\boldsymbol{\psi}$ representa al vector columna de variables dependientes y \mathbf{R} el vector de términos fuente. La matriz $[\mathbf{A}]$ a su vez puede ser descompuesta en dos matrices $[\mathbf{D}]$ y $[\mathbf{N}]$, donde $[\mathbf{D}]$ contiene los coeficientes de la diagonal y $[\mathbf{N}]$ 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 (Eq. A.80) 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.

¹¹Entiéndase por matriz dispersa, una matriz en la cual la mayoría de sus coeficientes son nulos.

Los métodos iterativos parten de una solución inicial la cual se corrige a medida que el proceso iterativo evoluciona, dicho proceso iterativo se detiene una vez se satisface una tolerancia preestablecida [23, 28, 39]. Actualmente en la versión oficial de openfoam™ distribuida por ESI únicamente se 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 hace 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 tanto de la ecuación que se esté considerando como de la malla que se utilice, por ejemplo la ecuación de Poisson para la presión resultante de la aplicación del algoritmo PISO (ver sec. A.5) al ser discretizada incluso en mallas no estructuradas entrega una matriz simétrica, por el contrario las ecuaciones del tipo convección-difusión generan matrices que pueden o no ser simétricas [28]. En la literatura concerniente a métodos iterativos para sistemas lineales dispersos existen diferentes algoritmos para llevar a cabo dicho procedimiento de solución [7], dentro de la versión de openfoam™ utilizada aquí están implementados los siguientes métodos iterativos¹² [32]:

- 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, como es de esperarse hacen uso de un preconditionador con el fin de mejorar la velocidad de convergencia [28]. 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:

¹²Actualmente en la versión de openfoam 1.6.ext se ha implementado una nueva clase para el manejo de las matrices que permite la implementación de *solvers* completamente acoplados, esto dio origen a la implementación 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.

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

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

Una de las características que requieren los algoritmos iterativos es que la matriz sea diagonalmente dominante. La discretización de la parte lineal de los términos fuente (sec. A.3.6) 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 la 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 dentro del vector de términos fuentes para no afectar la dominancia diagonal de la matriz.

Para concluir con lo expuesto en esta sección, resta por decir que la elección del método iterativo de solución apropiado es de suma importancia desde muchos aspectos, puesto que tiene un impacto contundente en el costo computacional debido a que el desempeño del mismo dependerá de las características de la matriz que se esté tratando. Nótese que en la actualidad los métodos iterativos siguen siendo la opción más adecuada cuando se trata con mallas con gran cantidad de celdas [35]. Dado que no es uno de los objetivos de esta tesis el analizar en detalle las características de los distintos métodos de solución implementados dentro de openfoam™, se sugiere consultar las referencias [7, 28, 34] para obtener detalles relacionados con este tópico.

A.5. 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 a la combustión de baja velocidad ($M < 0.3$) donde el acoplamiento presión-velocidad es débil, y los efectos de compresibilidad provienen de los fuertes gradientes de temperatura presentes. Aquí se presenta el algoritmo de solución PISO (*pressure implicit with splitting of operators*) el cual es una técnica no iterativa para resolver el acoplamiento presión-velocidad con las ecuaciones a nivel discreto.

En los capítulos 2 y 3 se introducen las respectivas ecuaciones para los fenómenos considerados en este trabajo, no obstante, para realizar el análisis pertinente a esta sección, se utilizará el sistema de ecuaciones derivado en la sec. A.3 al remplazar $\psi = \begin{bmatrix} 1 & \mathbf{U} & e \end{bmatrix}$

en la ecuación de transporte genérica (Eq. A.2):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U}) = 0 \quad (\text{A.81})$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \mathbf{U}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \mathbf{U}) = \rho \mathbf{g} + \nabla \cdot \underline{\underline{\boldsymbol{\sigma}}} \quad (\text{A.82})$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho e) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} e) = \rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{U} + \nabla \cdot (\underline{\underline{\boldsymbol{\sigma}}} \cdot \mathbf{U}) - \nabla \cdot \mathbf{q} + \rho Q \quad (\text{A.83})$$

Al abordar la solución de este sistema de ecuaciones, tradicionalmente se cuenta con dos enfoques dependiendo las variables primitivas seleccionadas, entendiéndose por variables primitivas a las que se obtienen directamente de resolver las distintas ecuaciones de transporte involucradas. Dependiendo de si una de las variables primitivas es la densidad o la presión, los métodos clásicos se han denominado métodos **basados en presión** y **basados en densidad**. 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 acoplada, este tipo de metodologías son costosas computacionalmente y en ocasiones pueden llegar a ser inviables, cuando el grado de discretización necesario en la malla es muy alto. Por otro lado aparecen los métodos segregados los cuales resuelven las ecuaciones en forma secuencial, componente por componente en el caso vectorial (p.e, ecuación de momento).

En el sistema de ecuaciones Eq. A.81-Eq. A.83, 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 desaparece la ecuación de la energía y la ecuación de estado deja de ser aplicable [35, 39]. En el caso compresible se puede utilizar la ecuación de estado para obtener la presión, o 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 [5], el SIMPLER (SIMPLE *revised*) [18], el SIMPLEC (SIMPLE *consistent*) [6] y el método PISO [38] 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 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 a la de la energía, puesto que estas ecuaciones permiten acoplar entre si a la densidad, presión y temperatura [35, 38, 39].

Retomando las ecuaciones de Navier-Stokes (Eq. A.81-Eq. A.83), 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:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U}) = 0 \quad (\text{A.84})$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \mathbf{U}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \mathbf{U}) - \nabla \cdot (\mu (\nabla \mathbf{U} + (\nabla \mathbf{U})^T)) = -\nabla \left(p + \frac{2}{3} \mu \nabla \cdot \mathbf{U} \right) \quad (\text{A.85})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho e) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} e) - \nabla \cdot (\lambda \nabla T) = & -\nabla \cdot (p \mathbf{U}) - \nabla \cdot \left(\frac{2}{3} \mu (\nabla \cdot \mathbf{U}) \mathbf{U} \right) \\ & + \nabla \cdot (\mu (\nabla \mathbf{U} + (\nabla \mathbf{U})^T) \cdot \mathbf{U}) + \rho \mathbf{Q} \end{aligned} \quad (\text{A.86})$$

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

$$p = \rho RT = \rho \psi^{-1} \quad (\text{A.87})$$

donde ψ es la compresibilidad del gas, dada por:

$$\psi = \frac{1}{RT} \quad (\text{A.88})$$

La ecuación de momento en forma semi-discreta resulta:

$$a_p \mathbf{U}_p^n = \mathbf{H}(\mathbf{U}) - \nabla p \quad (\text{A.89})$$

De donde:

$$\mathbf{U}_p^n = (a_p)^{-1} (\mathbf{H}(\mathbf{U}) - \nabla p) \quad (\text{A.90})$$

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:

$$\mathbf{H}(\mathbf{U}) = \mathbf{R}_p - \sum a_N \psi_N^n \quad (\text{A.91})$$

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

$$\mathbf{R}_p = \mathbf{R}_o + \frac{\mathbf{U}^{n-1}}{\Delta t} \quad (\text{A.92})$$

Atendiendo a que la ecuación de estado puede ser escrita:

$$\rho = p\psi \quad (\text{A.93})$$

la variación temporal de la densidad se puede escribir como:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t}(p\psi) \quad (\text{A.94})$$

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

$$\nabla \cdot (\rho \mathbf{U}) = \nabla \cdot (\rho (a_p)^{-1} \mathbf{H}(\mathbf{U})) - \nabla \cdot (\rho (a_p)^{-1} \nabla p) \quad (\text{A.95})$$

Ahora escribiendo al primer término del segundo miembro en la Eq. A.95 en forma de un término convectivo (de acuerdo a lo expuesto en sec. A.3.3)

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (\rho (a_p)^{-1} \mathbf{H}(\mathbf{U})) &= \nabla \cdot (\psi p (a_p)^{-1} \mathbf{H}(\mathbf{U})) \\ &= \nabla \cdot (F_p p) \end{aligned} \quad (\text{A.96})$$

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:

$$F_p = \psi (a_p)^{-1} \mathbf{H}(\mathbf{U}) \quad (\text{A.97})$$

Utilizando desde la Eq. A.94 a la Eq. A.97 en la ecuación de continuidad (Eq. A.84) se logra obtener una ecuación independiente para la presión:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\psi p) + \nabla \cdot (F_p p) - \nabla \cdot (\rho (a_p)^{-1} \nabla p) = 0 \quad (\text{A.98})$$

Nótese que utilizando el esquema centrado, es decir asumiendo una variación lineal los coeficientes a_p y a_N están dados por: (Eq. A.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 Eq. A.98 posee el formato de la ecuación genérica (Eq. A.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 Eq. A.98 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 [29].

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 [35, 38, 39].

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 **predictor del momento**.
3. Se calcula la nueva presión p^{**} por medio de la Eq. A.98 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:

$$\left(\frac{1}{\Delta t} - \frac{B_0}{\rho^*} \right) \rho^* e^* = G'(e^*) - \Delta(p^* \mathbf{U}^{**}) + J(\mathbf{U}^*) + Q + \frac{\rho^n e^n}{\Delta t} \quad (\text{A.99})$$

Aquí $G'(e) = \{[\mathbf{B}] - \text{tr}[\mathbf{B}]\mathbf{e}\}$ 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 Δ al operador divergencia discreto. En este paso se obtiene e^* y en consecuencia T^* puede ser evaluada desde e^* y 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 [38]. 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 [38].

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 [38]. 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 Capítulo 3 [38, 39].

A.5.1. El problema del tablero de ajedrez

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. A.11, aplicando el esquema centrado, el gradiente de presión en P resulta:

$$(\nabla p)_P = \frac{p_E - p_W}{2\Delta x} \quad (\text{A.100})$$

Centrando la atención en la ecuación para la presión derivada en la sección anterior (Eq. A.98), 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.

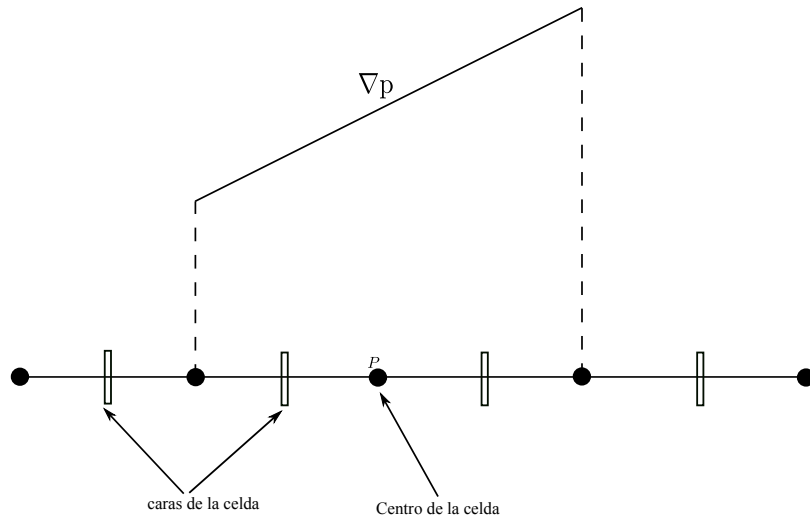


Figura A.11.: Gradiente de presión unidimensional.

Para solucionar este problema existen distintas posibilidades, una de ellas es utilizar mallas escalonadas, en las cuales se almacena la velocidad y la presión en distintos puntos [37]; otro enfoque es utilizar procedimientos especiales de interpolación. Dentro de openfoamTM se utiliza el último enfoque materializado en la interpolación propuesta por Rhie y Chow, con el cual la interpolación resulta [2, 28, 35]:

$$\mathbf{U}_f = f_x \mathbf{U}_P + (1 - f_x) \mathbf{U}_N + (a_p)_f^{-1} \mathbf{n} \left[\mathbf{n} \cdot (\nabla p)_f^{CE} - \frac{p_N - p_P}{|\mathbf{d}|} \right] \quad (\text{A.101})$$

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 Eq. A.101 se puede ver que aparecen dos formas distintas de evaluar el gradiente, primero una en la que se utiliza el esquema centrado para interpolar :

$$(\nabla p)_f^{CE} = f_x (\nabla p)_p + (1 - f_x) (\nabla p)_N \quad (\text{A.102})$$

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

$$\mathbf{n} \cdot (\nabla p)_f = \frac{p_N - p_P}{|\mathbf{d}|} \quad (\text{A.103})$$

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 [35].

A.6. 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 limites, es decir que 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**; éstas pueden considerarse de carácter puramente matemático. 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:

$$\psi|_{\delta\Omega} = \psi(\mathbf{x}) \quad \forall \mathbf{x} \in \delta\Omega \quad (\text{A.104})$$

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

$$\nabla\psi \cdot \mathbf{n}|_{\delta\Omega} = \psi(\mathbf{x}) \quad \forall \mathbf{x} \in \delta\Omega \quad (\text{A.105})$$

Este tipo 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, los flujos convectivos requieren el valor de la variable ψ , respectivamente 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 ψ , 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[30]:

$$(\mathbf{S} \cdot \nabla\psi)_{\delta\Omega} = \frac{|\mathbf{S}_f|}{|\mathbf{d}_n|} (\psi - \psi_p - \mathbf{k} \cdot (\nabla\psi)_p) \quad (\text{A.106})$$

Aquí \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. A.12).

Para las condiciones de borde del tipo Neumann, se conoce el valor del gradiente $\nabla\psi$, y para evaluar ψ se puede utilizar la siguiente extrapolación [29]:

$$\psi_{\delta\Omega} = \psi_p + |\mathbf{d}_n| \left(\frac{\mathbf{S}_f}{|\mathbf{S}_f|} \nabla\psi \right)_{\delta\Omega} + \mathbf{m} \cdot (\nabla\psi)_{\delta\Omega} \quad (\text{A.107})$$

Donde \mathbf{m} es el vector que mide la oblicuidad de la celda (ver Fig. A.12). El método descrito

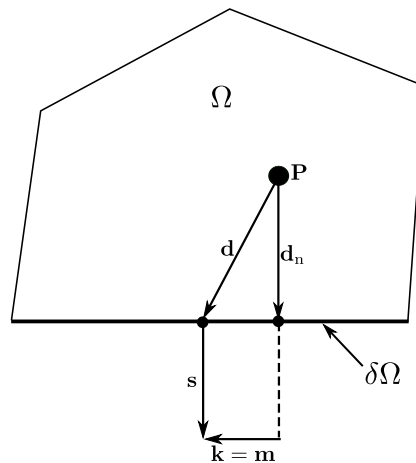


Figura A.12.: Celda en el contorno.

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 ψ se utiliza su expansión en serie de Taylor la precisión del método resulta ser de segundo orden [30].

Es de suma importancia el 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 [29].

Dentro de openfoamTM se incluye una amplia gama de condiciones de borde, cada una de ellas diseñada para tratar distintos tipos de problemas. Esto brinda una gran versatilidad al momento de seleccionar la adecuada para el caso que se desea abordar, también cabe mencionar que de no contarse con la condición adecuada, la misma puede implementarse. En esta sección se pretende dar una breve descripción de las condiciones de borde que para los fines de este trabajo fueron consideradas relevantes [3, 22, 35–37, 40]:

■ **Entradas (*inlets*)**

- Caso compresible a baja velocidad: 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*)**

- Caso Compresible a baja velocidad

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 distintas [29]:

- 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 (sec. A.5, Eq. A.98).
- flujos a alta velocidad: 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 que se considere, si se considera flujo **inviscido** la condición de pared se reduce a la condición 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 sobre el contorno 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 comportamiento periódico con respecto a una o a múltiples coordenadas, en estos casos es suficiente con modelar una porción del flujo la cual se ha determinado 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 romo 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 en 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 [3, 4]. 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 [31].

- **Condición vacía (*empty*)**

Esta condición de borde propia de openfoamTM, 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 [29].

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 viajañan 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 [23].

A.7. Discretización las ecuaciones en openfoamTM

De acuerdo a la expuesto en las secciones anteriores, openfoamTM implementa un método de alto nivel para tratar la discretización de las ecuaciones. En esta sección 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.

A.7.1. Escritura de las ecuaciones

Una de las características más atractivas de openfoamTM 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 secciones anteriores. Resulta conveniente utilizar

la ecuación de la conservación de momento para el caso viscoso e incompresible con la finalidad de introducir este concepto.

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{U}\mathbf{U}) - \nabla \cdot (\nu \nabla \mathbf{U}) = \nabla \cdot \mathbf{p}_\rho \quad (\text{A.108})$$

En la Eq. A.108, p_ρ es la presión normalizada por la densidad y ν es el coeficiente de viscosidad cinemática. En `openfoam`TM esta ecuación se puede escribir en la forma mostrada en el Código A.1.

```
fvVectorMatrix UEqn
(
    fvm::ddt(U)
  + fvm::div(phi, U)
  - fvm::laplacian(nu, U)
);
solve(UEqn == -fvc::grad(p));
```

Código A.1: Ecuación de momento para un fluido viscoso e incompresible escrita dentro de `openfoam`TM

Aquí resulta interesante detenerse un momento y analizar la clara correspondencia entre la ecuación de gobierno y su implementación :

- $\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} \rightarrow \text{ddt}(\mathbf{U})$
- $\nabla \cdot (\mathbf{U}\mathbf{U}) \rightarrow \text{div}(\text{phi}, \mathbf{U})$ ¹³
- $\nabla \cdot (\nu \nabla \mathbf{U}) \rightarrow \text{laplacian}(\text{nu}, \mathbf{U})$
- $\nabla \cdot \mathbf{p}_\rho \rightarrow \text{grad}(\text{p})$

Como se observa, `openfoam`TM implementa en forma muy conveniente los operadores primera derivada temporal, divergencia, laplaciano¹⁴ y gradiente a nivel discreto¹⁵. 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

¹³Aquí `phi` representa al flujo convectivo (ver sec. A.3.3).

¹⁴Es importante hacer notar que la implementación del laplaciano corresponde a $\nabla \cdot (\nu \nabla \mathbf{U})$, lo que en el caso de ν constante se reduce efectivamente al laplaciano propiamente dicho ($\nu \nabla^2 \mathbf{U}$), sin embargo la implementación de este operador dentro de `openfoam`TM no está restringida al caso ν constante. Esto quiere decir que puede ser utilizado incluso en los casos donde este coeficiente no resulta constante.

¹⁵Aquí se mencionan sólo algunos de los operadores disponibles, para más detalles ver [33]

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 (ver sec. A.4). 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.

A.7.2. Selección de los esquemas de discretización

La forma en que se seleccionan los esquemas de discretización se introduce tomando de nuevo como referencia la Eq. A.108. De acuerdo a su versión discreta y atendiendo a lo expuesto en la sec. A.7.1, el término temporal, convectivo y difusivo se discretizan de forma implícita y el 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 A.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 A.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 *sec. A.3.7.4*.

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 $\nabla \cdot (\mathbf{U}\mathbf{U})$, 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.

A.7.3. Selección de los métodos de solución y configuración del algoritmo PISO

Tal como se describió en (*sec. A.4*), `openfoam`TM 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 (Eq. A.108), 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 ($\nabla \cdot \mathbf{U} = 0$).

$$\nabla^2 \cdot \left((a_p)^{-1} p \right) = \nabla \cdot \left((a_p)^{-1} \mathbf{H}(\mathbf{U}) \right) \quad (\text{A.109})$$

Nótese que $(a_p)^{-1} \mathbf{H}(\mathbf{U})$ es el flujo convectivo. Como se puede ver en Eq. A.109 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 A.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 A.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 sec. A.4, además se establece la tolerancia para el proceso iterativo¹⁶. También se puede observar que se seleccionaron dos pasos de corrección para el algoritmo PISO y ningún corrector de ortogonalidad.

¹⁶La tolerancia impuesta estipula que al alcanzarse residuos de dicho orden el proceso iterativo de solución se dara por concluido.

A.8. 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. A.3 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 A.3.: 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.

Referencias Apéndice A

- [1] **E. Toro**, Riemann solvers and numerical methods for fluid dynamics: a practical introduction, Springer, 2009.
- [2] **W. Chow** and **C. Rhie**, *Numerical study of the turbulent flow past an airfoil with trailing edge separation*, *AIAA journal*, vol. 21(11), 1983.
- [3] **T. Poinso** and **S. Lelef**, *Boundary conditions for direct simulations of compressible viscous flows*, *Journal of computational physics*, vol. 101(1):pp. 104–129, 1992.
- [4] **H. Kreiss**, *Initial boundary value problems for hyperbolic systems*, *Communications on Pure and Applied Mathematics*, vol. 23(3):pp. 277–298, 1970.
- [5] **S. Patankar** and **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.
- [6] **J. Van Doormaal** and **G. Raithby**, *Enhancements of the simple method for predicting incompressible fluid flows*, *Numerical heat transfer*, vol. 7(2):pp. 147–163, 1984.
- [7] **Y. Saad** and **Y. Saad**, *Iterative methods for sparse linear systems*, vol. 20, PWS publishing company Boston, 1996.
- [8] **T. Barth** and **D. Jespersen**, *The design and application of upwind schemes on unstructured meshes*, in 27th aerospace sciences meeting, vol. 89, 1989.
- [9] **W. Oberkampf**, **M. Sindir** and **A. Conlisk**, *Guide for the verification and validation of computational fluid dynamics simulations*, *Am. Institute of Aeronautics and Astronautics*, 1998.
- [10] **J. Strikwerda**, *Finite difference schemes and partial differential equations*, Society for Industrial Mathematics, 2004.
- [11] **A. Harten**, *High resolution schemes for hyperbolic conservation laws*, *Journal of computational physics*, vol. 49(3):pp. 357–393, 1983.
- [12] **P. Sweby**, *High resolution schemes using flux limiters for hyperbolic conservation laws*, *SIAM journal on numerical analysis*, pp. 995–1011, 1984.
- [13] **P. Roe**, *Characteristic-based schemes for the euler equations*, *Annual review of fluid mechanics*, vol. 18(1):pp. 337–365, 1986.
- [14] **P. Wesseling**, *Principles of computational fluid dynamics*, vol. 29, Springer Verlag, 2010.
- [15] **M. Darwish** and **F. Moukalled**, *Normalized variable and space formulation methodology for high-resolution schemes*, *Numerical Heat Transfer*, vol. 26(1):pp. 79–96, 1994.

- [16] **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.
- [17] **G. Van Albada**, **B. Van Leer** and **W. Roberts Jr**, *A comparative study of computational methods in cosmic gas dynamics*, *Astronomy and Astrophysics*, vol. 108:pp. 76–84, 1982.
- [18] **S. Patankar**, *Numerical heat transfer and fluid flow*, Hemisphere Pub, 1980.
- [19] **H. Rusche**, *Computational fluid dynamics of dispersed two-phase flows at high phase fractions*, *Direct*, (December), 2002.
- [20] **K. Michalak** and **C. Gooch**, *Differentiability of slope limiters on unstructured grids*, in *Proceedings of Fourteenth Annual Conference of the Computational Fluid Dynamics Society of Canada*, 2006.
- [21] **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.
- [22] **C. Hirsch**, *Numerical computation of internal and external flows*, vol. 1, Elsevier Ltd, 2007.
- [23] **J. Blazek**, *Computational fluid dynamics: principles and applications*, vol. 2, Elsevier Science, 2005.
- [24] **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.
- [25] **E. Oran** and **J. Boris**, *Numerical simulation of reactive flow*, Cambridge University Press, 2nd ed., 2001.
- [26] **R. Pletcher**, **D. A. Anderson** and **J. C. Tannehill**, *Computational fluid mechanics and heat transfer*, Series in Computational and Physical Processes in Mechanics and Thermal Sciences, Taylor & Francis, 2nd ed., 1997.
- [27] **F. P. Kärrholm**, *Numerical modelling of diesel spray injection, turbulence interaction and combustion*, Ph.D. thesis, Chalmers University of Technology, 2008.
- [28] **J. Ferziger** and **M. Perić**, *Computational methods for fluid dynamics*, Springer Berlin etc, 3rd ed., 2002.
- [29] **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.
- [30] **F. Juretic**, *Error analysis in finite Volume CFD*, Ph.D. thesis, Imperial College of Science, Technology and Medicine, 2004.

- [31] **OpenFOAM**, 2010, URL www.openfoam.com, source Code.
- [32] openFoam UserGuide, OpenCFD Ltd, 2010.
- [33] openFoam Programmer's Guide, OpenCFD Ltd, 2010.
- [34] **T. Behrens**, *Openfoam's basic solvers for linear systems of equations*, Tech. rep., Technical University of Denmark, 2009.
- [35] **H. Jasak**, *Numerical solution algorithms for compressible flows*, Lecture Notes.
- [36] **H. Jasak**, *Finite volume discretisation with polyhedral cell support*, 2009.
- [37] **H. Versteeg** and **W. Malalasekera**, An introduction to computational fluid dynamics: the finite volume method, 2nd ed.
- [38] **R. Issa**, *Solution of the implicitly discretised fluid flow equations by operator-splitting*, *Journal of Computational Physics*, vol. 62(1):pp. 40 – 65, 1986.
- [39] **T. J. Chung**, Computational fluid dynamics, Cambridge University Press, 2nd ed., 2010.
- [40] **T. Poinso** and **D. Veynante**, Theoretical and numerical combustion, R. T. Edwards, Inc., 2nd ed., 2005.
- [41] **H. Weller**, **G. Tabor**, **H. Jasak** and **C. Fureby**, *A tensorial approach to computational continuum mechanics using object orientated techniques*, *Comp. in Phys.*, vol. 12(6):pp. 620–630, 1998.

