

Universidad Nacional de Córdoba
Facultad de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales
Carrera de Doctorado en Ciencias de la Ingeniería



**DISEÑO Y DESARROLLO DE UN CÓDIGO DE
ALTO RENDIMIENTO PARA LA SIMULACIÓN
NUMÉRICA DE FLUJOS HIPERSÓNICOS
REACTIVOS**

Tesis Doctoral
por

Juan Pablo Saldía

Mayo de 2015

**DISEÑO Y DESARROLLO DE UN CÓDIGO DE
ALTO RENDIMIENTO PARA LA SIMULACIÓN
NUMÉRICA DE FLUJOS HIPERSÓNICOS
REACTIVOS**

Juan Pablo Saldía

Autor

Dr. Sergio Elaskar

Director

Comisión Asesora de Tesis:

Dra. Walkiria Schulz

Dr. José Tamagno

Tribunal Especial de Tesis:

Dr. Axel Larreteguy

Dr. Carlos Sacco

Dr. Mario Storti

Tesis presentada como requisito parcial para optar al grado de

Doctor en Ciencias de la Ingeniería

Facultad de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales

Universidad Nacional de Córdoba

Mayo de 2015



UNIVERSIDAD NACIONAL DE CORDOBA

Facultad de Cs. Exactas, Físicas y Naturales

ACTA DE EXAMENES

Libro: 00001

Acta: 03050

Hoja 01/01

LLAMADO: 1

29/05/2015

CATEDRA - MESA:

DI002 TESIS DOCTORADO EN CIENCIAS DE LA INGENIERIA

NUMERO	APELLIDO Y NOMBRE	DOCUMENTO	INGRESO	COND.	NOTA	FIRMA
30503369	SALDÍA, Juan Pablo	DNI: 30503369	2009	T	ARCBATO	

LARRETEGUY, Axel - STORTI, Mario - SACCO, Carlos - OREJAS, Joaquín Anibal - PREIDIKMAN, Sergio -

Observaciones:

MARIO STORTI

Córdoba, 29/5/15.

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

1	—	1	—	1
Inscriptos	Ausentes	Examinados	Reprobados	Aprobados
29/05/2015	09:34:51		(0-3)	(4-10)

Libro/Acta: 0000103050

Hoja: 01/01

Esta página ha sido intencionalmente dejada en blanco.

A mi padre, por el ejemplo.

Esta página ha sido intencionalmente dejada en blanco.

Agradecimientos

En primer lugar quiero expresar un especial agradecimiento a mi director, el Dr. Sergio Elaskar, por el fuerte apoyo y la confianza depositadas en mí, que fueron determinantes para la conclusión de esta tesis. Tanto él como el Dr. José Tamagno, con su ética, predisposición y humildad, representan una guía de trabajo de incommensurable valor.

A la Dra. Walkiria Schulz por haberme dado la oportunidad de colaborar en proyectos de investigación del Departamento desde la época de mi tesis de grado.

Al Dr. Mario Lino da Silva del Instituto Superior Técnico de Lisboa, Portugal, por haberme permitido realizar una estancia en una institución de investigación de primer nivel, la cual contribuyó sustancialmente al fortalecimiento de mi formación.

A mis compañeros de doctorado del Departamento de Aeronáutica, Dino Antonelli, Andrés Cimino, Felipe Marcantoni, Gustavo Krause, Luis Soria y el más reciente Emmanuel Gómez por haber sido parte de un ambiente de trabajo donde por sobre todas las cosas prima el compañerismo, y donde siempre se está dispuesto a brindar tiempo y ayuda desinteresada cuando es necesario.

Al CONICET por el apoyo financiero otorgado, que permitió la dedicación exclusiva a la concreción de esta tesis.

A mi familia que estuvieron desde mi provincia, Río Negro, apoyando en todo momento. En especial a mi papá quién me transmitió mediante el ejemplo la importancia del trabajo hecho con dedicación y amor.

A mi familia de aquí de Córdoba, mi pareja Luciana (y cuatro gat@s loc@s), que han sido una parte importante de mi vida en estos años y a quienes les quité más tiempo juntos del que hubiera deseado.

Finalmente, quiero terminar esta sección agradeciendo a todas aquellas personas que día a día contribuyen silenciosamente con su trabajo a la construcción de una universidad pública, gratuita y de excelencia, sin la cuál, hoy no estaría escribiendo estas líneas.

Esta página ha sido intencionalmente dejada en blanco.

Resumen

En esta tesis se presenta un nuevo código basado en el método de volúmenes finitos en mallas no estructuradas y orientado a la solución numérica de las ecuaciones de Navier-Stokes compresibles aplicadas a la simulación de flujos hipersónicos. La formulación empleada permite el tratamiento de flujos bidimensionales, axisimétricos y tridimensionales, así como la incorporación de efectos de no equilibrio químico y termodinámico. Métodos tipo *upwind* de la familia AUSM son empleados para proveer tanto la captura robusta y precisa de ondas de choque como resolución en la capa límite y transferencia de calor. Una discretización espacial de segundo orden es obtenida mediante el empleo de reconstrucción lineal de las variables y de funciones limitadoras para asegurar propiedades de monotonicidad. El modelado de las propiedades de transporte, viscosidad, conductividad y difusión molecular en el caso de mezcla de gases en no equilibrio termoquímico es brevemente discutido. Modelos cinéticos del aire de 5 especies (N,O,N₂,O₂,NO) y 7 especies (N,O,N₂,O₂,NO⁺,e⁻) son incorporados para incluir efectos de no equilibrio químico y gas parcialmente ionizado. Efectos de no equilibrio termodinámico son modelados empleando un modelo de dos temperaturas. Un método implícito totalmente acoplado es utilizado para la integración temporal del sistema mediante la derivación de un jacobiano analítico aproximado. El sistema lineal resultante es resuelto mediante métodos iterativos de tipo GMRES empleando librerías externas. Un nuevo sistema flexible y extensible orientado a objetos, que permite la administración de la topología de la malla y de los campos asociados a esta en paralelo, es diseñado e implementado con el fin de brindar al código funcionalidades en sistemas distribuidos. Con el objetivo de validación del código desarrollado se presentan resultados del flujo hipersónico laminar en no equilibrio termoquímico sobre cuerpos los cuales son comparados con resultados de tipo experimental y numérico obtenido por otros autores. Finalmente, se presentan pruebas de escalabilidad a fin de evaluar el rendimiento del código en sistemas de cómputo distribuido.

Palabras clave: flujo hipersónico, volúmenes finitos, Navier-Stokes, no equilibrio termoquímico, Fortran, programación orientada a objetos.

Esta página ha sido intencionalmente dejada en blanco.

Abstract

In this thesis, a new high-performance unstructured finite volume based code oriented to the numerical solution of the compressible Navier-Stokes equations in the hypersonic regime is presented. The solver is capable of dealing with bidimensional, axisymmetric and tridimensional flows, and includes both chemical and thermal non-equilibrium effects. Upwind flux vector splitting methods of the AUSM-family are employed to provide both robust shock-capturing and accurate boundary layer and heat transfer resolution capabilities. Second-order accuracy is achieved through linear reconstruction of the solution and limiter functions to assure monotonicity properties. Multi-component transport modeling of viscosity, conductivity and molecular diffusion are briefly discussed. Both a 5-species (N,O,N₂,O₂,NO) and a 7-species (N,O,N₂,O₂,NO⁺,e⁻) air kinetic models are implemented to take into account non equilibrium and partially ionized gas effects. Thermal non-equilibrium effects are modeled through a two temperature model. A fully-coupled implicit method is employed to advance the solution in time, through the derivation of an analytic approximated jacobian. The linear system in each time step is solved through GMRES iterative methods, employing external libraries. A new object-oriented software framework that supports both mesh topology and mesh-data management in parallel is designed and implemented with the aim of providing operating capabilities on distributed systems. Benchmark cases of the steady-state thermo-chemical non-equilibrium air flow over blunt bodies are presented in order to test and validate the developed code. Finally, scaling tests oriented to study the performance of the solver on distributed systems are presented and discussed.

Keywords: hypersonic flow, finite volume, Navier-Stokes, thermochemical nonequilibrium, Fortran, object oriented programming.

Esta página ha sido intencionalmente dejada en blanco.

Resumo

Nesta tese, se apresenta um novo código baseado no método dos volumes finitos em malhas não estruturadas para a solução numérica das equações de Navier-Stokes compressível aplicada à escoamentos hipersônicos. A formulação utilizada permite tratar escoamentos bidimensionales, axisimétricos e tridimensionales e incorpora os efeitos de não-equilíbrio químico e não-equilíbrio termodinâmico. Métodos tipo *upwind* da família AUSM são usados para fornecer tanto a captura robusta e precisa de ondas de choque e resolução na camada limite e da transferência de calor. Precisão de segunda ordem é obtida a través de reconstrução linear da solução e funções limitadoras para assegurar propriedades de monotonicidade. O modelagem de propriedades de transporte, viscosidade, condutividade e difusão molecular é discutido brevemente. Um método implícito totalmente acoplado é utilizado para a integração temporal do sistema mediante a derivação de um jacobiano analítico aproximado. O sistema linear resultante é resolvido por métodos iterativos tipo GMRES usando bibliotecas externas. Modelos cinéticos do ar de 5 espécies (N, O, N₂, O₂, NO) e 7 espécies (n, O, N₂, O₂, NO⁺, e⁻) são incorporados para modelar os efeitos de não-equilíbrio químico e gás parcialmente ionizado. Efeitos de não-equilíbrio termodinâmico são modelados usando um modelo de duas temperaturas. Um novo sistema orientado a objetos flexível e extensível que permite a administração da topologia da malha e dos campos associados a esta em paralelo é projetado e implementado com o fim de brindar ao código funcionalidades em sistemas distribuídos. Com o objetivo de validação do código desenvolvido são apresentados resultados do fluxo laminar hipersônico em não equilíbrio termoquímico sobre corpos rombudos, os quais são comparados com resultados experimentais e numéricos obtidos por outros autores. Finalmente, testes de escalabilidade são apresentados, a fim de avaliar o desempenho do código em sistemas de computação distribuída.

Palabras-chave: escoamento hipersonico, volumes finitos, Navier-Stokes, não-equilíbrio químico e termodinâmico, Fortran, programação orientada a objetos.

Esta página ha sido intencionalmente dejada en blanco.

ÍNDICE GENERAL

LISTA DE FIGURAS	xx
LISTA DE TABLAS	xxii
LISTA DE SIMBOLOS	xxiv
1. INTRODUCCIÓN	1
1.1. Modelización física de flujos hipersónicos	2
1.2. Técnicas numéricas	4
1.3. Códigos CFD para la simulación de flujos hipersónicos	5
1.4. Objetivos del presente trabajo	7
1.5. Organización de la tesis	8
2. MODELIZACIÓN FÍSICA	9
2.1. Introducción	9
2.2. Ecuaciones de conservación	10
2.2.1. Conservación de la masa	10
2.2.2. Conservación de la cantidad de movimiento	11
2.2.3. Conservación de la energía total	13
2.2.4. Conservación de la energía vibracional-electrónica	13
2.2.5. Forma vectorial de las ecuaciones de conservación	14
2.2.6. Formulación con simetría axial	15
2.3. Propiedades termodinámicas	16
2.3.1. Ecuación de estado	16
2.3.2. Energía interna de la mezcla	17
2.3.3. Energía traslacional y rotacional	17

2.3.4.	Energía vibracional y electrónica	17
2.3.5.	Entalpías específicas	19
2.4.	Propiedades de transporte	19
2.4.1.	Modelo de viscosidad y conductividad térmica de Gupta	20
2.4.2.	Difusión de masa	22
2.5.	Modelos de relajación	24
2.5.1.	Intercambio de energía vibracional-traslacional	24
2.5.2.	Intercambio de energía electrónica-traslacional	25
2.5.3.	Cambio de la energía vibracional-electrónica por reacciones químicas	26
2.6.	Modelo de cinética química	26
2.6.1.	Coefficientes de velocidad de reacción	27
2.6.2.	Acoplamiento cinético-termodinámico	28
2.6.3.	Modelo cinético del aire	29
3.	DISCRETIZACIÓN NUMÉRICA	31
3.1.	Introducción	31
3.2.	Discretización en volúmenes finitos	31
3.2.1.	Definición de los volúmenes de control	33
3.3.	Discretización de los flujos convectivos	34
3.3.1.	Esquema SLAU	35
3.4.	Extensión a segundo orden	37
3.4.1.	Evaluación de gradientes en las celdas	38
3.4.1.1.	Método de Green-Gauss	38
3.4.1.2.	Metodo de Mínimos Cuadrados	39
3.4.2.	Funciones limitadoras	40
3.4.2.1.	Función limitadora de Barth y Jepersen	40
3.4.2.2.	Función limitadora de Venkatakrishnan	41
3.5.	Discretización de los flujos difusivos	42
3.6.	Integración temporal	44
3.6.1.	Evaluación del jacobiano	45
3.6.2.	Solución del sistema lineal	46
3.6.3.	Evaluación del paso de tiempo	47
3.7.	Condiciones de borde	48
3.7.1.	Entrada supersónica	48
3.7.2.	Salida supersónica	48

3.7.3.	Contorno sólido	49
3.7.3.1.	Flujo invíscido	49
3.7.3.2.	Flujos viscosos. Condición de no deslizamiento	49
3.7.4.	Línea de simetría	51
4.	IMPLEMENTACIÓN COMPUTACIONAL	53
4.1.	Introducción	53
4.2.	Lenguaje de implementación	55
4.3.	Modelos y librerías de computación en paralelo	56
4.4.	Análisis del dominio de topología de mallas	57
4.4.1.	Definiciones previas	57
4.4.2.	Mallas distribuidas	59
4.5.	Representación computacional de la topología de malla	63
4.6.	Requerimientos de la representación	64
4.7.	Sistema orientado a objetos para la representación de mallas distribuidas	65
4.7.1.	Modelo de malla	65
4.7.2.	Modelo de entidades de malla	66
4.7.3.	Contenedor de entidades de malla.	68
4.7.4.	Iteración sobre las entidades	69
4.7.5.	Obtención de adyacencias	69
4.7.6.	Propiedades geométricas	70
4.8.	Representación del modelo de malla distribuida	71
4.8.1.	Partición de la malla	71
4.8.2.	Migración de entidades	72
4.8.3.	Obtención de celdas fantasmas	72
4.9.	Preprocesamiento y Postprocesamiento	72
4.10.	Funciones de malla	73
4.10.1.	Modelo de dominio de función de malla	75
4.11.	Aplicación del sistema al esquema de volúmenes finitos	79
5.	RESULTADOS	81
5.1.	Introducción	81
5.2.	Test RAM-C II	82
5.2.1.	Descripción del test	82
5.2.2.	Resultados obtenidos	83
5.3.	Test HYPULSE	91

5.3.1. Descripción del test	91
5.3.2. Resultados obtenidos	91
5.4. Test Cilindro 3D HEG	97
5.5. Mediciones de escalabilidad	108
6. CONCLUSIONES	113
6.1. Contribuciones originales de esta tesis	115
6.2. Trabajo futuro	116
A. PARÁMETROS FÍSICOS	119
A.1. Datos de las especies	119
A.2. Datos de la energía electrónica	119
A.3. Datos de propiedades de transporte	120
A.3.1. Integrales de colisión	120
A.4. Datos del modelo cinético	123
A.4.1. Modelo cinético de Park	123
A.4.2. Modelo cinético de Gupta	126
B. MATRICES JACOBIANAS	129
B.1. Jacobiano de los términos convectivos	129
B.2. Jacobiano de los flujos difusivos	131
B.3. Jacobiano de los términos fuentes	134
B.3.1. Jacobiano de los términos de cinética química	134
B.3.2. Jacobianos de los términos de simetría axial	135
B.4. Jacobiano de la relajación de la energía vibracional	136
BIBLIOGRAFÍA	139

*

LISTA DE FIGURAS

4.1. Arquitectura en capas general de la implementación.	54
4.2. Complejos politopales	58
4.3. Ejemplos de sencil	62
4.4. Partición de mallas distribuidas: celdas fantasma	62
4.5. Diagrama UML de la clase <code>Mesh</code>	66
4.6. Diagrama UML de la clase <code>MeshEntityData</code>	67
4.7. Diagrama UML de la clase <code>MeshEntityIterator</code>	69
4.8. Código ejemplo de uso del iterador de entidades.	70
4.9. Código ejemplo de uso del iterador de entidades en una malla estática. . .	70
4.10. Diagrama UML de la clase <code>PMesh</code>	71
4.11. Diagrama UML de la clase <code>MeshFunctionDomain</code>	76
4.12. Diagrama UML de la clase <code>MeshFunction</code>	77
4.13. Diagrama de clases	77
4.14. Código ejemplo de creación de funciones de malla.	78
4.15. Diagrama de flujo general del esquema de volúmenes finitos implementado.	80
5.1. Geometría de la configuración del experimento RAM.	84
5.2. Malla utilizada en el test de la sonda RAM-C II	85
5.3. Densidad electrónica máxima. Test RAM C-II	85
5.4. Líneas de contorno de la densidad numérica electrónica. Test RAM-C II . .	86
5.5. Distribución de temperaturas en la línea de estancamiento. Test RAM-C II	87
5.6. Sensibilidad a la malla de la temperatura sobre la línea de estancamiento .	88
5.7. Fracciones de masa sobre la línea de estancamiento. Test RAM-C II	89
5.8. Transferencia de calor sobre el cuerpo. Test RAM-C II	89
5.9. Distribución de presión sobre el cuerpo. Test RAM-C II	90

5.10. Convergencia a la solución estacionaria. Test RAM-C II	90
5.11. Geometría del modelo del tubo de expansión HYPULSE	92
5.12. Vista global de la malla de la configuración del test HYPULSE.	93
5.13. Líneas de corriente en la estela. Test HYPULSE.	94
5.14. Transferencia de calor sobre el cuerpo. Test HYPULSE.	94
5.15. Presión sobre el cuerpo. Test HYPULSE	95
5.16. Distribución de variables sobre la línea de estancamiento. Test HYPULSE.	95
5.17. Líneas de contorno modelo HYPULSE	96
5.18. Vista global del mallado del cilindro HEG.	98
5.19. Presión sobre la línea de estancamiento. Cilindro túnel HEG.	100
5.20. Transferencia de calor sobre la línea de estancamiento. Cilindro túnel HEG.	100
5.21. Vista del campo de presiones [Pa]. Cilindro túnel HEG.	102
5.22. Vista del campo de temperaturas [K]. Cilindro túnel HEG.	103
5.23. Fracción másica de N ₂ y O ₂ . Condición (I) túnel HEG	104
5.24. Fracción másica de N y O. Condición (I) túnel HEG	105
5.25. Fracción másica de N ₂ y O ₂ . Condición (II) túnel HEG	106
5.26. Fracción másica de N y O. Condición (II) túnel HEG	107
5.27. Test de escalabilidad. Partición de la malla	109
5.28. Test de escalabilidad: escalabilidad fuerte y eficiencia.	110
5.29. Test de escalabilidad: escalabilidad débil.	111
5.30. Test de escalabilidad: escalabilidad de memoria.	111

LISTA DE TABLAS

2.1. Reacciones químicas. Modelo de aire de 7 especies	30
5.1. Condiciones de la corriente libre del test RAM-C II	84
5.2. Mallas utilizadas en el test RAM-C II.	84
5.3. Comparación resultados en la línea de estancamiento.	87
5.4. Condiciones de la corriente libre del test HYPULSE.	92
5.5. Mallas utilizadas en el test HYPULSE.	92
5.6. Condiciones de la corriente libre del test del túnel HEG.	97
5.7. Cilindro HEG: comparación de resultados en línea de estancamiento.	101
5.8. Desbalance de carga en las particiones del test de escalabilidad fuerte	110
A.1. Datos de las especies.	119
A.2. Niveles de energía electrónica.	120
A.3. Integrales de colisión $\Omega_{0,0}$	120
A.4. Integrales de colisión $\Omega_{1,1}$	122
A.5. Parámetros del coeficiente de reacción directa. Modelo de Park	123
A.6. Eficiencia de las especies catalíticas. Modelo de Park.	124
A.7. Coeficientes de la constante de equilibrio. Modelo de Park	125
A.8. Parámetros del coeficiente de reacción directa. Modelo de Gupta	126
A.9. Eficiencia de las especies catalíticas. Modelo de Gupta.	127
A.10. Coeficientes de la constante de equilibrio. Modelo de Gupta	127

LISTA DE SIMBOLOS

La siguiente lista de símbolos no es exhaustiva y se refiere principalmente a magnitudes de carácter físico.

a velocidad del sonido, m/s

a_{sr} coeficiente adimensional utilizado en la expresión de la conductividad térmica

c_s fracción de masa de la especie s

c_v^{tr} calor específico a volumen constante del modo traslacional-rotacional de la mezcla, J/kg-K

c_v^{ve} calor específico a volumen constante del modo vibracional-electrónico de la mezcla, J/kg-K

$c_{v,s}^{el}$ calor específico a volumen constante del modo electrónico de la especie s , J/kg-K

$c_{v,s}^t$ calor específico a volumen constante del modo traslacional de la especie s , J/kg-K

$c_{v,s}^{tr}$ calor específico a volumen constante del modo traslacional-rotacional de la especie s , J/kg-K

$c_{v,s}^{ro}$ calor específico a volumen constante del modo rotacional de la especie s , J/kg-K

$c_{v,s}^v$ calor específico a volumen constante del modo vibracional de la especie s , J/kg-K

$c_{v,s}^{ve}$ calor específico a volumen constante del modo vibracional-electrónico de la especie s , J/kg-K

D_s coeficiente de difusión de la especies s , m²/s

D_{sr} coeficiente de difusión binaria entre las especies s y r , m²/s

D_s^a coeficiente de difusión ambipolar de la especie ionizada s , m²/s

E energía total de la mezcla por unidad de volumen, J/m³
 \mathbf{F} tensor de flujos convectivos
 \mathbf{F}^v tensor de flujos difusivos
 $g_{i,s}$ degeneración del estado cuántico i del modo electrónico de la especie s
 H entalpía total de la mezcla por unidad de volumen, J/m³
 h_s entalpía específica de la especie s , J/kg
 $h_{tr,s}$ entalpía específica del modo traslacional-rotacional de la especie s , J/kg
 $h_{ve,s}$ entalpía específica del modo vibracional-electrónico de la especie s , J/kg
 h_s^0 entalpía de formación específica de la especie s , kg/mol
 I_d matriz identidad de tamaño d
 \mathbf{J}_s vector flujo de difusión de masa de la especie s , kg/m³-s
 $J_{s,r}$ componente en la dirección r del vector de flujo de difusión de masa de la especie s , kg/m³-s
 k_B constante de Boltzmann, $k_B = 1.380\,648\,8(13) \times 10^{-23}$ J K⁻¹
 $k_{b,r}$ coeficiente de reacción inversa para la reacción r , cm³/mol-s o cm⁶/mol²-s²
 $k_{f,r}$ coeficiente de reacción directa para la reacción r , cm³/mol-s²
 $K_{eq,r}$ constante de equilibrio de la reacción r
 M_s masa molar de la especie s , kg/mol
 m_s masa por partícula de la especie s , kg
 \mathcal{N}_A constante de Avogadro, $\mathcal{N}_A = 6.022\,141\,29(27) \times 10^{23}$ mol⁻¹
 n_s densidad numérica de la especie s , m⁻³
 p presión, Pa
 p_s presión parcial de la especie s , Pa

p_e presión parcial de los electrones, Pa

\mathbf{q}^T vector de flujo de calor por conducción térmica, W/m²

q_r^T componente en la dirección r del vector de flujo de calor por conducción térmica, W/m²

\mathbf{q}^D vector de flujo de calor por difusión de las especies, W/m²

q^D componente en la dirección r del vector de flujo de calor por difusión de las especies,
W/m²

\mathcal{R} constante universal de los gases ideales, $\mathcal{R} = 8.3144$ J/mol-K

\mathbf{s} vector de términos fuente

\mathbf{s}^{axi} vector de términos fuente axisimétricos

T temperatura traslacional-rotacional, K

T_{ve} temperatura vibracional-electrónica, K

$T_{f,r}$ temperatura de control del coeficiente de reacción directa de la reacción r , K

$T_{b,r}$ temperatura de control del coeficiente de reacción inverso de la reacción r , K

t tiempo, s

\mathbf{u} vector de variables conservativas

\bar{u}_s velocidad promedio de la especie s molecular, m/s

v_i velocidad en la dirección x_i de un sistema cartesiano, m/s

v_x, v_r, v_φ velocidad en las direcciones x , r y φ de un sistema cilíndrico, m/s

\mathbf{v} vector velocidad promedio de la mezcla de gases, m/s

\mathbf{v}_s^D vector velocidad de difusión de la especie s , m/s

\mathbf{v}_s vector velocidad de la especie s , m/s

(x_1, \dots, x_d) coordenadas espaciales de un sistema cartesiano

(x, r, φ) coordenadas espaciales de un sistema cilíndrico

γ_s número de moles de la especie s por unidad de masa de la mezcla, mol/kg
 x_s fracción molar de la especie s , m²/s
 δ_{ij} delta de Kronecker
 ϵ energía interna total de la mezcla por unidad de volumen, J/m³
 ϵ_{tr} energía interna traslacional-rotacional de la mezcla por unidad de volumen, J/m³
 ϵ_{ve} energía interna vibracional-electrónica de la mezcla por unidad de volumen, J/m³
 ϵ_s energía interna total específica de la especie s , J/kg
 $\epsilon_{el,s}$ energía interna electrónica específica de la especie s , J/kg
 $\epsilon_{ro,s}$ energía interna rotacional específica de la especie s , J/kg
 $\epsilon_{t,s}$ energía interna traslacional específica de la especie s , J/kg
 $\epsilon_{v,s}$ energía interna vibracional específica de la especie s , J/kg
 $\epsilon_{tr,s}$ energía interna traslacional-rotacional específica de la especie s , J/kg
 $\epsilon_{ve,s}$ energía interna vibracional-electrónica específica de la especie s , J/kg
 $\theta_{i,s}^{el}$ temperatura electrónica característica del estado cuántico i de la especie s , K
 $\theta_{v,s}$ temperatura vibracional característica de la especie s , K
 κ_t conductividad térmica del modo de energía traslacional, W/(m K)
 κ_{tr} conductividad térmica del modo de energía traslacional-rotacional, W/(m K)
 κ_{ro} conductividad térmica del modo de energía rotacional, W/(m K)
 κ_{ve} conductividad térmica del modo de energía vibracional-electrónico, W/(m K)
 λ coeficiente de compresión de la mezcla de gases, N-s/m²
 μ coeficiente de viscosidad de la mezcla de gases, N-s/m²
 μ_{sr} masa molar reducida entre las especies s y r , kg/kmol
 ρ densidad de la mezcla de gases, kg/m³

ρ_s densidad parcial de la especie s , kg/m³

σ_s sección eficaz de colisión límite, m²

$\bar{\tau}$ tensor de tensiones viscosas

$\xi_{r,s}$ eficiencia catalítica de la especie s en la reacción r

τ_{ij} componente ij del tensor de tensiones viscosas, N/m²

τ_s tiempo de relajación traslacional-vibracional de la especie molecular s , s

τ_{sr}^{MW} tiempo de relajación traslacional-vibracional entre las especies s y r según la expresión de Millikan y White, s

τ_{sr}^P modificación del tiempo de relajación traslacional-vibracional según la expresión de Park, s

$\bar{\tau}_v$ tiempo de relajación traslacional-vibracional aproximado, s

ν_{sr}^f coeficiente estequiométrico de la especie s reactante presente en la reacción r

ν_{sr}^b coeficiente estequiométrico de la especie s producto presente en la reacción r

$\dot{\omega}_s$ tasa de producción de la especie s por reacciones químicas, kg/m³-s

Ω_{el-tr} intercambio de energía entre los modos electrónico y traslacional-rotacional, J/m³-s

Ω_{v-dis} tasa cambio de energía vibracional por disociación, J/m³-s

Ω_{v-tr} intercambio de energía entre los modos vibracional y traslacional-rotacional, J/m³-s

$\bar{\Omega}_{sr}^{(1,1)}$ integrales de colisión entre las especies s y r , Å²

$\Delta_{sr}^{(i)}$ integrales de colisión modificadas entre las especies s y r , m-s

La aerotermodinámica es la disciplina que combina la aerodinámica con la termodinámica y termoquímica con el objetivo de estudiar el flujo de gases sobre cuerpos a números de Mach elevados, usualmente mayores a 5, donde debido a la alta energía involucrada surgen una variedad de fenómenos físicos no presentes generalmente en flujos de menor velocidad. Este tipo de flujos se presentan comúnmente en trayectorias de reingreso atmosférico o entrada a la atmósfera de otros planetas de vehículos espaciales. Una característica notable del flujo hipersónico es la alta energía cinética involucrada y como la misma es transferida a los modos de energía térmica cuando el fluido encuentra la superficie de un cuerpo, mediante la formación de una fuerte onda de choque separada. Esta transferencia de energía eleva la temperatura a niveles tales que se producen cambios en la composición química del gas, ionización, ablación de la superficie del vehículo y emisión de altos niveles de radiación, entre otros. Estos fenómenos interactúan con el campo de movimiento del flujo produciendo una serie de efectos sobre el vehículo que incluyen altas transferencias de calor sobre la superficie tanto por convectividad como por radiación, cambios en las fuerzas aerodinámicas debido en parte a la alta interacción existente entre la onda de choque con la capa límite, y efectos de tipo electromagnético, como lo es la formación de una capa de electrones producto de la ionización de los gases que puede llegar a producir el bloqueamiento temporal de las comunicaciones. La predicción precisa de la influencia y magnitud de estos fenómenos es considerada crítica en el diseño de sistemas de protección térmica, sistemas de control aerodinámico y la determinación de cargas estructurales, lo que en última instancia tiene una influencia directa en la determinación de la carga útil y el diseño y análisis de la trayectoria del vehículo [57].

Las condiciones del flujo de gases de estas características son muy difíciles sino inviables de reproducir en forma experimental. Un reducido número de laboratorios han desarro-

llado las capacidades necesarias para la reproducción de este tipo de fenómenos aunque su aplicación es limitada para representar en forma general las condiciones de un vuelo hipersónico [156, 43].

La disciplina de Dinámica de Fluidos Computacional (CFD, por sus siglas en inglés) cumplen un rol fundamental dentro del estudio de flujos hipersónicos. Herramientas numéricas han sido utilizadas con éxito en el proceso de diseño de una multitud de vehículos espaciales que van desde las sondas Galileo [106], Stardust [118] Huygens [160] hasta el más reciente *Mars Science Lab* [45] por nombrar algunos ejemplos relevantes. Más aún, el avance a niveles exponenciales de la tecnología de computación y el empleo de sistemas de cómputo distribuido ha permitido paulatinamente la incorporación de modelos físicos más sofisticados, aplicados a la simulación de complejas configuraciones tridimensionales con discretizaciones del orden de decenas de millones de grados de libertad [31].

1.1 Modelización física de flujos hipersónicos

Tal como mencionamos en la sección anterior, una de las características particulares de los flujos hipersónicos son las altas temperaturas que se alcanzan en el campo de movimiento en la región detrás de la onda de choque debido a la alta transferencia de energía cinética involucrada. Estas temperaturas pueden ser del orden de 10 000K en una trayectoria de reentrada atmosférica típica en la cual se presentan velocidades de vuelo entre 7 a 12 km/s.

A modo de ilustración considérese el ejemplo de una mezcla de gases tal como el aire. A temperaturas menores a 800 K únicamente los modos de energía traslacional y rotacional se encuentran totalmente excitados mientras que la energía de los restantes modos es despreciable. En estas condiciones entonces el aire se comporta como un gas calórico perfecto. A temperaturas entre 800 K y 2500 K comienza la excitación del modo de energía vibracional, lo que causa que el calor específico sea una función de la temperatura, por lo que el gas se comporta como un gas térmicamente perfecto. Cuando la temperatura supera los 2500 K el modo de energía vibracional se encuentra totalmente excitado y comienza la disociación de las moléculas de oxígeno. A temperaturas mayores a 4000 K el oxígeno se encuentra prácticamente totalmente disociado y comienza la disociación del nitrógeno. En estas condiciones si bien las especies por separado se comportan como un gas térmicamente perfecto el calor específico de la mezcla es considerado una función tanto de la temperatura como de la presión. Sobre 9000 K la mayor parte del nitrógeno se encuentra disociado y en este nivel comienza la ionización parcial del oxígeno y nitrógeno. Sobre este

nivel el aire puede considerarse como un gas parcialmente ionizado.

Los procesos mencionados, como las reacciones químicas o el intercambio entre los modos de energía interna (traslacional, rotacional, vibracional y/o electrónico) de los átomos y moléculas del gas, tienden a equilibrarse a las condiciones locales del fluido a través de colisiones intermoleculares, en un tiempo característico que depende de la frecuencia de estas colisiones. El comportamiento general de estos procesos puede entonces ser descrito mediante la comparación de su tiempo característico con la escala temporal del flujo de las partículas por la región del campo de movimiento de interés. Cuando el tiempo característico del proceso es mucho mayor que la escala temporal del flujo se dice que el proceso se encuentra congelado. Por otro lado cuando el tiempo característico es mucho menor que esta se dice que el proceso se encuentra en equilibrio. Finalmente, cuando ambas escalas temporales son comparables se dice que el proceso se encuentra en no equilibrio. Las condiciones de (no) equilibrio pueden referirse a los procesos de reacciones químicas en donde se dice que el flujo se encuentra en (no) equilibrio químico o a los procesos de intercambio de energía entre los modos de energía interna, en cuyo caso se dice que el flujo se encuentra en (no) equilibrio termodinámico. Flujos en no equilibrio termoquímico se presentan generalmente en trayectorias de reentrada en condiciones de baja densidad (a altitudes $\gtrsim 50\text{km}$) en la cual la frecuencia del número de colisiones disminuye y velocidades de vuelo elevadas ($\gtrsim 5\text{km/s}$), que disminuyen la escala de tiempo convectiva. En condiciones de menor altitud, la frecuencia de colisiones aumenta a niveles tales que el flujo puede ser descrito en equilibrio termoquímico. Los procesos en no equilibrio impactan el campo de movimiento de distintas maneras. El no equilibrio termoquímico afecta principalmente las propiedades de temperatura, composición y propiedades de transporte del gas especialmente en la región entre la onda de choque y la capa límite (también conocida como capa de choque) lo que en última instancia modifica la transferencia de calor convectiva sobre el cuerpo. El no equilibrio térmico además presenta influencia sobre la velocidad de las reacciones, en especial a las reacciones de disociación que son altamente dependientes del estado vibracional de las moléculas [126, 87]. A temperaturas elevadas además todos estos efectos presentan influencia sobre los niveles de radiación que emite y absorbe el gas que depende en forma directa del estado de excitación de los modos de energía interna y de la composición de la mezcla [123].

En las condiciones de trayectoria de reentrada atmosférica en donde el aire puede ser considerado un medio continuo en todo el campo de movimiento, el sistema de ecuaciones de Navier-Stokes en donde se adiciona una ecuación de conservación de masa para cada especie reactiva y una ecuación de energía para cada modo en no equilibrio es empleado

para modelar flujos en no equilibrio termoquímico [9, 91, 30, 56, 126, 61]. En todos los trabajos referenciados se asume que los modos traslacional y rotacional se equilibran lo suficientemente rápido como para ser descritos mediante una única temperatura. Candler [30] emplea una temperatura vibracional diferente para cada molécula y una temperatura electrónica para describir el modo de energía traslacional de los electrones libres. Park [126] asume que los modos de energía vibracional de las moléculas se encuentran en equilibrio y son descritos por una única temperatura vibracional para todo el sistema. Gnoffo [56] y Grasso *et. al* [61] simplifican aún más el modelo asumiendo el equilibrio entre los modos vibracional de las moléculas, el modo electrónico de las especies y el traslacional de los electrones libres descritos por una única temperatura vibracional-electrónica, en el denominado modelo de 2 temperaturas. Una revisión interesante sobre la consistencia física de los así denominados métodos multitemperatura lo constituye el trabajo de Giordano [54].

Tal como hemos visto dada la variedad de aproximaciones que se pueden utilizar y la cantidad de fenómenos que pueden ser considerados, es tarea del modelizador el establecer el rango de aplicación y validez del modelo físico utilizado. En última instancia, la adecuada comparación con resultados experimentales es crucial para establecer la confiabilidad y robustez del modelo asumido.

1.2 Técnicas numéricas

La complejidad de los fenómenos físicos presentes en flujos hipersónicos presenta un gran desafío para los métodos de discretización numérica. En el campo de movimiento se presentan simultáneamente regiones con altísimos gradientes (onda de choque, capa límite), junto con expansiones fuertes que provocan regiones con condiciones cercanas al vacío prácticamente en el límite donde las hipótesis del continuo pierden validez. La introducción de técnicas de captura de choque de tipo *upwind* [143, 153, 119, 134], que incluyen en la discretización numérica información sobre la propagación física de las ondas del flujo, y de métodos robustos de segundo orden tales como la reconstrucción MUSCL [152] o los esquemas TVD [68] supusieron un gran avance en la captura robusta y precisa de discontinuidades. Estas técnicas, formuladas en un principio para gases perfectos fueron luego extendidas para incluir el tratamiento de gases generales en equilibrio termoquímico [64, 159] y posteriormente, sistemas de mezcla de gases reactivos en no equilibrio termodinámico [95, 63]. Una nueva familia de esquemas *upwind* denominados esquemas AUSM fue introducida por Liou [93]. Sucesivas mejoras posteriores fueron introducidas en el método [80, 79, 92, 83] y desde entonces han ganado aceptación debido tanto a sus propiedades

de precisión y robustez como a la posibilidad de ser aplicados en forma directa a flujos en no equilibrio termoquímico. Aplicaciones de otros métodos para la captura de soluciones discontinuas han emergido recientemente en el campo de flujos hipersónicos, tales como Taylor-Galerkin [77], Petrov-Galerkin [81] o el método de Galerkin Discontinuo [20]. No obstante actualmente, los códigos de referencia para la simulación de flujos hipersónicos utilizan el método de volúmenes finitos debido en parte al extenso trabajo de investigación y validación existente.

Además de la captura de discontinuidades otro de los aspectos notorios presentes en la simulación de flujos hipersónicos es la alta disparidad entre las escalas temporales del flujo y de los cambios en la composición química y relajación termodinámica, así como la necesidad de utilizar mallas altamente deformadas en las regiones de capa límite y de discontinuidades, convierte en extremadamente rígido al sistema de ecuaciones. Métodos de integración temporal de tipo explícito se tornan altamente ineficientes debido a la restricción de estabilidad del paso de tiempo. Métodos de integración implícito presentan por otro lado la necesidad de evaluar el jacobiano del residuo y la resolución de un sistema lineal de ecuaciones en cada paso temporal. Debido a la necesidad de reducir el costo computacional intrínseco a métodos de tipo implícito, han sido propuestas diferentes estrategias tales como: métodos de diagonalización de los términos del jacobiano [27, 44], métodos de punto implícito que relajan los términos fuera del bloque diagonal del jacobiano [55], métodos de relajación en las direcciones de menor acoplamiento de la solución [167], métodos analíticos aproximados del jacobiano o de tipo Newton-Krylov libres del jacobiano [116] entre otros. Tal como es notado en [116] y [111], el uso de un jacobiano analítico en flujos hipersónicos con fuertes choques en no equilibrio termoquímico no brinda usualmente un comportamiento cuadrático de convergencia a la solución estacionaria.

1.3 Códigos CFD para la simulación de flujos hipersónicos

Dos de los códigos considerados de referencia en la comunidad de simulación de flujos hipersónicos son el código LAURA (*Langley Aerothermodynamic Upwind Relaxation Algorithm*) [55] y el código DPLR (*Data-Parallel Line Relaxation*) [167]. Ambos utilizan esquemas de volúmenes finitos basados en mallas estructuradas. Particularmente, LAURA utiliza el solver de Riemann de Roe [134] con un segundo orden dado por el esquema TVD de Yee [168] para el cálculo de los flujos convectivos y un esquema de diferencias centradas para la aproximación de los términos viscosos. La integración temporal es realizada mediante el método de punto implícito. Por otro lado DPLR, y tal como su nombre lo indica,

utiliza una metodología de relajación basada en líneas de Gauss-Seidel adaptada a cómputo distribuido para la integración temporal eficiente hacia soluciones estacionarias. En este código los flujos convectivos son obtenidos por el esquema *flux-vector splitting* de Steger-Warming [143], con una reconstrucción MUSCL espacial de tercer orden. Ambos códigos incluyen módulos para la resolución de las ecuaciones de Navier-Stokes laminares y turbulentas considerando mezcla de gases reactivos y efectos de no equilibrio termodinámico, utilizando capacidades de cómputo distribuido y mallas estructuradas multibloque.

Si bien robustos y eficientes, los esquemas basados en mallas estructuradas presentan un considerable esfuerzo y tiempo de mallado en especial cuando desean ser aplicados a geometrías complejas. En contraposición, el uso de esquemas basados en mallas no estructuradas no sólo supone una alta flexibilidad en la definición de la geometría, sino que también ofrecen la posibilidad de adaptación local en las regiones donde es necesario incrementar el orden de resolución sin necesidad de incurrir en un refinamiento global de la malla. Una de las desventajas inherentes a las mallas no estructuradas consiste en la necesidad de almacenar en memoria una estructura de datos adicional para la administración de la topología de la malla y los campos asociados a esta, la cual es comúnmente implícita en mallas estructuradas. No obstante, el atractivo de sus ventajas y el incremento de las capacidades de memoria y la utilización de sistemas de computación distribuida ha favorecido el interés reciente en el desarrollo de este tipo de códigos.

El código FUN3D (*Fully Unstructured 3D*) integra las capacidades de simulación de flujos hipersónicos de LAURA en un código de volúmenes finitos centrado en los vértices basado en mallas de tetrahedros. Sin embargo el diseño de la grilla con este tipo de elementos ha brindado resultados de la predicción de la transferencia de calor en la región de estancamiento de menor calidad que los obtenidos con LAURA [57]. De acuerdo al análisis realizado, la presencia de volúmenes de control no alineados introduce errores en la distribución de la entropía entre las líneas de corriente que atraviesan la onda lo cual impacta en la calidad de la solución obtenida en el borde de la capa límite. Esto tiene un mayor efecto en la zona de estancamiento debido a la menor disipación presente en ésta región [57, 29].

El código US3D [112] extiende la metodología y capacidades del código DPLR a mallas híbridas no estructuradas. Al igual que este, permite la aplicación del método de relajación basado en líneas, con la opción de utilizar el método de punto implícito en regiones donde no sea posible establecer una dirección preferencial. Mediante el uso de mallas mixtas de elementos prismáticos alineadas con las características del flujo en las regiones sensibles y tetrahedros en las restantes se intenta reducir los errores inducidos en mallas completa-

mente no estructuradas a expensas de un relativo mayor control externo de la malla.

Utilizando las herramientas computacionales para mallas no estructuradas del sistema orientado a objetos COOLFluiD (*Computational Object-Oriented Libraries for Fluid Dynamics*) [89] fue implementado un código [88] para la simulación de flujos en no equilibrio termoquímico que utiliza tanto un esquema de volúmenes finitos de segundo orden y métodos *upwind* de la familia AUSM, como un esquema de residuos distribuidos [37]. Este último método no obstante, no ha demostrado mejorar los resultados obtenidos sobre la transferencia de calor en comparación al método de volúmenes finitos cuando son utilizadas mallas alineadas en forma arbitraria con respecto al choque separado [102].

1.4 Objetivos del presente trabajo

El objetivo principal de esta tesis es el desarrollo, implementación y validación de un nuevo código orientado a la solución numérica de las ecuaciones de Navier-Stokes laminares, considerando una mezcla de gases reactivos en no equilibrio termodinámico.

- Implementación de un esquema de volúmenes finitos de segundo orden centrado en las celdas basado en mallas no estructuradas híbridas en dominios tanto bidimensionales como tridimensionales.
- Implementación de algoritmos numéricos y modelización de propiedades físicas al estado del arte. Los métodos han sido seleccionados de manera tal que el esquema general es transparente a la malla es decir, independiente de la dimensión espacial del dominio y de la topología de los elementos de malla empleados.
- Incorporación de una metodología de integración temporal generalizada que trata todas las componentes del sistema de ecuaciones en forma implícita y acoplada, empleándose un jacobiano analítico aproximado del residuo como parte de un sistema lineal que es resuelto para cada paso temporal utilizando métodos eficientes de tipo iterativo.
- Incorporación de capacidades de funcionalidad en sistemas de cómputo distribuido. Con este objetivo se ha diseñado e implementado un sistema orientado a objetos para la administración en paralelo de la topología de mallas y de los campos asociados a ésta. El nuevo sistema propuesto ha posibilitado establecer una separación bien definida de los aspectos de paralelizado con respecto a aquellos referentes a los algoritmos numéricos y de modelización física del código.

- Validación a través de la obtención y comparación de resultados con datos de tipo experimental y resultados numéricos obtenidos por otros autores.
- Obtención y análisis de resultados sobre las características de escalabilidad del sistema implementado.

1.5 Organización de la tesis

La tesis es organizada como sigue:

En el Capítulo 2 se describen aspectos relativos al sistema de ecuaciones de gobierno empleado para la modelización del flujo de gases en no equilibrio termoquímico.

En el Capítulo 3 se presenta una descripción del esquema de volúmenes finitos y a los algoritmos numéricos utilizados para la discretización numérica del sistema de ecuaciones.

En el Capítulo 4, además de presentar la organización general del código, se presenta y discute el diseño e implementación del sistema orientado a objetos para la administración de mallas no estructuradas y campos asociados en sistemas distribuidos.

En el Capítulo 5 se presentan y discuten los resultados obtenidos con el objetivo de validar el código desarrollado.

Finalmente, en el Capítulo 6, se presentan las conclusiones obtenidas a partir del trabajo desarrollado en esta tesis y se discuten las posibles líneas de investigación a futuro.

2.1 Introducción

En el presente capítulo se describen el sistema de ecuaciones de conservación de Navier-Stokes para el flujo laminar de un gas reactivo constituido por una mezcla de gases en no equilibrio termoquímico, considerando tanto especies neutras como ionizadas, en el cual se asumen condiciones de ionización débil, es decir, neutralidad de cargas y ausencia de corriente neta para todo el campo de movimiento. La aplicación de este sistema asume como válida la hipótesis del continuo en donde el número de Knudsen Kn del flujo satisface la condición $Kn \ll 1$. La mezcla de gases se considera en condiciones de no equilibrio químico, en la cual una ecuación de conservación de la masa es planteada para cada especie. Si bien el modelo cinético presentado es general, luego se particulariza para el caso de mayor interés en donde el gas considerado es aire.

Por otro lado, el modelo de no equilibrio termodinámico asume que la energía interna de cada especie puede ser separada en los modos de energía traslacional, rotacional, vibracional y electrónica. Las hipótesis particulares empleadas corresponden a las del modelo de dos temperaturas de Park [126] en el cual se asume una única temperatura traslacional-rotacional T que caracteriza los modos de energía traslacional y rotacional de las especies pesadas, y una temperatura vibracional-electrónica T_{ve} que define los modos de energía vibracional de todas las especies poliatómicas, el modo de energía electrónica de todas las especies pesadas y el modo de energía traslacional de los electrones libres.

En lo que sigue se presentarán y discutirán brevemente las ecuaciones y términos que componen el sistema empleado siguiendo principalmente los trabajos de Gnoffo [56] y Grasso *et al.* [61].

2.2 Ecuaciones de conservación

2.2.1 Conservación de la masa

Considérese un sistema de coordenadas euleriano definido por $\{(\mathbf{x}, t) \in (\mathbb{R}^d, 0^+)\}$ donde d denota la dimensión espacial del sistema, $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_d)$ es el vector de coordenadas espaciales y donde t denota la coordenada temporal. Debe entenderse en lo que sigue que ∇ representa al operador gradiente definido en la forma usual. Dadas estas definiciones la ecuación que gobierna la conservación de la masa para la especie s de una mezcla de ne gases puede escribirse como:

$$\frac{\partial \rho_s}{\partial t} + \nabla \cdot \rho_s \mathbf{v}_s = \dot{\omega}_s, \quad s = 1, 2, \dots, ne \quad (2.1)$$

donde ρ_s y \mathbf{v}_s denotan la densidad y el vector velocidad propio de la especie s respectivamente. Mientras que los términos a la izquierda de (2.1) representan la derivada convectiva de la densidad parcial ρ_s de la especie s , el término $\dot{\omega}_s$ denota la tasa de producción de masa por unidad de volumen debida a las reacciones químicas. Este último término es evaluado según el modelo de cinética química considerado que es discutido en la Sección 2.6.

Sea ahora la definición de la velocidad de difusión \mathbf{v}_s^D de la especie s dada por:

$$\mathbf{v}_s^D = \mathbf{v}_s - \mathbf{v} \quad (2.2)$$

donde \mathbf{v} es la velocidad promediada de la mezcla de gases dada por:

$$\mathbf{v} = \sum_{s=1}^{ne} c_s \mathbf{v}_s \quad (2.3)$$

en donde,

$$c_s = \frac{\rho_s}{\rho} \quad (2.4)$$

denota la fracción másica de la especie s , en la cual ρ denota la densidad total de la mezcla y se encuentra dada por:

$$\rho = \sum_{s=1}^{ne} \rho_s \quad (2.5)$$

Despejando \mathbf{v}_s de (2.2) e introduciendo en (2.1) se obtiene la ecuación de conservación

de masa escrita en términos de la velocidad promedio de la mezcla:

$$\frac{\partial \rho_s}{\partial t} + \nabla \cdot \rho_s \mathbf{v} = -\nabla \cdot \mathbf{J}_s + \dot{\omega}_s \quad (2.6)$$

donde,

$$\mathbf{J}_s = \rho_s \mathbf{v}_s^D \quad (2.7)$$

es el denominado *flujo de difusión de masa*, cuya modelización se discute en la Sección 2.4.

La ecuación de conservación de la masa total de la mezcla se escribe como la sumatoria de las ne ecuaciones (2.1). Debido a que por la ley de conservación de la masa la sumatoria sobre las tasas de cambio por las reacciones químicas es nula y utilizando la definición de la velocidad de difusión se obtiene:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \mathbf{v} = 0 \quad (2.8)$$

Existen dos métodos principales de escribir la conservación de masa de las especies [126]. El primer método emplea las ne ecuaciones (2.1) de conservación de cada una de las especies. En el segundo método, se utiliza la ecuación de conservación de la densidad global de la mezcla (2.8), y en el cuál una de las ecuaciones de conservación de las especies es eliminada del sistema. En este último método la densidad parcial de la especie eliminada es obtenida substrayendo de la densidad global la sumatoria de la densidad de las restantes especies. Si el primer método es utilizado, debe asegurarse que la sumatoria de los flujos de difusión de masa sobre todas las especies sea nulo. De otra forma puede ocurrir que exista creación (o destrucción) de masa en el dominio del problema. Por otro lado, en el segundo método, los errores numéricos asociados a la densidad parcial de cada especie se acumulan en la especie eliminada del sistema. De esta forma los errores acumulados deben ser mucho menores en magnitud que la densidad parcial de la especie eliminada. Esto es, la especie que corresponde a la ecuación de conservación que es eliminada del sistema, debe ser una especie dominante. Debido a que la definición de una especie dominante es dependiente de las condiciones del problema considerado [126], se ha optado por implementar únicamente el primer método, teniendo en cuenta la condición mencionada en la modelización de los flujos de difusión de masa.

2.2.2 Conservación de la cantidad de movimiento

En forma rigurosa debe escribirse una ecuación de conservación de movimiento para cada una de las especies [75]. Esta estrategia no obstante representaría tiempos de cómputo

prohibitivos especialmente en el cálculo de flujos multidimensionales con un bajo, sino nulo, aumento de la precisión en la descripción global del flujo, especialmente en los casos que serán tratados. Se asume por lo tanto una única ecuación (vectorial) de movimiento para toda la mezcla, donde implícitamente se asume que las velocidades de cada una de las especies son del orden de la velocidad promedio de la mezcla. Considerando un flujo parcialmente ionizado, en donde se acepta la ausencia de corriente neta, la ecuación de conservación de movimiento de la mezcla de gases no difiere de la forma usual de las ecuaciones de Navier-Stokes:

$$\frac{\partial \rho \mathbf{v}}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \mathbf{v} \otimes \mathbf{v}^T + \nabla \cdot p I_d = \nabla \cdot \bar{\bar{\tau}} \quad (2.9)$$

Mientras que los dos primeros términos a la izquierda de (2.9) representan la derivada convectiva del momento de la mezcla, el tercer término representa el cambio de movimiento debido al gradiente de la presión p . El término a la derecha representa el cambio de movimiento debido al tensor de tensiones viscosas $\bar{\bar{\tau}}$. Las $d \times d$ componentes τ_{ij} de este tensor se obtienen asumiendo un fluido newtoniano mediante:

$$\tau_{ij} = \mu \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) + (\lambda \nabla \cdot \mathbf{v}) \delta_{ij} \quad (2.10)$$

donde v_i denota la componente del vector velocidad de la mezcla \mathbf{v} en la dirección x_i .

Los coeficientes de viscosidad μ y de compresión λ se encuentran relacionados a través de la hipótesis de Stokes que asume que la suma de las tensiones viscosas normales τ_{ii} es nula, lo que implica la relación:

$$3\lambda + 2\mu = 0 \quad (2.11)$$

Reemplazando (2.11) en (2.10) se tiene finalmente:

$$\tau_{ij} = \mu \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \nabla \cdot \mathbf{v} \right) \quad (2.12)$$

En la forma general el coeficiente de viscosidad es una función dependiente tanto del estado termodinámico como de la composición química del gas. La modelización física de este término es tratada en la Sección 2.4.

2.2.3 Conservación de la energía total

Sea ahora la energía total por unidad de volumen de la mezcla E dada como la suma de la energía interna ϵ y la energía cinética por unidad de volumen de la mezcla:

$$E = \epsilon + \rho \frac{\|\mathbf{v}\|^2}{2} \quad (2.13)$$

La energía interna de la mezcla ϵ se encuentra dada por:

$$\epsilon = \sum_{s=1}^{ne} \rho_s \epsilon_s \quad (2.14)$$

en donde ϵ_s denota la energía interna específica (por unidad de masa) de la especie s .

Dadas estas definiciones, la ecuación de conservación de la energía total se escribe como:

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \nabla \cdot (E + p) \mathbf{v} = \nabla \cdot (\bar{\boldsymbol{\tau}} \cdot \mathbf{v}) - \nabla \cdot \mathbf{q}^T - \nabla \cdot \mathbf{q}^D \quad (2.15)$$

El término $\nabla \cdot (\bar{\boldsymbol{\tau}} \cdot \mathbf{v})$ en (2.15) representa el calor producido por las fuerzas viscosas, en tanto que el término $\nabla \cdot \mathbf{q}^T$ representa la sumatoria de la conducción de calor térmica total, la cual para el modelo de dos temperaturas se encuentra dada por:

$$\mathbf{q}^T = -(\kappa_{tr} \nabla T + \kappa_{ve} \nabla T_{ve}) \quad (2.16)$$

donde κ_{tr} y κ_{ve} son los coeficientes de conducción térmica para los modos traslacional-rotacional y vibracional-electrónico respectivamente cuya modelización se trata en la Sección 2.4.

El término $\nabla \cdot \mathbf{q}^D$ remite a la conducción de calor producida por la difusión de las especies y se encuentra dado por:

$$\mathbf{q}^D = \sum_{s=1}^{ne} \mathbf{J}_s h_s \quad (2.17)$$

donde h_s denota la entalpía específica de la especie s .

2.2.4 Conservación de la energía vibracional-electrónica

La energía vibracional-electrónica por unidad de volumen de la mezcla ϵ_{ve} se define mediante:

$$\epsilon_{ve} = \sum_{s=1}^{ne} \rho_s \epsilon_{ve,s} \quad (2.18)$$

donde $\epsilon_{ve,s}$ es la energía interna de los modos vibracional-electrónico por unidad de masa de la especie s que se describe en la Sección 2.3. La ecuación que expresa la conservación de la energía vibracional-electronica se encuentra dada por:

$$\frac{\partial \epsilon_{ve}}{\partial t} + \nabla \cdot \epsilon_{ve} \mathbf{v} = -p_e \nabla \cdot \mathbf{v} - (\nabla \cdot \mathbf{q}_{ve}^T + \nabla \cdot \mathbf{q}_{ve}^D) + \Omega_{v-tr} + \Omega_{el-tr} + \Omega_{v-dis} \quad (2.19)$$

El primer término a la derecha de (2.19) denota el trabajo realizado por la presión parcial de los electrones libres p_e que se encuentra relacionado con el trabajo del campo eléctrico en gases ionizados. El segundo término representa la conducción de calor debido al gradiente de la temperatura vibracional-electrónica en donde:

$$\mathbf{q}_{ve}^T = -\kappa_{ve} \nabla T_{ve} \quad (2.20)$$

El tercer término representa la difusión de la energía vibracional-electrónica por difusión de las especies donde:

$$\mathbf{q}_{ve}^D = \sum_{s=1}^{ne} \mathbf{J}_s h_{ve,s} \quad (2.21)$$

en la cual $h_{ve,s}$ denota la entalpía específica asociada al modo vibracional-electrónico de la especie s . Finalmente el término Ω_{v-tr} expresa el intercambio de energía entre el modo vibracional de las especies poliatómicas y el modo traslacional-rotacional de las especies pesadas. El término Ω_{el-tr} denota el intercambio de energía producido por colisiones elásticas entre los electrones y las especies pesadas, en tanto Ω_{v-dis} representa los cambios en la energía vibracional debido a la disociación de las especies moleculares. Estos términos se presentan con más detalle en la Sección 2.5.

2.2.5 Forma vectorial de las ecuaciones de conservación

El sistema de ecuaciones formado por las ecuaciones de conservación de masa de las especies (2.1), cantidad de movimiento (2.9), energía total (2.15) y energía vibracional-electrónica (2.19) de la mezcla se presentan ahora en la forma vectorial compacta:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot [\mathbf{F}(\mathbf{u}) - \mathbf{F}^v(\mathbf{u}, \nabla \mathbf{u})] = \mathbf{s}(\mathbf{u}) \quad (2.22)$$

donde el vector de variables conservativa \mathbf{u} se define como:

$$\mathbf{u} = \begin{bmatrix} \rho_s \\ \rho \mathbf{v} \\ E \\ \epsilon_{ve} \end{bmatrix} \quad (2.23)$$

y donde el flujo correspondiente a los términos convectivos, difusivos y los términos fuente se encuentran dados respectivamente por:

$$\mathbf{F}(\mathbf{u}) = \begin{bmatrix} \rho_s \mathbf{v}^T \\ \rho \mathbf{v} \otimes \mathbf{v}^T + p \mathbf{I}_d \\ (E + p) \mathbf{v}^T \\ \epsilon_{ve} \mathbf{v}^T \end{bmatrix}, \quad \mathbf{F}^v(\mathbf{u}, \nabla \mathbf{u}) = \begin{bmatrix} -\mathbf{J}_s \\ \bar{\tau} \\ \bar{\tau} \cdot \mathbf{v}^T - (\mathbf{q}^T + \mathbf{q}^D) \\ -(\mathbf{q}_{ve}^T + \mathbf{q}_{ve}^D) \end{bmatrix} \quad (2.24a)$$

$$\mathbf{s}(\mathbf{u}) = \begin{bmatrix} \dot{\omega}_s \\ \mathbf{0}_d \\ 0 \\ -p_e \nabla \cdot \mathbf{v} + \Omega_{v-tr} + \Omega_{v-dis} \end{bmatrix} \quad (2.24b)$$

2.2.6 Formulación con simetría axial

En este trabajo son de interés flujos que presentan simetría axial, es decir aquellos para los cuales dado un sistema de coordenadas cilíndrico en donde (x, r, φ) denotan las coordenadas en el sentido axial, radial y azimutal respectivamente el valor de la derivada $\frac{\partial}{\partial \varphi}$ es idénticamente nula para cualquier variable de interés. Más aún, en los problemas tratados se asume que la velocidad en la dirección azimutal v_φ es también idénticamente nula en todo el dominio. Los casos con simetría axial pueden entonces ser tratados como problemas bidimensionales en donde los flujos convectivos y difusivos son formalmente similares a los dados por la Eq. (2.24) a excepción de la divergencia de la velocidad presente en la formulación del tensor de tensiones viscosas (2.10) la cuál se modifica según [170]:

$$(\nabla \cdot \mathbf{v})_{\text{axi}} = \frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{1}{r} \frac{\partial r v_r}{\partial r} \quad (2.25)$$

donde se utiliza la correspondencia $x = x_1, r = x_2$ de acuerdo a la notación introducida anteriormente. La condición de simetría axial adiciona además al lado derecho de (2.22) un término fuente que se encuentra dado por:

$$\mathbf{s}^{\text{axi}} = \mathbf{s}^c + \mathbf{s}^d = -\frac{v_r}{r} \begin{bmatrix} \rho_s \\ \rho \mathbf{v} \\ E + p \\ \epsilon_{ve} \end{bmatrix} + \frac{1}{r} \begin{bmatrix} -J_{s,r} \\ \tau_{xr} \\ \tau_{rr} - \tau_{\varphi\varphi} \\ \tau_{xr}v_x + \tau_{rr}v_r - (q_r^T + q_r^D) \\ -(q_{ve,r}^T + q_{ve,r}^D) \end{bmatrix} \quad (2.26)$$

en donde,

$$\tau_{\varphi\varphi} = -\frac{2}{3}\mu \left(\frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_r}{\partial r} - 2\frac{v_r}{r} \right) \quad (2.27)$$

2.3 Propiedades termodinámicas

2.3.1 Ecuación de estado

Para la obtención de la ecuación de estado de la mezcla de gases se asume que cada especie satisface la ecuación de estado de los gases perfectos. Es decir, la presión parcial de la especie p_s se encuentra dada por:

$$p_s = \frac{\mathcal{R}}{M_s} \rho_s T_s \quad (2.28)$$

donde \mathcal{R} es la constante universal de los gases ideales, M_s es la masa molar de la especie s , y donde T_s es la temperatura traslacional de la especie s , dado que únicamente este modo de energía contribuye a la presión [158]. Considerando que en el modelo de dos temperaturas, la temperatura del modo traslacional de los electrones libres se encuentra en equilibrio a la temperatura vibracional-electrónica, se obtiene la presión total de la mezcla aplicando la ley de Dalton según:

$$p = \sum_{s=1}^{ne} p_s = \mathcal{R} \left(\sum_{s \neq e} \frac{\rho_s}{M_s} T + \frac{\rho_e}{M_e} T_{ve} \right) \quad (2.29)$$

2.3.2 Energía interna de la mezcla

La energía interna por unidad de volumen de la mezcla de gases ϵ se encuentra dada por:

$$\epsilon = \sum_{s=1}^{ne} \rho_s \epsilon_s \quad (2.30)$$

De acuerdo a la separación de los modos de energía, la energía interna por unidad de masa ϵ_s de cada especie se encuentra dada por:

$$\epsilon_s = \epsilon_{t,s} + \epsilon_{ro,s} + \epsilon_{v,s} + \epsilon_{el,s} + h_s^0 \quad (2.31)$$

donde $\epsilon_{t,s}$, $\epsilon_{ro,s}$, $\epsilon_{v,s}$ y $\epsilon_{el,s}$ representan las energías internas específicas asociadas a los modos traslacional, rotacional, vibracional y electrónico respectivamente y donde h_s^0 es la *entalpía de formación* de la especie s a la temperatura de referencia $T_{ref} = 0\text{K}$.

2.3.3 Energía traslacional y rotacional

Se asume que tanto el modo de energía traslacional como el modo de energía rotacional se encuentran totalmente excitados. Luego la energía del modo traslacional-rotacional de cada especie pesada se encuentra dada por [158]:

$$\epsilon_{tr,s} = \epsilon_{t,s} + \epsilon_{ro,s} = (c_{v,s}^t + c_{v,s}^{ro}) T \quad (2.32)$$

en donde el calor específico a volumen constante del modo de energía traslacional se encuentra dado por:

$$c_{v,s}^t = \begin{cases} \frac{3}{2} \frac{\mathcal{R}}{M_s} & \text{si } s \text{ es especie pesada} \\ 0 & \text{si } s \text{ es electrón} \end{cases} \quad (2.33)$$

y el calor específico del modo rotacional asumiendo un modelo de rotación rígida se obtiene de:

$$c_{v,s}^{ro} = \begin{cases} \frac{\mathcal{R}}{M_s} & \text{si } s \text{ es especie poliatómica} \\ 0 & \text{si } s \text{ es especie monoatómica o electrón} \end{cases} \quad (2.34)$$

2.3.4 Energía vibracional y electrónica

La energía específica de vibración de las especies poliatómicas (moléculas) se deriva asumiendo que los estados de vibración cuánticos satisfacen una distribución de Maxwell-Boltzmann y que la molécula se comporta como un oscilador armónico. Se encuentra dada

para una especie poliatómica por [158]:

$$\varepsilon_{v,s} = \begin{cases} \frac{\mathcal{R}}{M_s} \frac{\theta_{v,s}}{\exp(\theta_{v,s}/T_{ve}) - 1} & \text{si } s \text{ es especie poliatómica} \\ 0 & \text{si } s \text{ es especie atómica o electrón} \end{cases} \quad (2.35)$$

donde $\theta_{v,s}$ es la denominada temperatura característica de vibración. Es de utilidad derivar además el calor específico a volumen constante correspondiente a este modo el cual se encuentra dado por:

$$c_{v,s}^v = \begin{cases} \frac{\mathcal{R}}{M_s} \left(\frac{\theta_{v,s}}{T_{ve}} \right)^2 \frac{1}{[\exp(\theta_{v,s}/T_{ve}) - 1]^2} & \text{si } s \text{ es especie poliatómica} \\ 0 & \text{si } s \text{ es especie atómica o electrón} \end{cases} \quad (2.36)$$

La energía electronica $\varepsilon_{el,s}$ asociada a los electrones ligados de las especies pesadas es modelada según [61, 91, 126]:

$$\varepsilon_{el,s} = \frac{\mathcal{R}}{M_s} \frac{\sum_{i=1}^{imax} g_{i,s} \theta_{i,s}^{el} \exp(-\theta_{i,s}^{el}/T_{ve})}{\sum_{i=1}^{imax} g_{i,s} \exp(-\theta_{i,s}^{el}/T_{ve})} \quad (2.37)$$

donde $g_{i,s}$ representa la degeneración del estado cuántico i . Nótese que la sumatoria que originalmente es infinita, se trunca hasta el nivel de energía $imax$. Este truncamiento se considera adecuado ya que la contribución de los niveles más elevados, y donde el modelo pierde precisión, es despreciable [91]. Los valores de las temperaturas características y degeneración de los niveles electrónicos considerados son extraídos de [67] y reproducidos en la Tabla A.2 del Apéndice.

Luego se deriva el calor específico a volumen constante del modo de energía electrónico mediante:

$$\varepsilon_{el,s} = \frac{\mathcal{R}}{M_s T_{ve}^2} \left\{ \frac{\sum_{i=1}^{imax} g_{i,s} (\theta_{i,s}^{el})^2 \exp(-\theta_{i,s}^{el}/T_{ve})}{\sum_{i=1}^{imax} g_{i,s} \exp(-\theta_{i,s}^{el}/T_{ve})} - \left[\frac{\sum_{i=1}^{imax} g_{i,s} \theta_{i,s}^{el} \exp(-\theta_{i,s}^{el}/T_{ve})}{\sum_{i=1}^{imax} g_{i,s} \exp(-\theta_{i,s}^{el}/T_{ve})} \right]^2 \right\} \quad (2.38)$$

En el caso de los electrones libres, la energía vibracional-electrónica corresponde a la energía traslacional evaluada a la temperatura vibracional-electrónica:

$$\varepsilon_{el,e} = c_{v,e}^t T_{ve} = \frac{3}{2} \frac{\mathcal{R}}{M_e} T_{ve} \quad (2.39)$$

Finalmente entonces, la energía vibracional-electrónica está dada por:

$$\varepsilon_{ve,s} = \begin{cases} \varepsilon_{v,s} + \varepsilon_{el,s} & \text{si } s \text{ es especie pesada} \\ c_{v,e}^t T_{ve} & \text{si } s \text{ es electrón} \end{cases} \quad (2.40)$$

y el calor específico a volumen constante correspondiente es:

$$c_{v,s}^{ve} = \begin{cases} c_{v,s}^v + c_{v,s}^{el} & \text{si } s \text{ es especie pesada} \\ c_{v,e}^t & \text{si } s \text{ es electrón} \end{cases} \quad (2.41)$$

2.3.5 Entalpías específicas

La entalpía específica de la mezcla puede ser escrita como:

$$h = \sum_{s=1}^{ne} c_s h_s \quad (2.42)$$

En el modelo de dos temperaturas la entalpía de la especie s se escribe como la suma de las entalpías de los modos traslacional-rotacional $h_{tr,s}$ y vibracional-electrónico $h_{ve,s}$:

$$h_s = h_{tr,s}(T) + h_{ve,s}(T_{ve}) + h_s^0 \quad (2.43)$$

donde,

$$h_{tr,s} = \begin{cases} \varepsilon_{tr} + \frac{\mathcal{R}}{M_s} T & \text{para } s \neq e \\ 0 & \text{para } s = e \end{cases} \quad (2.44)$$

$$h_{ve,s} = \begin{cases} \varepsilon_{ve,s} & \text{para } s \neq e \\ \varepsilon_{ve,e} + \frac{\mathcal{R}}{M_s} T_{ve} & \text{para } s = e \end{cases} \quad (2.45)$$

2.4 Propiedades de transporte

A temperaturas sobre el orden de los 1000K la comúnmente empleada fórmula de Sutherland para el cálculo de la viscosidad en el aire pierde validez de es siendo necesario recurrir a modelos más elaborados para la obtención de los coeficientes de transporte. Existen dos aspectos principales en el modelado de las propiedades de transporte: por un lado las propiedades referidas a cada una de las especies y por otro lado, las propiedades

de la mezcla de gases. El cómputo de la viscosidad de especies puras depende del tipo de especie considerado. Las fuerzas intermoleculares de corto alcance (valencia y fuerzas químicas) son predominantes en la interacción de especies neutras, especialmente a altas temperaturas. En el caso de especies ionizadas éstas son influenciadas además por fuerzas de largo alcance (electrostáticas). Además, el apantallamiento eléctrico producido por los electrones libres tiene una gran influencia sobre las secciones eficaces de interacción. Por lo tanto, la viscosidad de las especies ionizadas se considera una función tanto de la temperatura como de la densidad de electrones libres.

La viscosidad de una mezcla de gases puede ser obtenida mediante la solución de la ecuación de Boltzmann. Con este fin se utiliza la denominada expansión polinomial de Sonine [158]. La determinación de los coeficientes de esta expansión requiere de la solución de un sistema de ecuaciones igual al número de especies presente en la mezcla. Debido al costo computacional que esto representa, es que se han propuesto métodos simplificados para aproximar el cálculo de la viscosidad en mezcla de gases [10, 66, 165]. En [122] se realiza una comparación en donde se discute la precisión de estos métodos aproximados en comparación con la solución exacta dada por la expansión de Sonine para el cómputo de la viscosidad de aire con 11 especies para el rango de temperaturas entre 200 K y 20000 K. En este trabajo se utiliza el método de cálculo de propiedades de transporte descrito en Gupta [66].

2.4.1 Modelo de viscosidad y conductividad térmica de Gupta

La regla de mezcla introducida por Gupta es una simplificación de la expansión de Chapman-Enskog de primer orden utilizada para calcular las propiedades de transporte a partir de las integrales de colisión [169]. Esta regla es extendida a una mezcla de gases en desequilibrio termodinámico, evaluando las correspondientes integrales de colisión a distintas temperaturas de control. Para las colisiones que sólo involucran especies pesadas la temperatura de control corresponde a la temperatura traslacional-rotacional. Para colisiones que involucran electrones libres, la temperatura de control corresponde a la temperatura vibracional-electrónica. De esta forma el coeficiente de viscosidad de la mezcla es obtenido mediante:

$$\mu = \sum_{s \neq e} \frac{m_s \gamma_s}{\sum_{r \neq e} \gamma_r \Delta_{sr}^{(2)}(T) + \gamma_e \Delta_{se}^{(2)}(T_{ve})} + \frac{m_e \gamma_e}{\sum_r \gamma_r \Delta_{sr}^{(2)}(T_{ve})} \quad (2.46)$$

donde,

$$\gamma_s = \frac{c_s}{M_s} \quad (2.47)$$

es el número de moles de la especie s por unidad de masa de la mezcla y donde

$$m_s = \frac{M_s}{\mathcal{N}_A} \quad (2.48)$$

es la masa de una molécula o átomo de cada especie, siendo \mathcal{N}_A la constante de Avogadro.

El coeficiente de conductividad térmica del modo traslacional para las partículas pesadas se encuentra dado por:

$$\kappa_t = \frac{15}{4} k_B \sum_{s \neq e} \frac{\gamma_s}{\sum_{r \neq e} a_{sr} \gamma_r \Delta_{sr}^{(2)}(T) + 3.54 \gamma_e \Delta_{se}^{(1)}(T_{ve})} \quad (2.49)$$

donde k_B denota la constante de Boltzmann y donde,

$$a_{sr} = 1 + \frac{[1 - (m_s/m_r)][0.45 - 2.54(m_s/m_r)]}{[1 + (m_s/m_r)]^2} \quad (2.50)$$

La expresión para la conductividad térmica del modo completamente excitado rotacional se encuentra dada por:

$$\kappa_{ro} = k_B \sum_{s \neq e} \frac{\gamma_s}{\sum_{r \neq e} \gamma_r \Delta_{sr}^{(1)}(T) + \gamma_e \Delta_{se}^{(1)}(T_{ve})} \quad (2.51)$$

Luego, el coeficiente de conductividad traslacional-rotacional se obtiene a partir de la suma:

$$\kappa_{tr} = \kappa_t + \kappa_{ro} \quad (2.52)$$

La contribución a la conductividad térmica debida a los modos vibracional y electrónico se encuentra dada por:

$$\kappa_{ve} = \frac{k_B}{\mathcal{R}} \sum_{s \neq e} \frac{\gamma_s c_{v,s}^{ve}}{\sum_{r \neq e} \gamma_r \Delta_{sr}^{(1)}(T) + \gamma_e \Delta_{se}^{(1)}(T_{ve})} + \frac{15}{4} k_B \frac{\gamma_e}{\sum_r 1.45 \gamma_r \Delta_{sr}^{(2)}(T_{ve})} \quad (2.53)$$

donde el primer término a la derecha de la anterior expresión denota la contribución de los modos vibracional-electrónico de las especies pesadas, mientras que el segundo término corresponde a la contribución de los electrones libres.

Los términos de colisión introducidos en las anteriores expresiones son evaluados me-

diante:

$$\Delta_{sr}^{(1)}(T) = \frac{8}{3} \left[\frac{2}{\pi \mathcal{R}T} \frac{M_s M_r}{M_s + M_r} \right]^{\frac{1}{2}} 10^{-20} \pi \bar{\Omega}_{sr}^{(1,1)} \quad (2.54)$$

$$\Delta_{sr}^{(2)}(T) = \frac{16}{5} \left[\frac{2}{\pi \mathcal{R}T} \frac{M_s M_r}{M_s + M_r} \right]^{\frac{1}{2}} 10^{-20} \pi \bar{\Omega}_{sr}^{(2,2)} \quad (2.55)$$

en la cual la constante 10^{-20} se introduce para convertir a metros cuadrados las unidades de las integrales de colisión cuya unidad estándar son armstrongs cuadrados (\AA^2).

Las integrales de colisión $\bar{\Omega}_{sr}^{(1,1)}$ y $\bar{\Omega}_{sr}^{(2,2)}$ son evaluadas usando las curvas de ajuste de datos experimentales tabulados en [66], y reproducidos en las Tablas A.3 y A.4 del Apéndice dadas por la expresión:

$$\pi \bar{\Omega}_{sr}^{(1,1)} = \exp(D_{\bar{\Omega}_{sr}^{(1,1)}}) T \left[A_{\bar{\Omega}_{sr}^{(1,1)}} (\ln T)^2 + B_{\bar{\Omega}_{sr}^{(1,1)}} \ln T + C_{\bar{\Omega}_{sr}^{(1,1)}} \right] \quad (2.56)$$

$$\pi \bar{\Omega}_{sr}^{(2,2)} = \exp(D_{\bar{\Omega}_{sr}^{(2,2)}}) T \left[A_{\bar{\Omega}_{sr}^{(2,2)}} (\ln T)^2 + B_{\bar{\Omega}_{sr}^{(2,2)}} \ln T + C_{\bar{\Omega}_{sr}^{(2,2)}} \right] \quad (2.57)$$

Para las colisiones electrón–ión, ión–ión y electrón–electrón, los valores tabulados brindan la integrales de colisión evaluadas a una presión electrónica dada por

$$p_e = p_{em} = 0.0975 \left(\frac{T}{10^3} \right)^4 \quad (2.58)$$

Las integrales de colisión a otros valores de presión electrónica son obtenidos mediante la expresión:

$$\frac{\pi \bar{\Omega}_{sr}^{(l,m)}(p_e)}{\pi \bar{\Omega}_{sr}^{(l,m)}(p_{em})} = \frac{1}{2} \ln \left[2.09 \times 10^{-2} \left(\frac{T}{1000 p_{e,\text{atm}}^{1/4}} \right)^4 + 1.52 \left(\frac{T}{1000 p_{e,\text{atm}}^{1/4}} \right)^{8/3} \right] \quad (2.59)$$

en donde $p_{e,\text{atm}}$ es la presión electrónica expresada en atmósferas.

2.4.2 Difusión de masa

El flujo de masa por difusión \mathbf{J}_s de la especie s que se introdujo en la ecuación de conservación de masa de las especies (2.7) es modelado ignorando la difusión debida a gradientes térmicos y de presión usualmente despreciables en problemas aerodinámicos

[126] mediante la ley de difusión de Fick:

$$\mathbf{J}_s = -\rho D_s \nabla c_s \quad (2.60)$$

Esta expresión es obtenida a partir de considerar la extensión de la ley de difusión de Fick para un sistema binario a sistemas multiespecies, introduciendo el denominado *coeficiente efectivo de difusión* D_s [122]. El coeficiente de difusión efectivo D_s es obtenido a partir de [56]:

$$D_s = \frac{M_s \left(\sum_r \gamma_r \right)^2 (1 - M_s \gamma_s)}{\sum_{r \neq s} (\gamma_r / D_{sr})} \quad (2.61)$$

donde el coeficiente de difusión binaria D_{sr} es evaluado mediante [56]:

$$D_{sr}(T) = \frac{k_B T}{p \bar{\Omega}_{sr}^{(1,1)}(T)} \quad (2.62)$$

Esta última expresión se evalúa a la temperatura traslacional-rotacional T para interacciones entre partículas pesadas y a la temperatura vibracional-electrónica T_{ve} para interacciones que involucren electrones.

En [145] se introduce la siguiente modificación consistente de los flujos de difusión para forzar la satisfacción de nulidad de la suma de estos y evitar tal como se discutió en la Sección 2.2.1 la creación o destrucción de masa en la mezcla global:

$$\mathbf{J}_s = -\rho D_s \nabla c_s + c_s \sum_{r \neq e} \rho D_r \nabla c_s \quad (2.63)$$

La difusión de los iones y electrones se encuentra relacionada a través del campo eléctrico inducido por la presencia del gradiente de presión electrónica [131]. En un gas parcialmente ionizado donde la corriente neta es nula, este efecto es modelado mediante la modificación del coeficiente de difusión efectiva para los electrones D_e utilizando la aproximación de difusión ambipolar propuesta en [56] en el cual el coeficiente de difusión efectivo de los iones es reemplazado por el coeficiente de difusión ambipolar $D_{s=ión}^a$ dado por:

$$D_{s=ión}^a = 2D_{s=ión} \quad (2.64)$$

Dentro de esta aproximación, el coeficiente de difusión efectiva de los electrones D_e es obtenido igualando la velocidad de difusión de los electrones con la velocidad de difusión

de los iones. Esto es equivalente a la relación:

$$D_e = M_e \frac{\sum_{s=\text{iones}} D_s^a \gamma_s}{\sum_{s=\text{iones}} M_s \gamma_s} \quad (2.65)$$

2.5 Modelos de relajación

2.5.1 Intercambio de energía vibracional-traslacional

El intercambio de energía entre el modo vibracional de las especies poliatómicas y los modos traslacional-rotacional de las partículas pesadas es evaluado de acuerdo al modelo de Landau y Teller [158]:

$$\Omega_{v-tr} = \sum_{s=\text{mol.}} \rho_s \frac{\varepsilon_{v,s}(T) - \varepsilon_{v,s}(T_{ve})}{\tau_s} \quad (2.66)$$

donde τ_s representa el tiempo promedio molar de relajación del intercambio de energía dado por:

$$\tau_s = \frac{\sum_{r \neq e} x_r}{\sum_{r \neq e} \frac{x_r}{\tau_{sr}}} \quad (2.67)$$

en donde x_r denota la fracción molar de la especie r . El tiempo de relajación interespecies τ_{sr} es obtenido mediante la expresión semi-empírica introducida por Millikan y White [104], válida para un rango de temperaturas entre 300K y 9000K:

$$\tau_{sr}^{MW} = \frac{101325}{p} \exp\left[0.0016 \mu_{sr}^{1/2} \theta_{v,s}^{4/3} \left(T^{-1/3} - 0.015 \mu_{sr}^{1/4}\right)\right] \quad (2.68)$$

donde la *masa molar reducida* μ_{sr} expresada en (kg/kmol) se encuentra dada por:

$$\mu_{sr} = 1000 \frac{M_s M_r}{M_s + M_r} \quad (2.69)$$

A temperaturas suficientemente elevadas ($\gtrsim 8000\text{K}$) el modelo de Millikan y White subestima el tiempo de relajación inter-especie debido a que en estas condiciones sobreestima la sección eficaz de las colisiones. Park [125] propone introducir una corrección en la forma:

$$\tau_s = \tau_s^{MW} + \tau_s^P \quad (2.70)$$

donde τ_s^{MW} es el tiempo de relajación molar utilizando el modelo de Millikan y White para la relajación interespecie y donde el tiempo de relajación adicional de Park τ_s^P se encuentra dado por:

$$\tau_s^P = \frac{1}{\sigma_s \bar{u}_s n_s} \quad (2.71)$$

donde n_s es la densidad numérica, \bar{u}_s es la velocidad promedio molecular de las especies dada por:

$$\bar{u}_s = \sqrt{\frac{8\mathcal{R}T}{\pi M_s}} \quad (2.72)$$

y donde σ_s es la sección eficaz de colisión límite, que se evalúa mediante [125]:

$$\sigma_s = 10^{-21} \left(\frac{50000}{T} \right)^2 \quad (2.73)$$

Tal como es sugerido por [56] el término de energía vibracional puede ser simplificado asumiendo las siguientes aproximaciones:

$$\varepsilon_{v,s}(T) - \varepsilon_{v,s}(T_{ve}) \approx c_{v,s}^v (T - T_{ve}) \quad (2.74)$$

$$\sum_{s=mol.} \frac{\rho_s c_{v,s}^v}{\tau_s} \approx \frac{\sum_{s=mol.} \rho_s c_{v,s}^v}{\bar{\tau}_v} \quad (2.75)$$

en donde

$$\bar{\tau}_v = \frac{\sum_{s=mol.} \rho_s / M_s}{\sum_{s=mol.} \rho_s / (M_s \tau_s)} \quad (2.76)$$

con lo que finalmente el término de relajación traslacional-vibracional se obtiene mediante:

$$\Omega_{v-tr} = \frac{\sum_{s=mol.} \rho_s c_{v,s}^v}{\bar{\tau}_v} (T - T_{ve}) \quad (2.77)$$

2.5.2 Intercambio de energía electrónica-traslacional

La transferencia de energía entre las partículas pesadas y los electrones libres por colisiones es evaluada mediante la expresión derivada por Appleton y Bray [9]:

$$\Omega_{el-tr} = 3\mathcal{R}\rho_e (T - T_{ve}) \sqrt{\frac{8\mathcal{R}T_{ve}}{\pi M_e}} \sum_{j \neq e} \frac{\rho_j \mathcal{N}_A}{M_j^2} \sigma_{ej} \quad (2.78)$$

donde σ_{ej} es la sección eficaz de la interacción electrón-partícula. Este valor es asumido constante e igual a $10^{-20}m^2$ para colisiones electrón-partícula neutra. En el caso de interacciones electrón-ión la sección eficaz se obtiene de [9, 40]:

$$\sigma_{e,iones} = \frac{8\pi}{27} \frac{e^4}{k_B^2 T_{ve}^2} \ln \left(1 + \frac{9k_B^3 T_{ve}^3}{4\pi n_e e^6} \right) \quad (2.79)$$

donde e representa la carga eléctrica elemental, n_e la densidad electrónica y k_B la constante de Boltzmann evaluadas en unidades CGS.

2.5.3 Cambio de la energía vibracional-electrónica por reacciones químicas

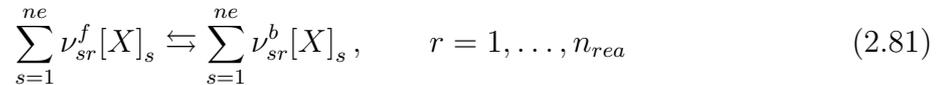
Cuando una molécula se disocia su energía vibracional se pierde y al contrario, en reacciones de recombinación cierta energía es transferida al modo vibracional de la molécula formada. Estos dos efectos deben ser considerados en el término fuente de la energía vibracional-electrónica. En este trabajo se emplea el modelo no preferencial, donde la cantidad de energía transferida en reacciones de disociación o recombinación se encuentra dada por:

$$\Omega_{v,dis} = \sum_{s=mol.} \dot{\omega}_s \varepsilon_{ve,s} \quad (2.80)$$

Esta aproximación implica que las moléculas que se disocian generalmente se encuentran en un estado vibracional superior al promedio, pero que necesariamente no precisa ser del orden de magnitud de la energía de disociación [56].

2.6 Modelo de cinética química

La modelización de los procesos de cinética química requiere en primera instancia la determinación de un conjunto de n_{rea} reacciones químicas elementales para las ne especies consideradas en el modelo. Estas reacciones pueden escribirse en la forma genérica:



donde $[X]_s$ denota el símbolo químico de la especie s y donde ν_{sr}^f y ν_{sr}^b representan los denominados coeficientes estequiométricos molares de los reactantes y productos respectivamente, correspondientes a la especie s en la reacción r .

Dada entonces una reacción química r escrita en la forma (2.81), la tasa de cambio $\dot{\omega}_{s,r}$

de la especie s producida por ésta se escribe en la forma general:

$$\dot{\omega}_{s,r} = M_s (\nu_{sr}^b - \nu_{sr}^f) \left[k_{f,r} \prod_{i=1}^{ne} \left(\frac{\rho_i}{M_i} \right)^{\nu_{ir}^f} - k_{b,r} \prod_{i=1}^{ne} \left(\frac{\rho_i}{M_i} \right)^{\nu_{ir}^b} \right] \quad (2.82)$$

en donde $k_{f,r}$ y $k_{b,r}$ son los denominados *coeficientes de velocidad de reacción* en el sentido directo e inverso de la misma.

En el caso mas general de reacciones donde participan *especies catalíticas*, la tasa de cambio debe evaluarse a partir de:

$$\dot{\omega}_{s,r} = \Xi_r (\nu_{sr}^b - \nu_{sr}^f) \left[k_{f,r} \prod_{i=1}^{ne} \left(\frac{\rho_i}{M_i} \right)^{\nu_{ir}^f} - k_{b,r} \prod_{i=1}^{ne} \left(\frac{\rho_i}{M_i} \right)^{\nu_{ir}^b} \right] \quad (2.83)$$

donde Ξ_r representa la contribución de las especies catalíticas para las reacciones de disociación o recombinación r :

$$\Xi_r = \sum_{s=1}^{ne} \xi_{r,s} \frac{\rho_s}{M_s} \quad (2.84)$$

y en donde $\xi_{r,s}$ es la eficiencia catalítica de la especie s en la reacción r . De esta forma cualquier especie puede ser incluida (o excluída) como catalítica en la reacción estableciendo el correspondiente valor de $\xi_{r,s}$.

Realizando la sumatoria de la Ec. (2.83) sobre todas las reacciones se obtiene entonces la expresión de la tasa de cambio de masa por unidad de volumen de la especie s debido a las reacciones químicas $\dot{\omega}_s$:

$$\dot{\omega}_s = M_s \sum_{r=1}^{n_{rea}} \Xi_r (\nu_{sr}^b - \nu_{sr}^f) \left[k_{f,r} \prod_{i=1}^{ne} \left(\frac{\rho_i}{M_i} \right)^{\nu_{ir}^f} - k_{b,r} \prod_{i=1}^{ne} \left(\frac{\rho_i}{M_i} \right)^{\nu_{ir}^b} \right] \quad (2.85)$$

2.6.1 Coeficientes de velocidad de reacción

El coeficiente de reacción directa $k_{f,r}$ introducido en (2.83) es evaluado a través de la correlación experimental conocida como ecuación de Arrhenius:

$$k_{f,r}(T_{f,r}) = C_{f,r} T_{f,r}^{N_{f,r}} \exp(-\Theta_{f,r}/T_{f,r}) \quad (2.86)$$

donde $T_{f,r}$ es la denominada temperatura de control de la reacción r en el sentido directo. Los parámetros $C_{f,r}$, $N_{f,r}$ y la temperatura de activación $\Theta_{f,r}$ son determinados experimentalmente para cada reacción considerada dentro del modelo cinético. Particularmente, la temperatura de activación $\Theta_{f,r}$ representa el nivel de energía que debe ser alcanzado

para la activación de la correspondiente reacción.

La ecuación de Arrhenius puede ser definida en forma análoga para el caso del coeficiente de reacción en el sentido inverso $k_{b,r}$. No obstante a menudo es difícil determinar con precisión los parámetros de ambas tasas de reacción en forma experimental. Es por ello que se recurre a la ecuación de Arrhenius para la dirección directa y luego se utiliza la relación en las condiciones de equilibrio químico que existe entre ambas tasas dada por:

$$K_{eq,r}(T) = \frac{k_{f,r}(T)}{k_{b,r}(T)} \quad (2.87)$$

donde $K_{eq,r}$ es la denominada *constante de equilibrio* de la reacción r , la cual puede ser establecida mediante métodos analíticos, reduciendo por lo tanto las incertezas en el modelo.

En el modelo cinético del aire de Park [126] se utiliza el siguiente polinomio de ajuste de los valores de la constante de equilibrio analíticos obtenidos utilizando métodos de mecánica estadística:

$$K_{eq,r}(T) = \exp \left[\frac{A_{1,r}}{Z} + A_{2,r} + A_{3,r} \ln Z + A_{4,r}Z + A_{5,r}Z^2 \right], \quad Z = 10000/T \quad (2.88)$$

Por otra parte en el modelo cinético de Gupta [66] y utilizando similar metodología se propone la curva de ajuste:

$$K_{eq,r}(T) = \exp \left[A_r Z^5 + B_r Z^4 + C_r Z^3 + D_r Z^2 + E_r Z + F_r \right], \quad Z = \ln(10000/T) \quad (2.89)$$

2.6.2 Acoplamiento cinético-termodinámico

Los modos de energía en desequilibrio termodinámico modifican los procesos de cinética química haciendo necesaria la modelización de este efecto en la obtención de las velocidades de reacción. En particular, en el modelo conocido como de disociación preferencial, se considera que las moléculas que se encuentra más excitadas en el modo vibracional presentan preferencia a la disociación. No obstante en condiciones de alta energía, y debido que las moléculas a cualquier nivel vibracional pueden presentar tendencia a disociarse, un modelo de disociación no preferencial es considerado una mejor aproximación. Basado en datos experimentales de las velocidades de reacción Park [126] modela el acoplamiento cinético-termodinámico mediante la evaluación de las velocidades de reacción a una temperatura de control de acuerdo al tipo de reacción considerada. En este modelo, por ejemplo, para las reacciones de disociación los coeficientes de velocidad de la reacción en el sentido

directo son evaluados a una temperatura T_f dada en forma general por:

$$T_f = T^a T_{ve}^{a-1} \quad (2.90)$$

donde un valor de a entre 0.5 y 0.7 es sugerido. Esta expresión es empírica y brinda resultados que presentan buena concordancia con datos experimentales del flujo de energía por radiación [124] obtenidos a partir de la solución numérica del campo de movimiento. Modelos más sofisticados del acoplamiento vibracional-cinético que no son tratados en este trabajo, lo constituyen por ejemplo el modelo de Treanor–Marrone [97] o de Knab [84]. Una excelente revisión de estos y otros modelos lo constituye el trabajo de [117].

2.6.3 Modelo cinético del aire

En este trabajo se tratarán problemas de reentrada atmosférica terrestre en donde el gas considerado es aire. A temperatura ambiente el aire puede ser asumido como un gas compuesto únicamente por un 79 % de nitrógeno N_2 y un 21 % de oxígeno O_2 en volumen, ignorando otros componentes menores. A condiciones de presión estándar, el oxígeno es la primer molécula que comienza a disociarse en el rango de temperaturas 2000-4000 K. En la reacción entre N_2 y oxígeno atómico O, resulta el óxido nítrico NO el cual comienza a aparecer a temperaturas mayores a 2000 K. A alrededor de 4000 K comienza a formarse el ion NO^+ y para temperaturas mayores a 6000 K, O^+ y N^+ . Condiciones de presión menores a la atmosférica reducen los niveles de temperatura de disociación, por ejemplo el oxígeno se encuentra completamente disociado a 3000 K a una presión de 100 Pa y a 5000 K a 10000 Pa. En cualquier caso dependiendo del rango de presiones y temperaturas alcanzados en el dominio del problema se pueden considerar tres tipos principales de modelos cinéticos para el aire. El primero, en el cual no se considera ionización comprende el modelo de 5 especies: $\{N, O, N_2, NO, O_2\}$. El segundo considera sólo la ionización del NO con lo que se obtiene un modelo de 7 especies: $\{N, O, N_2, NO, O_2, NO^+, e^-\}$. En el modelo más completo cuando se consideran condiciones de aire parcialmente ionizado se utiliza un conjunto de 11 especies: $\{N, O, N_2, NO, O_2, N^+, O^+, N_2^+, NO^+, O_2^+, e^-\}$ [126]. En este trabajo el caso más general tratado corresponde al modelo de 7 especies. Dentro de este modelo, se considera un conjunto de 6 reacciones que comprenden reacciones de disociación de las moléculas por colisión, reacciones de Zeldovich que son responsables de la producción de NO y una reacción de ionización por asociación de nitrógeno y oxígeno atómico tal como se esquematiza en la Tabla 2.1, y en la cual M corresponde a cualquier especie de la mezcla.

Se han utilizado dos conjuntos de parámetros del modelo cinético para la obtención

Tabla 2.1: Reacciones químicas. Modelo de aire de 7 especies.

Reacciones de disociación térmica
$O_2 + M \rightleftharpoons O + O + M$
$N_2 + M \rightleftharpoons N + N + M$
$NO + M \rightleftharpoons N + O + M$
Reacciones de intercambio de NO (Zeldovich)
$O_2 + N \rightleftharpoons NO + O$
$N_2 + O \rightleftharpoons NO + N$
Reacción de ionización asociativa
$N + O \rightleftharpoons NO^+ + e^-$

de las velocidades de reacción y la definición de la temperatura de control. El primer modelo corresponde al de Park [126, 127, 128] cuyos parámetros se presentan en la Sección A.4.1 del Apéndice. El segundo modelo corresponde al de Gupta [66], cuyos parámetros se presentan en la Sección A.4.2 del Apéndice.

3.1 Introducción

En este capítulo se presenta la metodología empleada en la discretización numérica del sistema de ecuaciones introducido en el capítulo anterior. La discusión comienza con la formulación general de la discretización espacial del sistema que es obtenida mediante el método de volúmenes finitos. Se discute luego la elección del método de evaluación numérica de los flujos convectivos y flujos difusivos, así como el procedimiento de obtención de segundo orden espacial, todo ello en el marco de un esquema general que es transparente a la topología de los elementos de la malla. La integración temporal del sistema es realizada mediante una metodología totalmente implícita orientada principalmente a la obtención de soluciones de tipo estacionario. Se discute a su vez la solución del sistema lineal de ecuaciones, resultante en cada paso de tiempo, mediante métodos de tipo iterativo y la obtención de la matriz jacobiana del sistema linealizado. Finalmente se brindan detalles sobre la implementación de las condiciones de borde en el marco de un esquema de volúmenes finitos centrado en las celdas.

3.2 Discretización en volúmenes finitos

El sistema de ecuaciones en derivadas parciales presentado en el capítulo anterior puede ser escrito tal como ya se ha visto como un sistema no lineal de convección-difusión-reacción en la forma general:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \sum_{i=1}^d \frac{\partial \mathbf{f}_i(\mathbf{u})}{\partial x_i} - \sum_{i=1}^d \frac{\partial \mathbf{f}_i^v(\mathbf{u}, \nabla \mathbf{u})}{\partial x_i} = \mathbf{s}(\mathbf{u}, \nabla \mathbf{u}) \quad (3.1)$$

donde $t \in \mathbb{R}_0^+$ denota el tiempo y donde $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_d)^T \in \mathbb{R}^d$ representa las coordenadas de un punto del dominio en un sistema cartesiano en un espacio euclídeo. La función vectorial $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \in \mathbb{R}^M$ es el denominado *vector de estado*. Las componentes del vector de estado representan magnitudes físicas tales como la masa, el momento o la energía las cuales se encuentran gobernadas por leyes físicas de conservación. Las funciones vectoriales $\mathbf{f}_i(\mathbf{u})$, $\mathbf{f}_i^v(\mathbf{u}, \nabla \mathbf{u})$ y $\mathbf{s}(\mathbf{u})$ representan respectivamente los *flujos convectivos*, *flujos difusivos* y *términos fuente* del sistema.

Sea ahora la forma integral de (3.1) en un dominio $\Omega \in \mathbb{R}^d$ delimitado por un contorno $\partial\Omega$ escrita como:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \mathbf{u} d\mathcal{V} + \int_{\Omega} \nabla \cdot \mathbf{F}(\mathbf{u}) d\mathcal{V} = \int_{\Omega} \nabla \cdot \mathbf{F}^v(\mathbf{u}, \nabla \mathbf{u}) d\mathcal{V} + \int_{\Omega} \mathbf{s}(\mathbf{u}, \nabla \mathbf{u}) d\mathcal{V} \quad (3.2)$$

donde \mathbf{F} y \mathbf{F}^v son matrices cuyas i -ésima columna son las funciones \mathbf{f}_i y \mathbf{f}_i^v respectivamente.

Sea entonces una discretización del dominio Ω mediante un conjunto finito de N *volúmenes de control* o *celdas* Ω_j no solapadas de forma tal que,

$$\Omega = \bigcup_{i=1}^N \Omega_j, \quad \Omega_i \cap \Omega_j = \emptyset \quad \forall \Omega_i, \Omega_j : i \neq j \quad (3.3)$$

Asumiendo que las celdas son invariantes con respecto al tiempo se escribe entonces la forma integral (3.2) en cada celda Ω_i como:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega_i} \mathbf{u} d\mathcal{V} + \oint_{\partial\Omega_i} \mathbf{F}(\mathbf{u}) \cdot \mathbf{nd}\mathcal{A} = \oint_{\partial\Omega_i} \mathbf{F}^v(\mathbf{u}, \nabla \mathbf{u}) \cdot \mathbf{nd}\mathcal{A} + \int_{\Omega_i} \mathbf{s}(\mathbf{u}, \nabla \mathbf{u}) d\mathcal{V} \quad (3.4)$$

donde $\partial\Omega_i$ denota el contorno de la celda Ω_i .

Se define ahora el valor promedio del vector de estado $\bar{\mathbf{u}}_i$ en cada celda como:

$$\bar{\mathbf{u}}_i(t) = \frac{1}{\mathcal{V}_{\Omega_i}} \int_{\Omega_i} \mathbf{u}(\mathbf{r}, t) d\mathcal{V} \quad (3.5)$$

donde \mathcal{V}_{Ω_i} denota el volumen de la celda Ω_i .

Considerando que las celdas son politopos convexos del espacio euclídeo d -dimensional (polihedros en 3 dimensiones y polígonos en 2 dimensiones), cuyo contorno consiste en n_f caras planas, y utilizando la definición del valor promedio del vector de estado, la Ec. (3.4) se escribe como:

$$\mathcal{V}_{\Omega_i} \frac{\partial \bar{\mathbf{u}}_i}{\partial t} + \sum_{j=1}^{n_f \Omega_i} \oint_{\partial\Omega_{i,j}} \mathbf{F}(\mathbf{u}) \cdot \mathbf{nd}\mathcal{A} = \sum_{j=1}^{n_f \Omega_i} \oint_{\partial\Omega_{i,j}} \mathbf{F}^v(\mathbf{u}, \nabla \mathbf{u}) \cdot \mathbf{nd}\mathcal{A} + \int_{\Omega_i} \mathbf{s}(\mathbf{u}, \nabla \mathbf{u}) d\mathcal{V} \quad (3.6)$$

Las integrales del flujo en (3.6) son aproximadas mediante una cuadratura gaussiana mientras que el término fuente es evaluado en el valor promedio, de forma que se obtiene:

$$\mathcal{V}_{\Omega_i} \frac{\partial \bar{\mathbf{u}}_i}{\partial t} + \sum_{j=1}^{n_{f\Omega_i}} |\mathcal{A}_{ij}| \sum_{k=1}^{n_{GP}} \omega_k [\mathbf{F}(\mathbf{u}) - \mathbf{F}^v(\mathbf{u}, \nabla \mathbf{u})]_{\mathbf{r}_k} \cdot \mathbf{n}_{ij} = \mathcal{V}_{\Omega_i} \mathbf{s}(\bar{\mathbf{u}}_i, \nabla \bar{\mathbf{u}}_i) \quad (3.7)$$

donde $|\mathcal{A}_{ij}|$ denota el área de la cara que separa las celdas i y j , \mathbf{n}_{ij} denota el versor normal a la misma en la dirección saliente de la celda i y donde ω_k y \mathbf{r}_k denotan los pesos y las coordenadas de los puntos de cuadratura sobre la cara k respectivamente.

Debido a que en este trabajo se tratan únicamente esquemas de precisión espacial de segundo orden, es suficiente emplear la regla de cuadratura de orden uno, es decir la regla del punto medio, con lo que finalmente se tiene:

$$\mathcal{V}_{\Omega_i} \frac{\partial \bar{\mathbf{u}}_i}{\partial t} + \sum_{j=1}^{n_{f\Omega_i}} |\mathcal{A}_{ij}| [\mathbf{F}(\mathbf{u}) - \mathbf{F}^v(\mathbf{u}, \nabla \mathbf{u})]_{\mathbf{r}_{ij}} \cdot \mathbf{n}_{ij} = \mathcal{V}_{\Omega_i} \mathbf{s}(\bar{\mathbf{u}}_i, \nabla \bar{\mathbf{u}}_i) \quad (3.8)$$

donde \mathbf{r}_{ij} denota el centroide de la cara que separa las celdas Ω_i y Ω_j .

3.2.1 Definición de los volúmenes de control

Existen básicamente dos métodos para la definición de los volúmenes de control. En el primer método denominado *centrado en las celdas*, el sistema discreto (3.6) se formula definiendo valores promedio del vector de estado en cada celda de la malla *primaria*. Las celdas de la malla primaria, utilizan usualmente una discretización compuesta por triángulos y cuadriláteros en dominios bidimensionales y tetraedros, prismas, pirámides y hexaedros en tres dimensiones. A partir de los vértices de la malla primaria es posible definir la discretización en términos de la malla *dual* donde cada celda de ésta se encuentra asociada con un vértice de la malla primaria en lo que se conoce como método *centrado en los vértices*. La definición de los volúmenes de control puede realizarse de acuerdo a diferentes criterios siendo el método de la mediana dual uno de los más comúnmente empleados [22]. No existe aún un consenso en cuál es la mejor estrategia. A manera ilustrativa un esquema centrado en las celdas brinda un promedio de seis veces más grados de libertad en mallas de tetraedros que en un esquema basado en vértices. Si bien esto sugeriría una mayor precisión del método centrado en las celdas, el método basado en vértices realiza una evaluación de los flujos del residuo dos veces mayor en número para una malla de tetraedros lo cual equipararía la primer supuesta desventaja [15]. En este trabajo se utiliza un esquema centrado en las celdas debido a que se considera que permite una implementación más directa y un

tratamiento más claro en las condiciones de borde, además de ser el método de elección en esquemas de flujo hipersónico.

3.3 Discretización de los flujos convectivos

Dada las características particulares que presentan los flujos en el régimen hipersónico, la selección de una adecuada discretización numérica de los términos convectivos es crucial tanto para la precisión de la solución obtenida como para la robustez del esquema. Esquemas de tipo *upwind* son especialmente preferidos debido a su capacidad de incorporar en la discretización numérica la dirección de propagación de la información física del flujo dadas por las ondas características del problema local de Riemann. Entre los esquemas *upwind* se encuentran básicamente dos grandes familias: esquemas de tipo *flux difference splitting* (FDS) [70, 120, 134] y esquemas de tipo *flux vector splitting* (FVS) [93, 143, 153]. Entre los esquemas FDS, el solver de Riemann de Roe [134] goza de una gran popularidad ya que incorpora información de todas las ondas características, lo que le confiere una alta precisión en la captura de discontinuidades de contacto y por ende en la resolución de la capa límite. No obstante, en flujos hipersónicos el esquema de Roe presenta diversas inestabilidades tales como la convergencia a soluciones no físicas en la patología conocida como *carbuncle phenomena* [130], o la falta de robustez en expansiones fuertes en donde puede incurrir en la aparición de densidades negativas [46]. La introducción de viscosidad artificial mediante técnicas de corrección de entropía (*entropy fix*) [69] permiten evitar en cierta medida estas inestabilidades, pero la mayor disipación introducida en zonas sensibles de la solución como la capa límite, impacta negativamente en el cálculo de propiedades de interés en flujos hipersónicos tales como la transferencia de calor sobre la pared sólida [83]. Si bien los esquemas de tipo FVS no presentan estas patologías, introducen mayor disipación artificial en zonas de altos gradientes, por lo que deben ser modificados en estas regiones para obtener soluciones de precisión aceptable, mediante técnicas que son dependientes tanto del problema a resolver como de la geometría de la malla [42].

Basados en el esquema FVS de van Leer [153], Liou y Steffen introdujeron en [93] la familia de esquemas denominados *advection upstream splitting methods* (AUSM), los cuales buscan combinar tanto las ventajas de precisión de los esquemas FDS con la robustez de los esquemas FVS. Desde su aparición diversas mejoras fueron introducidas en los esquemas AUSM, las cuales contribuyeron a la eliminación de la aparición del *carbuncle phenomena* (AUSM+) [105], la reducción de oscilaciones detrás de ondas de choque y regiones cercanas a la pared y la preservación de la entalpía total (AUSMPW) [80], el aumento en la

resolución de discontinuidades no alineadas con la malla y la eliminación de expansiones no físicas (AUSMPW+) [79], y la solución precisa de flujos con regiones de Mach del rango subsónico al hipersónico (AUSM+up) [92]. En [83], se realiza una evaluación exhaustiva tanto de los flujos de la familia AUSM como de los flujos de tipo FDS y FVS, en el cual se concluye que las propiedades de resolución de capa límite y conservación de la entalpía total son cruciales para el cómputo preciso de la transferencia de calor sobre superficies en flujos hipersónicos, y en las cuales los flujos de la familia AUSM presentan ventaja sobre los flujos FDS y FVS los cuales en ninguna de las variantes evaluadas satisfacen ambas propiedades en forma simultánea. Otra característica saliente de los esquemas AUSM es que pueden ser extendidos en forma directa cuando son consideradas mezcla de gases reactivos en no equilibrio termoquímico, a diferencia de por ejemplo el esquema de Roe, en donde la definición del flujo numérico pierde unicidad bajo estas condiciones y en donde existen una variedad de técnicas propuestas para realizar dicha extensión [94]. Debido a las características mencionadas, los esquemas de tipo AUSM gozan en la actualidad de una amplia popularidad en el cómputo de flujos hipersónicos [108]. En este trabajo se utiliza uno de los más recientes esquemas pertenecientes a la familia AUSM, el esquema *Simple Low Dissipation AUSM* (SLAU) [142] el cual es una mejora del flujo AUSM+up para toda velocidad, que posee las mismas ventajas de éste, con la diferencia particular de no presentar dependencia de parámetros específicos del problema, tal como el número de Mach de la corriente libre necesario en la formulación del esquema AUSM+up.

3.3.1 Esquema SLAU

Denotando mediante \mathbf{u}_L y \mathbf{u}_R los vectores de estado a la izquierda y derecha de la interface entre las celdas Ω_i y Ω_j , los términos del flujo numérico convectivo del esquema SLAU extendido al sistema de mezcla de gases reactivos se escriben mediante [142]:

$$\mathbf{F}(\mathbf{u}) \cdot \mathbf{n}_{ij} = \Phi(\mathbf{u}_L, \mathbf{u}_R, \mathbf{n}_{ij}) = \frac{\dot{m} + |\dot{m}|}{2} \mathbf{w}_L + \frac{\dot{m} - |\dot{m}|}{2} \mathbf{w}_R + \tilde{p} \mathbf{N}_{ij} \quad (3.9)$$

donde para el caso general de no equilibrio termoquímico,

$$\mathbf{w} = (c_s, \mathbf{v}, H, \epsilon_{ve}/\rho)^T, \quad \mathbf{N} = (0_s, \mathbf{n}, 0, 0)^T \quad (3.10)$$

El flujo de presión \tilde{p} se encuentra dado por:

$$\tilde{p} = \frac{p_L + p_R}{2} + \frac{\beta_p^+|_{\alpha=0} - \beta_p^-|_{\alpha=0}}{2} (p_L - p_R) + (1 - \chi) \left(\beta_p^+|_{\alpha=0} + \beta_p^-|_{\alpha=0} - 1 \right) \frac{p_L + p_R}{2} \quad (3.11)$$

donde β^\pm se define en forma similar al flujo de Van-Leer

$$\beta^\pm = \begin{cases} \frac{1}{4}(2 \mp M^\pm)(M^\pm \pm 1)^2 \pm \alpha M^\pm (M^{\pm 2} - 1)^2, & \text{si } |M^\pm| < 1 \\ \frac{1}{2}[1 \pm \text{sgn}(M^\pm)], & \text{si } |M^\pm| \geq 1 \end{cases} \quad (3.12)$$

en la cual “+” y “-” denotan los estados (L) y (R) respectivamente. El número de Mach se define de acuerdo a la componente normal de la velocidad en la interface

$$M = \frac{V_n}{a_{\frac{1}{2}}} = \frac{\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}}{a_{\frac{1}{2}}} \quad (3.13)$$

La función $(1 - \chi)$ se emplea como un factor que escala el tercer término de (3.11) en función del número de Mach,

$$\chi = (1 - \widehat{M})^2 \in [0,1] \quad (3.14)$$

$$\widehat{M} = \min\left(1, \frac{1}{a_{\frac{1}{2}}} \sqrt{\frac{\|\mathbf{v}_L\|^2 + \|\mathbf{v}_R\|^2}{2}}\right) \quad (3.15)$$

La velocidad del sonido en la interface $a_{\frac{1}{2}}$ se define simplemente como:

$$a_{\frac{1}{2}} = \frac{a_L + a_R}{2} \quad (3.16)$$

La velocidad del sonido se obtiene en la forma usual

$$a = \sqrt{\gamma \frac{p}{\rho}} \quad (3.17)$$

Para un gas calórico perfecto, γ es el coeficiente politrópico constante del gas. Para el caso general de flujos en no equilibrio termoquímico se tiene la relación [95]:

$$\gamma = \kappa - 1 \quad (3.18)$$

en donde,

$$\kappa = \frac{\sum_s \rho_s R_s}{\sum_s \rho_s c_{v,s}^{tr}} \quad (3.19)$$

Finalmente el flujo convectivo por transporte de masa se obtiene de:

$$\dot{m} = \frac{1}{2} \left\{ \rho_L \left(V_{n,L} + |\bar{V}_n|^+ \right) + \rho_R \left(V_{n,R} - |\bar{V}_n|^+ \right) - \frac{\chi}{a_{\frac{1}{2}}} (p_R - p_L) \right\} \quad (3.20)$$

donde,

$$|\bar{V}_n|^+ = (1 - g) |\bar{V}_n| + g |\bar{V}_{n,L}|, \quad |\bar{V}_n|^+ = (1 - g) |\bar{V}_n| + g |\bar{V}_{n,R}| \quad (3.21)$$

$$|\bar{V}_n| = \frac{\rho_L |\bar{V}_{n,L}| + \rho_R |\bar{V}_{n,R}|}{\rho_L + \rho_R} \quad (3.22)$$

$$g = - \max[\min(M_L, 0), -1] \cdot \min[\max(M_R, 0), 1] \in [0, 1] \quad (3.23)$$

3.4 Extensión a segundo orden

En una aproximación de primer orden los estados utilizados a la izquierda y derecha de la interface en la evaluación numérica de los términos convectivos corresponden a los valores promedio en las celdas adyacentes a la interface. Es decir, utilizando la notación de la sección anterior:

$$\mathbf{u}_{ij}^L = \mathbf{u}_i, \quad \mathbf{u}_{ij}^R = \mathbf{u}_j \quad (3.24)$$

Un esquema general de segundo orden asume que la solución varía linealmente en el interior de cada celda. Partiendo de la solución promediada en cada celda, los flujos convectivos son evaluados a partir de la reconstrucción lineal:

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}_q) = \mathbf{u}_i + \varrho_i [\nabla \mathbf{u}_i \cdot (\mathbf{r}_q - \mathbf{r}_i)] \quad (3.25)$$

donde \mathbf{r}_q denota la posición del punto de cuadratura sobre la cara, y \mathbf{r}_i el centroide de la celda i . $\nabla \mathbf{u}_i$ denota el gradiente de la solución en la celda y ϱ_i es la denominada *función limitadora* necesaria para evitar la ocurrencia de oscilaciones en presencia de discontinuidades. En general, en un esquema expresado en variables conservativas, la reconstrucción de la solución debería basarse en dichas variables. No obstante bajo las condiciones particulares presentes en flujos hipersónicos, la experiencia numérica indica la preferencia por el empleo de variables primitivas de forma de preservar la positividad de las variables termodinámicas del flujo. Por consiguiente se ha empleado en la reconstrucción de segundo orden el siguiente conjunto de variables primitivas:

$$\mathbf{w} = (\rho, c_s, \mathbf{v}, p, T_{ve}) \quad (3.26)$$

del cual pueden obtenerse en forma directa todas las variables necesarias para el cómputo del flujo numérico en la interface.

3.4.1 Evaluación de gradientes en las celdas

Para la evaluación de los gradientes en las celdas las dos técnicas más utilizadas son el método de Green-Gauss y el método de mínimos cuadrados. Ambas técnicas presentan ciertas ventajas y desventajas dependiendo principalmente éstas del tipo y calidad de los elementos de malla [101, 41].

3.4.1.1 Método de Green-Gauss

En el método de Green-Gauss el gradiente de una variable escalar ϕ en una celda genérica Ω_i se obtiene aplicando el teorema de la divergencia:

$$\nabla\phi_i \simeq \frac{1}{\mathcal{V}_{\Omega_i}} \int_{\partial\Omega_i} \phi \mathbf{n} d\mathcal{S} \quad (3.27)$$

En un esquema centrado en las celdas la integral de contorno a la derecha de (3.27) es aproximada mediante la expresión

$$\int_{\partial\Omega_i} \phi \mathbf{n} d\mathcal{S} \simeq \sum_{j=1}^{n_{f\Omega_i}} \frac{1}{2} (\phi_i + \phi_j) \mathbf{n}_{ij} \mathcal{A}_{ij} \quad (3.28)$$

donde ϕ_i representa el valor promedio de la variable en la celda i y $\frac{1}{2}(\phi_i + \phi_j)$ el valor aproximado de la variable en la cara ij . Introduciendo (3.28) en (3.27) se obtiene finalmente:

$$\nabla\phi_i \simeq \frac{1}{\mathcal{V}_{\Omega_i}} \sum_{j=1}^{n_{f\Omega_i}} \frac{1}{2} (\phi_i + \phi_j) \mathbf{n}_{ij} \mathcal{A}_{ij} \quad (3.29)$$

Si bien el esquema de Green-Gauss es atractivo debido a la simpleza de la fórmula (3.29), presenta la desventaja de una alta incerteza en el cálculo de gradientes en mallas híbridadas en la interface entre celdas de diferente tipo, tal como es demostrado en [71].

3.4.1.2 Metodo de Mínimos Cuadrados

La técnica de evaluación del gradiente por mínimos cuadrados fue por primera vez introducida en [15]. Dicha técnica se encuentra basada en la siguiente aproximación:

$$\xi_{ij} \nabla \phi_i \cdot \mathbf{r}_{ij} = \xi_{ij} (\phi_j - \phi_i) \quad (3.30)$$

donde ξ_{ij} representa un factor de ponderación arbitrario. Usualmente se lo elige igual a:

$$\xi_{ij} = \|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i\|^{-p} \quad (3.31)$$

Para $p = 0$ se dice que la reconstrucción es no ponderada. Los factores de ponderación puede ser utilizados para reducir la influencia de las celdas más distantes. Por ejemplo para $p = 1$ se tiene una ponderación por la inversa de la distancia. Aplicando la expresión (3.30) a cada una de las celdas pertenecientes a un stencil asociado a la celda Ω_i se obtiene un sistema lineal sobredeterminado donde las incógnitas corresponden a las componentes del vector gradiente.

Este sistema puede ser resuelto en el sentido de mínimos cuadrados utilizando la técnica de la ecuación normal [21]. Debido a que este sistema se encuentra usualmente mal condicionado para mallas altamente deformadas, es que en [7] introducen la descomposición QR de la matriz utilizando un procedimiento de Gram-Schmidt [90]. En el caso más general tridimensional la solución del sistema resultante se escribe como [71]:

$$\nabla \phi_i = \sum_{j=1}^{n_{\Omega_i}} \omega_{ij} (\phi_j - \phi_i) \quad (3.32a)$$

donde,

$$\omega_{ij} = \begin{bmatrix} \alpha_{ij,1} - \frac{r_{12}}{r_{11}} \alpha_{ij,2} + \Psi \alpha_{ij,3} \\ \alpha_{ij,2} - \frac{r_{23}}{r_{33}} \alpha_{ij,3} \\ \alpha_{ij,3} \end{bmatrix} \quad (3.32b)$$

$$\alpha_{ij,1} = \frac{\xi_{ij}^2}{r_{11}^2} \Delta x_{ij}, \quad \alpha_{ij,2} = \frac{\xi_{ij}^2}{r_{22}^2} \left(\Delta y_{ij} - \frac{r_{12}}{r_{11}} \Delta x_{ij} \right) \quad (3.32c)$$

$$\alpha_{ij,3} = \frac{\xi_{ij}^2}{r_{33}^2} \left(\Delta z_{ij} - \frac{r_{23}}{r_{22}} \Delta y_{ij} + \Psi \Delta x_{ij} \right), \quad \Psi = \frac{r_{12}r_{23} - r_{13}r_{22}}{r_{11}r_{22}} \quad (3.32d)$$

$$r_{11} = \sqrt{\sum_j \xi_{ij}^2 (\Delta x_{ij})^2}, \quad r_{12} = \frac{1}{r_{11}} \sum_j \xi_{ij}^2 \Delta x_{ij} \Delta y_{ij} \quad (3.32e)$$

$$r_{13} = \frac{1}{r_{11}} \sum_j \xi_{ij}^2 \Delta x_{ij} \Delta z_{ij}, \quad r_{22} = \sqrt{\sum_j \xi_{ij}^2 (\Delta y_{ij})^2 - r_{12}^2} \quad (3.32f)$$

$$r_{23} = \frac{1}{r_{22}} \left(\sum_j \xi_{ij}^2 \Delta y_{ij} \Delta z_{ij} - \frac{r_{12}}{r_{11}} \sum_j \xi_{ij}^2 \Delta x_{ij} \Delta z_{ij} \right) \quad (3.32g)$$

$$r_{33} = \sqrt{\sum_j \xi_{ij}^2 (\Delta z_{ij})^2 - (r_{13}^2 + r_{23}^2)} \quad (3.32h)$$

3.4.2 Funciones limitadoras

Las funciones limitadoras mencionadas en la (3.25), se introducen a fin de prevenir la generación de oscilaciones no físicas en regiones donde existen grandes cambios relativos de la solución y por lo tanto el valor de los gradientes es elevado, tales como en las regiones vecinas a choques o discontinuidades de contacto. Existen en la literatura un vasto número de funciones limitadoras aplicables en su mayoría en el contexto de esquemas de reconstrucción del tipo *Monotone Upwind Schemes for Conservation Laws* (MUSCL) sobre mallas estructuradas, requiriéndose tratamientos especiales en el caso de mallas no estructuradas [36]. En el contexto de esquemas de reconstrucción basado en el gradiente sobre mallas no estructuradas dos de las funciones limitadoras más populares son las introducidas por Barth y Jepersen [16] y Venkatakrisnan [155] cuya formulación se introduce a continuación.

3.4.2.1 Función limitadora de Barth y Jepersen

Sea una reconstrucción lineal en una celda Ω_i de la forma:

$$\phi(\mathbf{r}) = \phi_i + \varrho_i \nabla \phi_i \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \quad (3.33)$$

donde ϕ_i representa el valor de la variable genérica ϕ asociado al centroide \mathbf{r}_i de la celda Ω_i . Sean ahora los valores $\phi_{i,\text{mín}}$ y $\phi_{i,\text{máx}}$ definidos mediante:

$$\phi_{i,\text{máx}} = \text{máx} \left(\phi_i, \text{máx}_j \phi_j \right) \quad (3.34)$$

$$\phi_{i,\text{mín}} = \text{mín} \left(\phi_i, \text{mín}_j \phi_j \right) \quad (3.35)$$

donde el índice j recorre todas las celdas que tienen una cara en común con la celda i .

Luego, la función limitadora introducida por Barth y Jepersen en [16] se puede definir como:

$$\varrho_i = \text{mín}_k \begin{cases} \text{mín} \left(1, \frac{\phi_{\text{máx}} - \phi_i}{\Delta_{ik}} \right) & \text{si } \Delta_{ik} > 0 \\ \text{mín} \left(1, \frac{\phi_{\text{máx}} - \phi_i}{\Delta_{ik}} \right) & \text{si } \Delta_{ik} < 0 \\ 1 & \text{si } \Delta_{ik} = 0 \end{cases} \quad (3.36)$$

donde,

$$\Delta_{ik} = (\nabla \phi)_i \cdot (\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_i) \quad (3.37)$$

y donde el índice k recorre todos los vértices que conforman la celda i . En [16] se propone evaluar los valores Δ_{ik} únicamente en los puntos donde se obtienen los flujos, es decir, el centroide de las caras que definen la celda i . Tal como sugiere la experiencia numérica ambas definiciones no presentan apreciables diferencias [16].

Si bien el limitador de Barth y Jepersen ha sido aplicado con éxito a mallas no estructuradas presenta la desventaja de ser altamente sensitivo y activo en regiones donde la solución es continua, y en donde por ende es deseable la no activación del limitador, además de impactar negativamente en la convergencia para problemas estacionarios [3, 155].

3.4.2.2 Función limitadora de Venkatakrisnan

Con el objetivo de diseñar una función limitadora que reduzca los efectos negativos presentes en la anterior formulación Venkatakrisnan introduce en el contexto de la formulación (3.33) la siguiente expresión [155]:

$$\varrho_i = \text{mín}_j \begin{cases} \frac{1}{\Delta_{ij}} \left[\frac{(\Delta_{\text{máx}}^2 + \epsilon^2) \Delta_{ij} + 2 \Delta_{ij}^2 \Delta_{\text{máx}}}{\Delta_{\text{máx}}^2 + 2 \Delta_{ij}^2 + \Delta_{\text{máx}} \Delta_{ij} + \epsilon^2} \right] & \text{si } \Delta_{ij} > 0 \\ \frac{1}{\Delta_{ij}} \left[\frac{(\Delta_{\text{mín}}^2 + \epsilon^2) \Delta_{ij} + 2 \Delta_{ij}^2 \Delta_{\text{mín}}}{\Delta_{\text{mín}}^2 + 2 \Delta_{ij}^2 + \Delta_{\text{mín}} \Delta_{ij} + \epsilon^2} \right] & \text{si } \Delta_{ij} < 0 \\ 1 & \text{si } \Delta_{ij} = 0 \end{cases} \quad (3.38)$$

donde ϕ_{\min} y ϕ_{\max} se definen igual que en (3.34) y donde

$$\Delta_{\max} = \phi_{\max} - \phi_i, \quad \Delta_{\min} = \phi_{\min} - \phi_i \quad (3.39)$$

El parámetro ϵ tiene el propósito de controlar el nivel de limitación. Si es igual a cero, implica el mayor nivel de limitación, lo cual provoca que la función presente un comportamiento similar al limitador anterior. Por otro lado, un alto valor de ϵ brinda un valor del limitador cercano a la unidad lo cual tampoco es deseable. En [155, 154], la experiencia numérica indica que un valor de ϵ del orden del tamaño local de malla h , es suficiente para obtener buenas propiedades de convergencia.

Debido a la presencia de celdas con una alta relación de aspecto en los resultados obtenidos en este trabajo, la definición de un tamaño local de malla aplicable a todas las direcciones no es apropiado. En este sentido se ha optado por emplear la modificación introducida por [161] en donde el parámetro ϵ se define mediante

$$\epsilon = K(\phi_{\max} - \phi_{\min}) \quad (3.40)$$

en donde ϕ_{\max} y ϕ_{\min} denotan los valores máximos y mínimos de la variable ϕ en todo el dominio computacional, y donde K es una constante de $\mathcal{O}(1)$. En los casos resueltos en este trabajo se ha empleado un valor de la constante K igual a 0.01.

3.5 Discretización de los flujos difusivos

En la discretización de los flujos difusivos es necesaria la evaluación de ciertas magnitudes del flujo así como del gradiente de las mismas en la interface de las celdas. Este término presenta la forma general para una cara que separa las variables celdas Ω_i y Ω_j como:

$$\mathbf{F}^v(\mathbf{u}, \nabla \mathbf{u}) \cdot \mathbf{n}_{ij} = \mathbf{F}^v(\mathbf{u}_{ij}, \nabla \mathbf{u}_{ij}) \quad (3.41)$$

El valor de cualquier variable ϕ_{ij} definida en la interface y necesaria en el cómputo del flujo convectivo es sencillamente obtenida como el promedio ponderado por la distancia entre la cara y el centroide de los valores asociados a las celdas adyacentes a la cara.

$$\phi_{ij} = \frac{\phi_i \|\mathbf{r}_{ij} - \mathbf{r}_j\| + \phi_j \|\mathbf{r}_{ij} - \mathbf{r}_i\|}{\|\mathbf{r}_{ij} - \mathbf{r}_i\| + \|\mathbf{r}_{ij} - \mathbf{r}_j\|} \quad (3.42)$$

Debido al carácter elíptico del término difusivo, los gradientes son usualmente estimados mediante diferencias centradas en mallas estructuradas. En mallas no estructuradas, en

donde no existe en general una dirección bien definida para utilizar esta aproximación, el cómputo de los gradientes presenta una complejidad adicional. Una técnica para la evaluación de los gradientes en la interface consiste en la aplicación del teorema de Green-Gauss sobre un volumen de control definido alrededor de la interface [34]. Esta técnica presenta la desventaja de no ser transparente a la topología de los elementos que forman la malla, requiriendo la definición de estados sobre los vértices, usualmente obtenidos por alguna promediación ponderada de las celdas adyacentes al vértice considerado. Debido al interés de mantener una metodología de solución independiente de la topología y basada en las caras, es que en este trabajo se decidió utilizar la metodología propuesta en [98].

En ésta, se obtiene primero una estimación del gradiente en la interface a partir del promedio ponderado por el volumen de los gradientes asociados a las celdas:

$$(\nabla\phi)_{ij} = \frac{(\nabla\phi)_i \mathcal{V}_{\Omega_i} + (\nabla\phi)_j \mathcal{V}_{\Omega_j}}{\mathcal{V}_{\Omega_i} + \mathcal{V}_{\Omega_j}} \quad (3.43)$$

No obstante la conveniencia de esta expresión, este esquema de discretización lleva a un desacoplamiento de las celdas pares e impares en mallas cartesianas resultando en modos oscilatorios de la frecuencia de la grilla que no son apropiadamente amortiguados tal como es notado en [99]. En [98] se propone una modificación que mejora el acoplamiento mediante la introducción de la aproximación del gradiente en la dirección $\mathbf{t}_{ij} = \mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i$ que conecta los centroides de las celdas a la derecha e izquierda de la cara mediante

$$\frac{\partial\phi}{\partial\mathbf{t}_{ij}} = \frac{\phi_j - \phi_i}{|\mathbf{t}_{ij}|} \quad (3.44)$$

Finalmente el gradiente en la cara es obtenido mediante la expresión:

$$(\nabla\phi)_{ij} = \overline{(\nabla\phi)}_{ij} - \left[\overline{(\nabla\phi)}_{ij} \cdot \mathbf{t}_{ij} - \frac{\phi_j - \phi_i}{|\mathbf{t}_{ij}|} \right] \frac{\mathbf{n}_{ij}}{\mathbf{n}_{ij} \cdot \mathbf{t}_{ij}} \quad (3.45)$$

donde $\overline{(\nabla\phi)}_{ij}$ en (3.45) es el gradiente promedio evaluado mediante (3.43). Esta técnica goza de gran popularidad [100] y ha sido utilizado por una variedad de autores [107, 23, 71, 162] en el cómputo de flujos compresibles a alto número de Reynolds en mallas híbridas y particularmente en [138, 113] para el cómputo de flujos hipersónicos en no equilibrio termoquímico.

3.6 Integración temporal

La alta disparidad presente en las diferentes escalas temporales asociadas a los fenómenos físicos en flujos hipersónicos hace que el sistema de ecuaciones resultante sea extremadamente rígido. Esto implica que si se utilizan métodos explícitos para la integración temporal del sistema, la región de estabilidad dicta pasos de tiempo excesivamente bajos, lo que resulta en última instancia en un número de pasos inviable para la obtención eficiente de soluciones estacionarias. Es por ello que se recurre al uso de métodos implícitos, los cuales tienen restricciones de estabilidad menos severas y facilitan la convergencia a soluciones estacionarias. Debido a que en esta tesis son de interés únicamente soluciones de este tipo, es que se recurre al método de integración de primer orden implícito *backward* Euler.

Sea entonces el sistema de ecuaciones discretizado en la celda Ω_i reescrito como:

$$\mathcal{V}_{\Omega_i} \frac{\partial \bar{\mathbf{u}}_i}{\partial t} = \mathbf{R}_i(\bar{\mathbf{u}}) \quad (3.46)$$

donde,

$$\mathbf{R}_i(\bar{\mathbf{u}}) = - \sum_{j=1}^{n_{f\Omega_i}} |\mathcal{A}_{ij}| [\mathbf{F}(\mathbf{u}) - \mathbf{F}^v(\mathbf{u}, \nabla \mathbf{u})]_{\mathbf{r}_{ij}} \cdot \mathbf{n}_{ij} + \mathcal{V}_{\Omega_i} \mathbf{s}(\bar{\mathbf{u}}_i, \nabla \bar{\mathbf{u}}_i) \quad (3.47)$$

es el denominado *residuo* del sistema. Sea $\bar{\mathbf{u}}_i^n$ el vector solución en la celda Ω_i para el paso de tiempo discreto t_n . Dado entonces $\bar{\mathbf{u}}_i^n$ en el método implícito de primer orden de *backward* Euler se obtiene la solución en el paso de tiempo posterior $\bar{\mathbf{u}}_i^{n+1}$ mediante:

$$\frac{\mathcal{V}_i}{\Delta t} (\bar{\mathbf{u}}_i^{n+1} - \bar{\mathbf{u}}_i^n) = \mathbf{R}_i(\bar{\mathbf{u}}_i^{n+1}) \quad (3.48)$$

donde en el límite estacionario se tiene:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \mathbf{R}_i(\bar{\mathbf{u}}_i^n) \approx \mathbf{0} \quad (3.49)$$

El residuo en el paso de tiempo t^{n+1} se obtiene mediante la linealización:

$$\mathbf{R}(\bar{\mathbf{u}}_i^{n+1}) \simeq \mathbf{R}(\bar{\mathbf{u}}_i^n) + \frac{\partial \mathbf{R}(\bar{\mathbf{u}}_i^n)}{\partial \bar{\mathbf{u}}_i} (\bar{\mathbf{u}}_i^{n+1} - \bar{\mathbf{u}}_i^n) \quad (3.50)$$

Introduciendo ahora (3.50) en (3.48) y reordenando términos se obtiene finalmente el sistema lineal:

$$\mathcal{J}(\bar{\mathbf{u}}_i^n) \Delta \bar{\mathbf{u}}_i^n = \mathbf{R}(\bar{\mathbf{u}}_i^n) \quad (3.51a)$$

donde,

$$\mathcal{J}(\bar{\mathbf{u}}_i) = \frac{\mathcal{V}_i}{\Delta t} - \frac{\partial \mathbf{R}(\bar{\mathbf{u}}_i^n)}{\partial \bar{\mathbf{u}}^n}, \quad \Delta \bar{\mathbf{u}}_i^n = \bar{\mathbf{u}}_i^{n+1} - \bar{\mathbf{u}}_i^n \quad (3.51b)$$

La Ec. (3.51a) representa el método de integración temporal utilizado en su forma general.

3.6.1 Evaluación del jacobiano

La evaluación exacta del jacobiano en (3.51a) requiere la linealización exacta de la discretización espacial. Esta tarea puede ser altamente compleja, sino imposible en el caso de discretizaciones de segundo o mayor orden. Además, debido a que el stencil de la discretización espacial de segundo orden acopla celdas que no son directamente vecinas, el requerimiento de memoria del jacobiano exacto es excesivamente alto. De forma de reducir esta complejidad es que el jacobiano puede ser aproximado de distintas formas. Por ejemplo, en los métodos de diagonalización [27, 44] únicamente se incluyen en el jacobiano los términos correspondientes a la diagonal, los cuales son obtenidos de forma tal de ajustar las escalas de cada una de las ecuaciones del sistema. En esta forma, la obtención de la matriz inversa del jacobiano requiere un número mínimo de operaciones. El método de punto implícito [55] incorpora en la matriz jacobiana únicamente los términos correspondientes al bloque diagonal, relajando los restantes términos en el lado derecho de la Ec. (3.51a), requiriendo para la solución del sistema, la inversión de una matriz diagonal en bloques que es realizada en forma directa. El método de relajación por líneas en paralelo (DPLR, por sus siglas en inglés)[167] en tanto, aplica una metodología análoga relajando los términos en las direcciones que son asumidas de menor acoplamiento de la solución y acoplando los términos en la dirección perpendicular a esta (usualmente en la dirección normal a la superficie del cuerpo). De esta forma el sistema a resolver consiste en un sistema tridiagonal, en donde el desacoplamiento permite un alto grado de paralelización del método. Tal como es notado en [96] en ciertos problemas no existe una dirección del gradiente preferencial (estelas o flujos separados), o se dan condiciones donde la matriz diagonal simplificada es mal condicionada (flujos de baja velocidad, pasos de tiempo grandes). Más aún, la extensión de la estrategia DPLR a mallas no estructuradas no es directa requiriendo de un algoritmo particular para la construcción de las líneas y la partición apropiada del dominio [139].

En este sentido en el presente trabajo se emplea un jacobiano analítico obtenido de una aproximación de primer orden del residuo de forma de mantener el acoplamiento únicamente en las celdas vecinas [116]. El jacobiano incluye contribuciones tanto de los flujos

convectivos, difusivos como de los términos fuente. En el caso de los términos convectivos y difusivos es factible implementar el jacobiano de un flujo de complejidad menor al utilizado en la discretización espacial, o bien asumir ciertas restricciones sobre los términos a diferenciar [6]. En este trabajo se utiliza el esquema de Van Leer para el cómputo del jacobiano de los términos convectivos tal como se presenta en la Sección B.1 del Apéndice. Se asume además una aproximación de tipo *thin-layer* para el cálculo del jacobiano de los términos difusivos tal como se detalla en la Sección B.2 del Apéndice. En el caso del jacobiano de los términos fuente dados por las reacciones químicas, se obtiene en forma analítica exacta, mientras que en el caso de los términos fuente debido a la formulación axial-simétrica y de no equilibrio termodinámico diversas simplificaciones son introducidas en las expresiones tal como se detalla en la Sección B.3 del Apéndice.

3.6.2 Solución del sistema lineal

Debido a que la estrategia utilizada en la evaluación del jacobiano acopla todos los términos en forma implícita, el uso de métodos de tipo iterativo es prácticamente obligatorio. Las librerías PETSc [12, 11, 13] proveen extensamente probadas, eficientes y escalables [62] implementaciones de métodos iterativos para la solución de grandes sistemas de ecuaciones lineales mediante cómputo paralelizado. Dentro de los métodos iterativos provistos por PETSc, en este trabajo se emplea el método de la familia de subespacios de Krylov *Generalized Minimum Residual* (GMRES). El método GMRES busca la solución de un sistema lineal de ecuaciones en una serie de pasos donde en cada iteración el residuo del sistema es minimizado con respecto al paso anterior. El método GMRES actualiza para cada iteración la solución en la forma $x_m = x_{m-1} + \delta x$ donde el vector δx es obtenido como una combinación lineal de una base de vectores $\{q_k\}$, $\delta x = \sum_k \lambda_k q_k$ y donde los coeficientes λ_k son tales que minimizan en el sentido de mínimos cuadrados el residuo del sistema. La base de vectores $\{q_k\}$ es obtenida mediante un proceso de ortogonalización de Arnoldi tomando como primer vector el residuo normalizado. Es necesario notar que el número de vectores que forman la base $\{q_k\}$ es un parámetro modificable del método.

La convergencia del método GMRES, así como la de otros métodos de Krylov, es altamente dependiente del radio espectral de la matriz de coeficientes. En sistemas mal condicionados el número de iteraciones para llegar a la convergencia puede ser incluso del orden del número de incógnitas, tornando necesario el empleo de preconditionadores en sistemas tales como el de las ecuaciones de Navier-Stokes. En este trabajo es utilizado el método aditivo de Schwarz como preconditionador global del sistema junto con un preconditionador local ILU(0) [85] en los casos presentados, ambos disponibles en las librerías

rías PETSc y que han sido empleados previamente como preconditionadores del método GMRES en sistemas de flujos hipersónicos en no equilibrio [88, 113].

3.6.3 Evaluación del paso de tiempo

Si bien un método implícito no tiene restricciones teóricas de estabilidad, la convergencia del método de tipo Newton de avance de la solución temporal es obtenida únicamente en el caso de que la solución se encuentre inicialmente en cierto entorno de la solución estacionaria. Es por ello que aún en métodos implícitos es necesario establecer el control del paso de tiempo.

El paso de tiempo local es determinado mediante la expresión adecuada para mallas no estructuradas propuesta por [157]:

$$\frac{\text{CFL}\mathcal{V}_{\Omega_i}}{(\Delta t)_c + (\Delta t)_v} \quad (3.52)$$

donde el límite temporal dado por el flujo convectivo es,

$$(\Delta t)_c = \sum_{j=1}^{n_f} (\mathbf{v}_{ij} \cdot \mathbf{n}_{ij} + a_{ij}) \mathcal{A}_{ij} \quad (3.53)$$

y el asociado a los flujos viscosos es,

$$(\Delta t)_v = \frac{1}{\mathcal{V}_{\Omega_i}} \sum_{j=1}^{n_f} \max\left(\frac{4}{3\rho_{ij}}, \frac{\gamma_{ij}}{\rho_{ij}}\right) \frac{\mu_i}{\text{Pr}} \mathcal{A}_{ij}^2 \quad (3.54)$$

en donde todas las variables definidas en la cara se obtienen mediante simple promedio aritmético de las celdas adyacentes y donde Pr denota el número de Prandtl asociado la celda.

Para flujos estacionarios el número de CFL es inicializado a un valor unitario y actualizado mediante un método tipo *Switched Evolution Relaxation* (SER), el cual aumenta el paso de tiempo a medida que la solución alcanza la convergencia mediante

$$\text{CFL}(t^n) = \min\left(\text{CFL}_{\text{máx}}, \text{CFL}(t^{n-1}) \left(\frac{\|\mathbf{R}(t^{n-1})\|}{\|\mathbf{R}(t^n)\|}\right)\right) \quad (3.55)$$

donde $\|\mathbf{R}(t^{n-1})\|$ denota alguna norma del residuo, siendo en nuestro trabajo la norma L_1 del residuo correspondiente al cambio de densidad, $p = 1$ y donde el número de CFL máximo es necesario para no introducir inestabilidades en la integración.

3.7 Condiciones de borde

El tratamiento de las condiciones de borde es realizado en este trabajo mediante la técnica de las celdas fantasma. En dicha técnica el dominio computacional es extendido con una capa adicional de celdas adyacentes al mismo de forma tal que el flujo numérico en las caras que forman el contorno es evaluado en forma similar al flujo en el interior. Cada una de las celdas que componen el dominio ficticio se encuentra asociada a una cara perteneciente al contorno y en donde el vector de estado dentro de la celda fantasma es evaluado en forma tal que el flujo numérico así obtenido en el contorno satisface las restricciones físicas impuestas por la condición de borde. En los problemas tratados en este trabajo se presentan 4 tipos de condiciones de borde: entrada y salidas supersónicas, contorno sólido y línea de simetría. En las subsecciones siguientes se asume que ϕ_L y ϕ_R denotan una variable del flujo a la izquierda y derecha de una cara del contorno respectivamente, en donde el estado a la derecha corresponde a la celda ficticia.

3.7.1 Entrada supersónica

En una entrada de tipo supersónico, el análisis del problema local de Riemann determina que todas las ondas características del flujo son entrantes al dominio por lo que las propiedades en la celda fantasma deben ser impuestas a partir del conocimiento de las condiciones del flujo en el exterior del dominio. En todos los problemas tratados, estas condiciones corresponden a las de la corriente libre por lo que una variable cualquiera en la celda fantasma se obtiene a partir de:

$$\phi_R = \phi_\infty \tag{3.56}$$

en donde ϕ_∞ denota el valor de la variable (temperatura, presión, velocidad, etc.) correspondiente a las condiciones de la corriente libre.

3.7.2 Salida supersónica

En una salida supersónica las ondas características son salientes al dominio, por lo que el vector de estado en la celda fantasma es obtenido mediante una interpolación a partir de las propiedades dentro del dominio. En este trabajo se utiliza una simple extrapolación de primer orden dada por:

$$\phi_R = \phi_L \tag{3.57}$$

En el caso de flujos viscosos, imponer una condición de borde supersónica en la región de capa límite (de carácter subsónico) puede ser objetable. No obstante, puede considerarse que la propagación de perturbaciones originadas en el borde son amortiguadas lo suficiente por la acción de las altas tensiones de corte presentes en la capa límite, por lo que posicionando el contorno de salida suficientemente corriente arriba no se afecta a la región de interés [144].

3.7.3 Contorno sólido

3.7.3.1 Flujo inviscido

En el caso de flujos no viscosos sobre una pared sólida se tiene que el flujo de masa a través de la pared es nulo. Además se asume que el gradiente de presión en la pared es nulo. La primer condición se satisface imponiendo que la velocidad en la dirección normal de las celdas adyacentes a la cara del contorno es opuesta en signo, siendo similares las componentes en la dirección tangencial. La condición sobre el gradiente de presión se obtiene igualando tanto las densidades como la temperatura. Sea entonces una terna ortonormal de versores (n,r,t) definidos sobre la cara en donde n denota la dirección normal. Luego, el estado en la celda fantasma es obtenido como:

$$\rho_{s,R} = \rho_{s,L} \quad (3.58a)$$

$$\rho_R v_{n,R} = -\rho_L v_{n,L} \quad (3.58b)$$

$$\rho_R v_{r,R} = \rho_L v_{r,L} \quad (3.58c)$$

$$\rho_R v_{t,R} = \rho_L v_{t,L} \quad (3.58d)$$

$$T_R = T_L \quad (3.58e)$$

$$T_{ve,R} = T_{ve,L} \quad (3.58f)$$

3.7.3.2 Flujos viscosos. Condición de no deslizamiento

En flujos viscosos es impuesta la condición de no deslizamiento sobre la pared. Esta se obtiene a través de:

$$\mathbf{v}_R = -\mathbf{v}_L \quad (3.59)$$

En el caso de una pared adiabática la condición de conducción de calor nula se obtiene imponiendo un gradiente nulo sobre la temperatura haciendo:

$$T_R = T_L, \quad T_{ve,R} = T_{ve,L} \quad (3.60)$$

En el caso de asumir una pared a temperatura constante T_w las temperaturas en las celdas fantasma se obtienen a través de la fórmula de interpolación:

$$T_R = 2T_L - T_w, \quad T_{ve,R} = 2T_{ve,L} - T_w \quad (3.61)$$

Finalmente, y al igual que en el caso invíscido, el gradiente de presión se asume nulo sobre la pared, por lo que se tiene:

$$p_R = p_L \quad (3.62)$$

En los problemas de flujos en no equilibrio químico es necesario además considerar una condición de borde para las fracciones másicas de las especies. Esta se obtiene del tipo de interacción química que ocurre entre el gas y el material de la superficie. Tres tipos de condiciones a saber son representadas por una pared catalítica, parcialmente catalítica o no catalítica [7]. En una pared catalítica se considera que todas las reacciones químicas son catalizadas a una tasa infinita por lo que las fracciones másicas en la pared corresponden a las condiciones de equilibrio químico a la temperatura y presión local sobre la pared. Una superficie parcialmente catalítica es cuando las reacciones químicas son catalizadas a una tasa finita. Finalmente en una pared no catalítica se asume que ninguna reacción ocurre en la pared. En una pared no catalítica la difusión de las especies sobre la pared es nula, por lo que se tiene una condición de gradiente nulo en las fracciones másicas, la cual se aproxima mediante la técnica de celdas ficticias haciendo:

$$c_{R,s} = c_{L,s} \quad (3.63)$$

En una pared totalmente catalítica se obtiene la composición en equilibrio químico correspondientes a las condiciones de la temperatura de la pared T_w y la presión de la pared que es asumida igual a la de la celda interior adyacente a la misma,

$$c_{s,w} = c(T_w, p_L) \quad (3.64)$$

La composición en equilibrio químico se obtiene utilizando la librería externa CEA2 [59], mediante una metodología similar a la empleada en [136]. De esta manera la fracción másica en la celda ficticia se obtiene haciendo:

$$c_{s,R} = 2c_{s,w} - c_{s,L} \quad (3.65)$$

3.7.4 Línea de simetría

En los problemas bidimensionales con simetría axial, el estado de las celdas ficticias adyacentes a la línea de simetría es obtenido en forma similar a la condición de superficie sólida en los flujos convectivos.

Esta página ha sido intencionalmente dejada en blanco.

IMPLEMENTACIÓN COMPUTACIONAL

4.1 Introducción

En el diseño de un código computacional para la resolución numérica de sistemas de ecuaciones en derivadas parciales (EDPs) en mallas no estructuradas como el que compete a este trabajo, pueden identificarse esencialmente tres componentes principales:

- Una representación computacional de la malla utilizada en la discretización espacial, así como de los datos asociados a las entidades discretas de la malla.
- Un componente que agrupa las relaciones existentes entre las variables físicas que componen el sistema de ecuaciones a modelar.
- Un componente que agrupa las operaciones dadas por los algoritmos numéricos que operan sobre el sistema discretizado de ecuaciones.

En una primera instancia, un diseño estructurado relaciona estos tres aspectos en forma directa, explicitando la dependencia entre los mismos, de forma tal que se obtiene una estructura de datos óptima en el sentido de la eficiencia. Este tipo de diseños no obstante presenta ciertas desventajas ya que una modificación que puede ser mínima en uno de los componentes, por ejemplo un cambio en la estructura de datos de representación de la malla, puede dar lugar a una reacción en cadena de alteraciones sobre las operaciones que dependían explícitamente de la misma, e incluso en otras áreas previamente no anticipadas del código, requiriendo esto de un considerable tiempo de desarrollo y *debugging*. Más aún, debido a que la estructura de datos se orienta fuertemente a la solución de un problema particular, la incorporación de nuevos modelos físicos y numéricos puede requerir en algunos casos la reescritura parcial o incluso total del código.

La introducción de técnicas de programación orientada a objetos (OOP, por sus siglas en inglés) [51] en la disciplina de computación científica, ha probado largamente su éxito, tal como lo demuestran el desarrollo sostenido de códigos y librerías basadas en este paradigma [163, 13, 82, 14, 17, 53].

En el código desarrollado en esta tesis se utiliza una arquitectura en capas tal como se muestra en la Fig. 4.1. Una primera capa, que denominamos capa núcleo es la encargada de la implementación de la estructura de datos que provee los servicios de representación computacional de la malla y administración de los campos asociados a la misma en sistemas de cómputo distribuido. El diseño de esta capa utiliza técnicas de OOP de forma de establecer una interface clara y definida que separe a ésta de las aplicaciones.

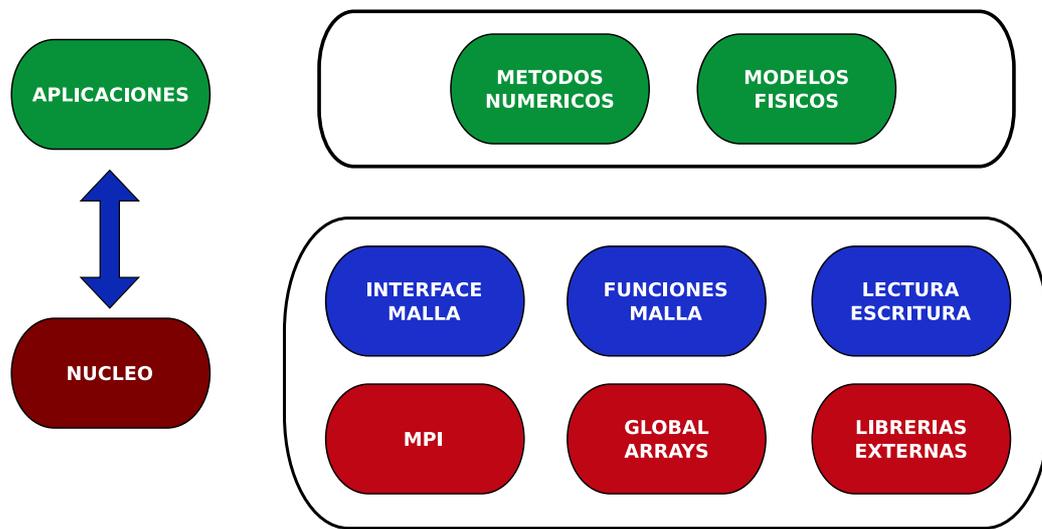


Figura 4.1: Arquitectura en capas general de la implementación.

Por otro lado, la capa superior, agrupa todas las operaciones relacionadas con la implementación de los algoritmos numéricos, obtención de propiedades del modelo físico, etc., los cuales no precisan tener un conocimiento de los detalles de implementación de la capa inferior, obteniendo únicamente la información que precisan de la misma a través de la interface de comunicación establecida por ésta. Si bien en el diseño de esta capa ciertos aspectos han sido implementados utilizando OOP, en general el diseño de la misma sigue técnicas de programación modular clásicas, orientándose principalmente a la eficiencia en las operaciones numéricas.

En el presente capítulo se describen con cierto detalle los aspectos más relevantes del sistema orientado a objetos de la capa núcleo desarrollada para el código de esta tesis. En primer lugar se presenta el lenguaje de implementación elegido y el modelo de cómputo en paralelo asumido, para luego introducir un breve análisis del dominio y conceptos

del sistema que tiene el objetivo de establecer los requerimientos y alcance del mismo. A continuación de este se describen la interface y funcionalidad de los objetos que forman el sistema, brindando algunos detalles relevantes de la implementación, para finalmente describir algunos aspectos del empleo del sistema en el código de volúmenes finitos desarrollado en este trabajo.

4.2 Lenguaje de implementación

Junto con la aparición de las revisiones Fortran 90 y Fortran 95, diversos autores demostraron la capacidad del lenguaje de implementar diseños orientados a objetos [38, 39, 114, 5]. La revisión Fortran 2003 es una revisión mayor del estándar, superior incluso al salto que supuso la revisión Fortran 90 con respecto a Fortran 77. En esta oportunidad entre las nuevas características se introducen capacidades plenas para la implementación de diseños orientados a objetos. Específicamente en las nuevas capacidades se mencionan [103]:

- Polimorfismo, asignación dinámica de tipo derivados, y declaración de métodos miembro de tipos derivados
- Mejoras en la construcción y finalización de clases.
- Tipos derivados parametrizados.
- Soporte para extensión y herencia de tipos derivados.
- Definición de clases de tipo abstracto.
- Punteros a procedimientos.
- Estandarización de la interoperabilidad con el lenguaje C.

Si bien lenguajes como C++ abarcan un conjunto aún más amplio de capacidades¹, en este trabajo se ha elegido el lenguaje Fortran 2003 debido a tres razones principales en orden de importancia: la primera y no menor era la experiencia previa adquirida por el autor y el grupo de trabajo en este lenguaje. Un sistema basado en Fortran 2003 permitiría en este sentido la casi directa y sencilla incorporación dentro del mismo de código heredado y extensivamente probado disponible en el grupo [148, 49, 48, 147, 137, 136]. El

¹una de las más destacables para el autor, la incorporación de plantillas de clases y basado en estas las clases de la Standard Template Library.

segundo motivo se encuentra relacionado con la disponibilidad de compiladores de acceso libre, en especial la familia de compiladores GNU, que han implementado en la actualidad prácticamente la totalidad de las capacidades de orientación a objetos provistas en el estándar Fortran 2003. El tercer motivo se basa en el hecho de que, al mejor de nuestro conocimiento, un sistema análogo en capacidades al del implementado en esta tesis no se encontraba disponible previamente para usuarios del lenguaje Fortran.

4.3 Modelos y librerías de computación en paralelo

La estructura de datos en paralelo ha sido diseñada asumiendo una arquitectura de memoria distribuida *Multiple Instruction Multiple Data* (MIMD). Una de las características principales de un sistema de memoria distribuida es que cada procesador posee una memoria local privada y donde el acceso a datos pertenecientes a la memoria local de otros procesadores puede ser realizado únicamente mediante directivas de intercambio de mensajes (*message-passing*). El estándar MPI (*Message Passing Interface*) [150] es una librería que provee rutinas para la implementación del paradigma de intercambio de mensajes en forma eficiente y portable a la mayoría de las arquitecturas. El modelo RMA ha sido empleado en la implementación de lenguajes y librerías que adhieren al modelo conocido como PGAS (*Partitioned Global Address Space*). El modelo PGAS asume un espacio de memoria global que asigna una partición lógica a cada procesador. No obstante, cada procesador tiene acceso tanto de lectura como escritura sobre otras particiones. Comúnmente es en la implementación de estos accesos donde el modelo RMA es convocado. Dos de los lenguajes más importantes basados en el modelo PGAS son *Co-Array Fortran* [115], el cual ha sido integrado en el estándar Fortran 2008 mediante el concepto de *coarrays*, y *Unified Parallel C* [151]. Global Arrays (GA) [109] es una librería de licencia libre que adhiere al modelo PGAS compatible con la mayoría de los lenguajes utilizados en computación científica (Fortran, C, C++). GA trabaja con el concepto de *array* distribuido. Este, se refiere a un vector particionado en forma lógica, donde cada procesador posee una partición contigua del vector. El acceso a particiones remotas, que pueden o no ser contiguas, del vector se hace mediante comunicaciones unilaterales de tipo *get,put* mediante la declaración del índice global del dato al cual se quiere acceder. Esta forma de operar sobre la comunicación entre la memoria de diferentes procesadores reduce considerablemente la complejidad (y los errores) en la programación de algoritmos paralelizados. Las capacidades de administración de memoria distribuida de GA son provistas en última instancia por la librería de bajo nivel ARMCI [110]. ARMCI es compatible con MPI, sin embargo por diseño es imparcial a la

selección de la librería de intercambio de mensajes utilizada en el código del usuario. En este trabajo se ha utilizado extensivamente la librería GA para la creación de vectores distribuidos que brindan entre otros, servicios de comunicación en algoritmos orientados a la administración de la estructura de malla en paralelo y almacenamiento en memoria de los campos escalares, vectoriales y/o tensoriales definidos sobre ésta. En última instancia las funciones que utilizan GA han sido apropiadamente encapsuladas dentro de clases de manera que el código usuario no precisa interactuar en forma directa con las rutinas de la librería GA. Este encapsulamiento permite además que la posible adopción futura de otro tipo de implementación del modelo PGAS, tal como Co-Array Fortran (cuya funcionalidad aún es parcial en los compiladores de acceso libre), no implique modificaciones relevantes en el código externo a la implementación de la clase.

4.4 Análisis del dominio de topología de mallas

Esta sección esta orientada a exponer y definir brevemente cuales son los conceptos principales que permiten identificar formalmente qué es y cuáles son los elementos que forman una malla. Estos conceptos nos permiten establecer lo que en OOP se denomina *análisis de dominio* [166] de forma de identificar claramente cuales son los componentes, requerimientos y restricciones del sistema que se pretende diseñar. La exposición presentada se encuentra basada tanto en la teoría de politopos [65] como en el análisis de dominio de mallas realizado anteriormente por otros autores [18, 19, 52, 141].

4.4.1 Definiciones previas

Se comienza definiendo el componente básico del tipo de mallas a la cual se restringe este trabajo, este es el concepto de politopo, más comúnmente referido como polígono o poliedro en dos o tres dimensiones respectivamente.

Definición 4.4.1 (Politopo). Un *politopo (convexo)* es definido como la cápsula convexa cerrada de un conjunto finito de puntos del espacio euclideo \mathbb{R}^d para algún $d \geq 0$. La dimensión de un politopo es igual a la dimensión de la cápsula convexa que lo define. Un politopo convexo de dimensión d será referido brevemente como un d -politopo.

Definición 4.4.2 (Cara de un politopo). Sea \mathcal{P} un d -politopo. Un conjunto $F \subset \mathcal{P}$ es una *cara* de \mathcal{P} si $F = H \cap \mathcal{P}$ donde $H \subset \mathbb{R}^d$ es un hiperplano soporte de \mathcal{P} , es decir, \mathcal{P} se encuentra incluido en alguno de los dos semiespacios cerrados definidos por H .

En el caso de un d -politopo \mathcal{P} se satisfacen las siguientes propiedades [65]:

1. Las caras de \mathcal{P} son politopos.
2. Cada cara de una cara de \mathcal{P} son a su vez caras de \mathcal{P} .
3. \mathcal{P} posee un número de caras finito de dimensión $0, 1, \dots, d - 1$. Se denominan a sus 0-caras como vértices, 1-caras como *aristas* y a sus $d - 1$ caras como *facetas*.

Definición 4.4.3 (Complejo politopal). Un *complejo politopal*, es un conjunto finito \mathcal{C} de politopos tal que:

1. Si $\mathcal{P} \in \mathcal{C}$ entonces el conjunto de caras de \mathcal{P} pertenece a \mathcal{C} .
2. La intersección $\mathcal{P} \cap \mathcal{Q}$ de dos politopos $\mathcal{P} \neq \mathcal{Q} \in \mathcal{C}$ es o bien el conjunto vacío o es una cara de ambos.

La *dimensión* $\dim(\mathcal{C})$ de un complejo politopal es la mayor de las dimensiones de sus miembros. Se dice que el complejo politopal de dimensión d es *puro* si cualquier politopo de dimensión $d - 1$ en \mathcal{C} es una cara de un politopo de dimensión d en \mathcal{C} . Caso contrario se dice que el complejo politopal es *no puro*.

A modo de ilustración en la Fig. 4.2 se muestra un ejemplo de complejo politopal puro y no puro.

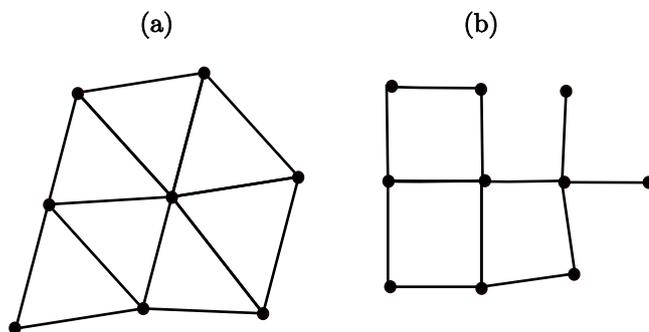


Figura 4.2: Complejo politopal (a): puro; (b): no puro.

Definición 4.4.4 (Malla). Se define como *d-malla conforme*, o simplemente *malla*, tal como el término es utilizado en este trabajo, a un complejo politopal puro de dimensión d . Se dice además que d es la *dimensión* de la malla y denotamos a esta malla como M^d .

Definición 4.4.5 (Entidad de malla). Sea un q -politopo perteneciente a una malla M^d . Una *entidad de malla* asociada a este politopo es un par (i, q) , denotada como M_i^q donde q es la dimensión topológica del politopo asociado y donde i es un índice único que define

a la entidad, que toma un valor determinado para cada q -politopo de la malla entre 0 y $N_q - 1$ con N_q igual al número de d -politopos de M . Se dice que q es la dimensión de la entidad de malla.

Una relación fundamental que permite establecer la topología en una malla es la denominada relación *de incidencia*, o también referida como *de adyacencia* o *de conectividad*.

Definición 4.4.6 (Incidencias). Sea una malla M^d y sean dos entidades $M_i^q, M_j^p \in M^d$. Si M_i^q es una cara de M_j^p entonces se dice que M_i^q y M_j^p son *incidentes*.

Junto a esta notación se introducen las siguientes:

- $\{M^q\}$ representa el conjunto de todas las entidades de malla de dimensión q .
- $M_i^q \{M^r\}$ representa al conjunto de todas las entidades de malla de dimensión r incidentes a M_i^q . Diremos de aquí en adelante que este es el conjunto de *adyacencias*.

4.4.2 Mallas distribuidas

El concepto de malla distribuida surge a partir de las características naturales de los métodos de solución numérica de EDPs que operan sobre mallas. Estos hacen uso de algoritmos que operan generalmente sobre datos asociados a las entidades de malla y donde la información requerida para llevar a cabo las operaciones requieren de información asociada a una región local a cada entidad denominada *stencil*. Una estrategia de paralelización que afecta mínimamente al diseño de estos algoritmos es la estrategia de *descomposición de dominio* o de *partición geométrica*. Esta estrategia consiste en dividir (particionar) la malla asociada a un determinado dominio, y en donde son asignadas las mismas operaciones a cada una de las partes, las cuales actúan ahora únicamente sobre los datos asociados a cada una de las partes en forma relativamente independiente. Esta partición de la malla global es la que lleva al concepto de malla distribuida. Una malla puede ser particionada de un sinnúmero de maneras. Podríamos, por ejemplo, particionar en forma independiente las entidades de distinta dimensión, o asignar la casi totalidad de la malla a una parte y dejar prácticamente vacíos los restantes. No obstante, en cómputo paralelizado surgen dos restricciones fundamentales que guían el proceso de partición, éstas son: el *desbalance de carga* y los *costos de comunicación*. Ambas restricciones se encuentran en última instancia relacionadas con la capacidad de escalamiento del cómputo distribuido. Básicamente, el desbalance de carga se refiere a la necesidad de asignar tamaños de tarea similares a cada partición, mientras que los costos de comunicación surgen debido a la necesidad intrínseca

que presentan los algoritmos de transferir en algún momento del ciclo información entre las distintas particiones, por lo que la cantidad de datos transferidos debe intentar ser minimizada. Una forma de descomponer el dominio que se considera básica para satisfacer en forma simple ambas restricciones es la partición *basada en celdas*, es decir la partición basada en las entidades de malla de dimensión máxima del dominio. Introducimos entonces formalmente el concepto de partición basada en las celdas.

Definición 4.4.7 (Partición). Sea una d -malla M^d . Sean n subconjuntos disjuntos de pares \mathcal{E}_i^d del conjunto $\{M^d\}$ formado por las celdas de M^d . Se define como *i-parte* de la malla M^d y se la denota por \mathcal{P}_i al conjunto de entidades de malla formado por las celdas del subconjunto \mathcal{E}_i^d y sus caras. Al conjunto cuyos elementos son las n partes \mathcal{P}_i se lo denomina *partición* de la malla M y se lo denota como $\{\mathcal{P}_i\}$

Nótese que de acuerdo a la definición anterior existirán ciertas entidades de dimensión menor a d , las cuales pertenecen a distintas partes. Un operador útil para la identificación de la relación entre estas entidades y la partición es el denominado operador residencia:

Definición 4.4.8 (Operador residencia). Sea una partición $\{\mathcal{P}_i\}$ de una malla M^d . Se define el *operador de residencia* $\mathcal{R}(M_i^q)$ de una entidad de malla $M_i^q \in M^d$ al operador definido como:

$$\mathcal{R}(M_i^q) = \begin{cases} \{r\} & \text{si } M_i^q \in \mathcal{P}_r \wedge q = d \\ \cup \{ \mathcal{R}(M_k^{q+1}) \mid M_k^{q+1} \in M_i^q \{M_j^{q+1}\} \} & \text{de otra manera} \end{cases}$$

El operador residencia permite identificar tres relaciones básicas entre una entidad dada y una partición.

Dada una entidad de malla $M_i^q \in M^d$ y una parte \mathcal{P}_j perteneciente a una partición \mathcal{P} de M^d decimos que:

1. M_i^q es *interior* a \mathcal{P}_j si $M_i^q \in \mathcal{P}_j$ y $\mathcal{R}(M_i^q) = \{j\}$
2. M_i^q pertenece al *contorno o borde*² de \mathcal{P}_j , si $M_i^q \in \mathcal{P}_j$ y M_i^q no es interior a \mathcal{P}_j .
3. M_i^q es *remota* a \mathcal{P}_j si $M_i^q \notin \mathcal{P}_j$

La presencia de entidades de contorno, las cuales son compartidas por un número que puede ser arbitrario de partes, hace necesario introducir el concepto de *propiedad* de

²Es necesario notar que esta definición de contorno no debe confundirse con la del contorno físico del dominio.

las entidades. Esto es a fin de determinar que parte (o procesador) será el encargado de administrar la entidad y los datos asociados a ésta (acceso tanto de lectura como escritura). En este trabajo se utiliza la regla de que para una entidad compartida el propietario es la parte con el menor número de identificación (equivalente al procesador con el menor rango en un sistema distribuido).

Tal como ya ha sido mencionado, el modelo de paralelización por descomposición de dominio implica que las mismas operaciones son realizadas en forma relativamente independiente en cada una de las partes sobre los datos asociados a las entidades que pertenecen a ésta. En las aplicaciones usuales que operan sobre mallas (volúmenes finitos, elementos finitos, etc.) se requiere generalmente para la concreción de estas operaciones, información asociada a entidades de malla remotas. Una forma de proveer esta información es mediante copias con acceso de lectura de los datos asociados a estas entidades realizando actualizaciones periódicas mediante el envío y recibo de mensajes entre las partes. La definición de cuáles son las entidades de malla que son requeridas por una dada aplicación puede en general ser formalmente definida mediante la utilización del concepto de *stencil* y *entidades fantasma*.

Definición 4.4.9 (Stencil). Sea una entidad de malla $M_i^q \in M, q \leq d$ perteneciente a una malla M^d . Sea una secuencia $I_n = (a_0, a_1, \dots, a_n), 0 \leq a_i \leq d, a_0 = q$. Se define al stencil $\mathcal{L}_{I_n}(M_i^q)$ asociado a la secuencia I_n como el conjunto de entidades de malla definido en forma recursiva mediante:

$$\mathcal{S}^{(0)}(M_i^q) := M_i^{a_0} \quad (4.1)$$

$$\mathcal{S}^{(k)}(M_i^q) := \bigcup \left\{ M_r^{a_{k-1}} \{ M_q^{a_k} \} \mid M_r^{a_{k-1}} \in \mathcal{S}^{(k-1)}(M_i^q) \right\} \quad (4.2)$$

$$\mathcal{L}_{I_n}(M_i^q) = \bigcup_{k=0}^n \mathcal{S}^{(k)}(M_i^q) \quad (4.3)$$

Una clase más restrictiva de stencils la forman los stencils *basados en las celdas*. Esta clase de stencils para una malla d -dimensional presentan una secuencia de adyacencias de la forma $I_n = (d, \underbrace{b,d}_0, \underbrace{b,d}_1, \dots, \underbrace{b,d}_n)$ que depende únicamente de dos parámetros: b denominado *dimensión puente* y n denominado *profundidad* o *número de capas* del stencil.

Un ejemplo ilustrativo del concepto de stencil definido por estos parámetros se muestra en la Fig. 4.3.

Basados en el concepto de stencil se introduce una nueva clase de entidades. Estas son las entidades remotas fantasma, o simplemente entidades fantasma.

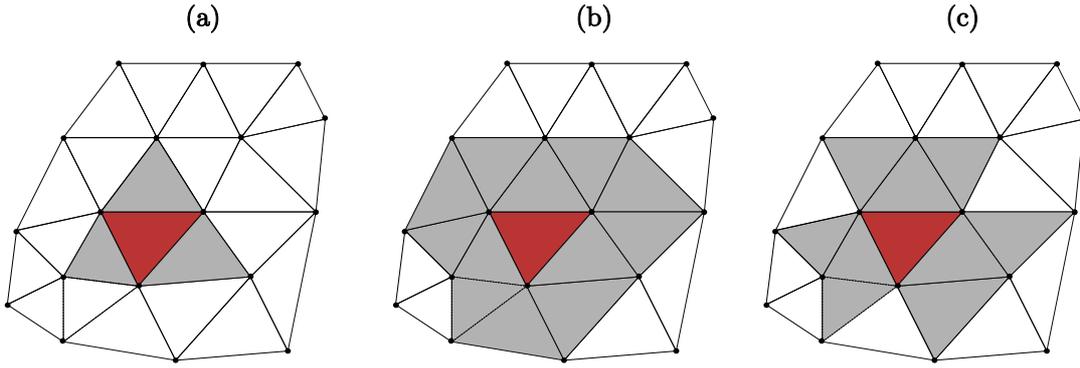


Figura 4.3: Ejemplos de stencil. (a): dimensión puente = 1 , profundidad = 1; (b): dimensión puente = 0, profundidad = 1; (c): dimensión puente = 1, profundidad= 2.

Definición 4.4.10 (Entidades fantasma). Sea una partición \mathcal{P} de una malla M . Sea una parte $\mathcal{P}_i \in \mathcal{P}$. Decimos que una entidad remota de \mathcal{P}_i es una *entidad fantasma* de \mathcal{P}_i , si dado un algoritmo que opera en \mathcal{P}_i con un stencil asociado \mathcal{L}_{I_n} , existe una entidad de malla $\mathcal{M}_k^r \in \mathcal{P}_i$ tal que $\mathcal{M}_j^q \in \mathcal{L}_{I_n}(\mathcal{M}_k^r)$.

A modo de ilustración de estos conceptos en la Fig. 4.4 se muestra el conjunto de celdas fantasma para dos particiones, correspondientes a un stencil de un esquema de volúmenes finitos general de primer orden basado en las celdas.

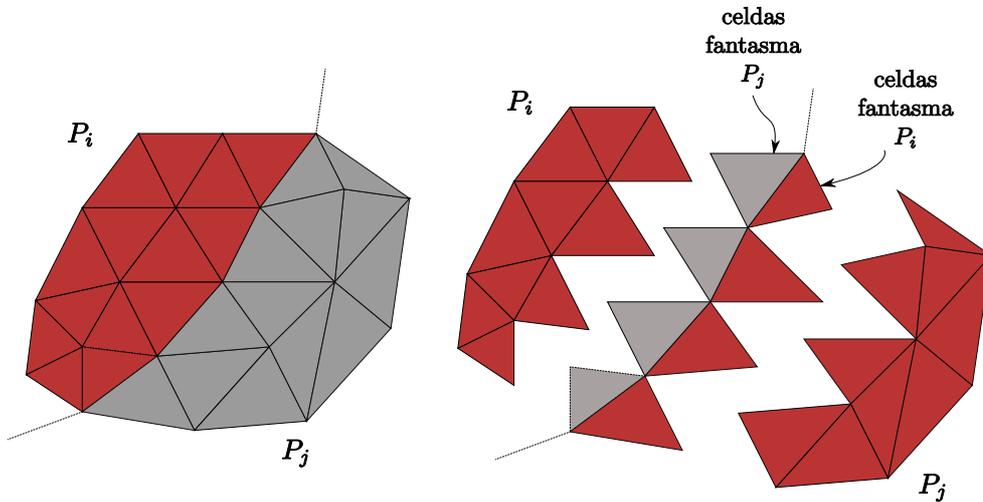


Figura 4.4: Partición de mallas distribuidas: celdas fantasma

4.5 Representación computacional de la topología de malla

Una representación computacional de la topología de malla, es una estructura de datos que permite responder requerimientos básicos sobre las entidades de malla y sus relaciones de adyacencia. De forma de definir formalmente una representación de malla, introducimos el concepto de matriz de incidencia \mathcal{I} . Para una malla de dimensión 3, esta es una matriz de tamaño 4×4 cuyos elementos se definen de la siguiente manera. Por defecto, los elementos de la matriz \mathcal{I} son nulos. Luego $\mathcal{I}_{i,i} = 1$ si las entidades de malla de dimensión i están presentes en la representación. $\mathcal{I}_{i,j} = 1$ si $\mathcal{I}_{i,i} = \mathcal{I}_{j,j} = 1$ y además las adyacencias de las entidades de dimensión i a las entidades de dimensión j se encuentran explícitamente almacenadas en la representación.

Se dice que una entidad de malla M_i^d tiene *acceso directo* a sus adyacencias de dimensión d' , $M_i^d \{M^{d'}\}$, si $\mathcal{I}_{d,d'} = 1$. En el caso de que se utilice otro conjunto de adyacencias para obtener el deseado, se dice que se tiene un *acceso indirecto*. Una representación de malla se dice *completa* si una adyacencia cualquiera para cualquier entidad de malla puede ser obtenida en tiempo constante, es decir sin necesidad de realizar una operación global sobre las entidades de malla. Caso contrario, se dice que la representación de malla es *incompleta*. Debido a que una representación incompleta puede dar lugar a algoritmos de orden cuadrático en el número de entidades de la malla es que no son consideradas en este trabajo. Otra clasificación que surge en las representaciones de malla diferencia a estas en *llenas* cuando todas las entidades se hayan explícitamente representadas o en *reducidas* cuando existen entidades que no se encuentran almacenadas. En una representación reducida, las entidades implícitas son creadas automáticamente cuando son requeridas utilizando plantillas predefinidas. Por ejemplo, si una faceta no existe en la representación, esta es creada a partir de una plantilla que define las facetas de una celda en términos de los vértices de la misma. Uno de los problemas al usar plantillas para la creación automática de entidades es el mantenimiento de la consistencia [18]. Por ejemplo, en una faceta común a dos celdas, si esta es creada a partir de la primer celda, su orientación puede ser distinta a si es creada aplicando una plantilla sobre la segunda celda. Esto tiene efecto entre otros en los algoritmos de comparación de entidades así como en el acceso a datos asociados a entidades implícitas para la cual diversas soluciones han sido propuestas [52, 18, 133, 32]. El tratamiento de estos problemas está fuera del alcance de este trabajo por lo que la estructura de datos ha sido basada asumiendo representaciones llenas similar en este sentido a la librería MOAB [149]. Por otro lado, consideramos que esto no es una limitante debido a que la interface provista ha sido diseñada de forma tal que no es dependiente del tipo

de representación asumida, por lo que la virtual capacidad de manipulación de entidades implícitas que podría implementarse a futuro, no afectaría al código perteneciente a la capa de aplicaciones.

4.6 Requerimientos de la representación

Hasta aquí hemos introducido formalmente cuales son los conceptos básicos que forman el dominio básico de un sistema que provea información topológica sobre mallas distribuidas. Basados en este análisis podemos identificar una serie de servicios mínimos que debe proveer un sistema orientado a aplicaciones sobre mallas distribuidas en paralelo. Hemos clasificado estos requerimientos en dos familias principales cada una de las cuales se detalla a continuación:

1. Requerimientos sobre la estructura topológica de la malla.

- Iteración sobre las entidades de malla (vértices, aristas, facetas, celdas).
- Información sobre el número de entidades.
- Obtención e iteración sobre las entidades de malla adyacentes a una entidad dada.
- Asignación de una enumeración consecutiva a las entidades de malla.
- Identificación de entidades pertenecientes al borde del dominio.
- Comparación de entidades.

2. Requerimientos sobre la partición de la malla.

- Creación de una partición de malla basada en las celdas, satisfaciendo los requerimientos de balance de carga y minimización de la comunicación entre las partes.
- Identificación de entidades interiores, compartidas y/o remotas.
- Obtención de entidades remotas fantasmas para stencils arbitrarios
- Enumeración global y local de las entidades.
- Consistencia de las entidades de borde y remotas entre partes.

Una serie de requerimientos adicionales que han sido considerados al diseñar la estructura de datos, se encuentran relacionados con la capacidad de transformación dinámica de la malla. Basados en [141], identificamos tres requerimientos mínimos:

- Creación y remoción dinámica de entidades de malla.
- Migración de entidades entre partes.
- Balanceo dinámico de la partición.

4.7 Sistema orientado a objetos para la representación de mallas distribuidas

4.7.1 Modelo de malla. La clase `Mesh`

La clase que denominamos `Mesh` es la clase central del sistema y provee los servicios básicos para la manipulación de mallas: inserción, remoción y almacenamiento en memoria de las entidades de malla, iteración sobre las entidades, algoritmos para la obtención de adyacencias, entre otros. En la Fig. 4.5 se presenta el diagrama UML[135] de esta clase. En este diagrama se muestran algunas de las funciones principales que provee la clase, las cuales son:

- **`createMeshEntity`** dado un arreglo de instancias de entidades de malla crea una entidad de la dimensión topológica requerida cuyas adyacencias corresponden a las del arreglo dato. El argumento `MeshEntityTemplate` representa la plantilla a partir de la cual se obtienen las adyacencias intermedias, dadas las adyacencias datos. Por ejemplo, si una celda se define por sus vértices, este objeto permite obtener los vértices que forman las caras de la celda.
- **`deleteMeshEntity`** destruye la entidad de malla a la que se refiere la instancia dada como dato.
- **`getMeshEntityIterator`** devuelve un iterador sobre las entidades de la dimensión topológica dada como dato.
- **`getMeshEntityAdjacencies`** devuelve un array de entidades adyacentes a la entidad dato de la dimensión requerida.
- **`meshEntityExist`** si es verdadera devuelve la entidad de malla de la dimensión requerida, cuyas adyacencias son las del array de entidades ingresada como dato. Caso contrario devuelve una instancia de entidad inactiva.
- **`setRepresentationMatrix`, `getRepresentationMatrix`** asigna y devuelve la matriz de representación de la malla respectivamente.

- **getRegionVolume**, **getFaceArea**, **getEdgeLength**, **getVertexCoords**: devuelve el volumen de una región, el área de una faceta, la longitud de una arista y las coordenadas de un vértice respectivamente. Otras funciones geométricas no han sido mostradas, si bien la mayoría de estas funciones pueden derivarse a partir de la obtención de los vértices adyacentes a una entidad de malla y las coordenadas de éstos.

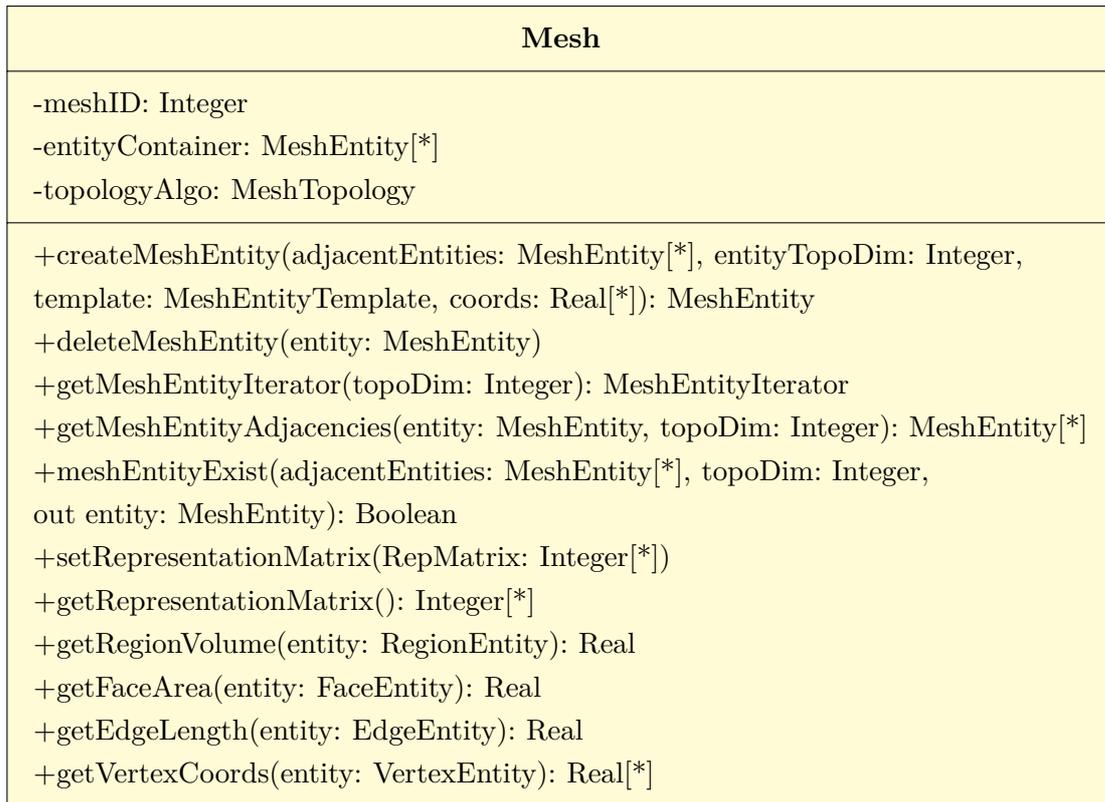


Figura 4.5: Diagrama UML de la clase Mesh

4.7.2 Modelo entidades de malla. Las clases MeshEntityData y MeshEntity

El modelo de entidades de malla es representado mediante dos clases. La primera, que se denomina **MeshEntityData** y se presenta en la Fig. 4.6, es una clase cuyo único fin es almacenar en memoria los datos mínimos y necesarios para proveer información sobre la topología de la malla. En el diagrama UML de esta clase se denotan los datos miembros que corresponden a:

- **entityID** representa el número de identificación de la entidad. Este es un valor único para las entidades de una misma dimensión topológica.

- **meshID** es un dato miembro opcional que representa el identificador de la malla a la cual pertenece la entidad, único para cada instancia de la clase **Mesh**.
- **topoDim** representa la dimensión topológica de la entidad.
- **adjEntities** arreglo que representa las entidades adyacentes que son almacenadas explícitamente en memoria.

Si bien no representado en el diagrama UML, en realidad las adyacencias son almacenados mediante arreglos independientes para las adyacencias hacia arriba y hacia abajo. Debido a que el número de adyacencias hacia arriba es arbitrario en mallas no estructuradas, estos arreglos son elegidos como dinámicos. En el caso de adyacencias hacia abajo el tamaño del arreglo es previamente conocido por lo tanto este es de tipo estático. Como en nuestra estructura de datos, el conjunto de adyacencias que son almacenadas son establecidas por el usuario en tiempo de corrida, estos arreglos son inicializados en memoria únicamente si las adyacencias son explícitamente requeridas, siendo esto determinado por la matriz de representación de la malla.

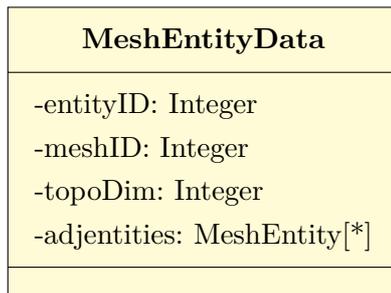


Figura 4.6: Diagrama UML de la clase **MeshEntityData**.

En el código de aplicación, se requiere generalmente tener varias copias simultáneas de una misma instancia de entidad de malla. Debido a que una instancia de la clase **MeshEntityData** posee un relativo costo de memoria es que se ha decidido utilizar una clase que denominamos **MeshEntity**, cuyo único dato miembro es un puntero a una instancia de la clase **MeshEntityData** y que además posee acceso directo a los datos privados de la misma. De la clase **MeshEntity** derivan a su vez las clases que representan las entidades de cada dimensión topológica, estas son para el caso tridimensional las clases asociadas al modelo de vértices **VertexEntity**, aristas o bordes **EdgeEntity**, caras **FaceEntity** y celdas (o regiones) **RegionEntity**.

4.7.3 Contenedor de entidades de malla.

Uno de los objetivos principales que se plantearon al momento de diseñar el contenedor de entidades es la capacidad de ingresar y remover entidades del mismo en forma dinámica. Con este fin es necesario que la implementación del contenedor corresponda a un tipo de estructura de datos dinámico. La elección de ésta debe tener en cuenta la eficiencia de las operaciones de inserción y remoción de elementos, la administración eficiente de las operaciones de asignación (y/o liberación) de memoria así como la consistencia y eficiencia en el acceso a los elementos. Las librerías de mallas existentes basadas en el lenguaje C++ recurren en general a los contenedores provistos en la *Standard Template Library*. Entre estos, los contenedores de entidades son usualmente almacenados en estructuras del tipo mapa `std::map`[133] o lista enlazada `std::list`[35]. En el lenguaje Fortran 2003 no existen librerías disponibles que implementen estructuras de datos dinámicas por lo que es necesario recurrir a una implementación propia. Al momento de decidir la implementación se establecieron las siguientes operaciones como requerimiento básico del contenedor:

- Leer(i): devuelve la entidad con índice i , $0 \leq i \leq n$.
- Insertar(i, \mathcal{M}_i): inserta la entidad \mathcal{M}_i en el contenedor y le asigna el índice i .
- Remover(\mathcal{M}_i): remueve la entidad con índice i .
- Índice(\mathcal{M}_i): devuelve el índice de la entidad \mathcal{M}_i .

La estructura de datos que se ha implementado con el fin de brindar estas operaciones corresponde a un *tiered vector* [58]. Un *tiered vector* consiste básicamente en un conjunto de colas de doble entrada (más conocidas como *deques*) [86], a las cuales le es adicionada una estructura de índices que apuntan al inicio y final de cada cola de forma tal que la estructura provee $\mathcal{O}(1)$ en la lectura aleatoria de elementos y $\mathcal{O}(\sqrt{n})$ amortizado en la inserción y remoción de elementos para un contenedor de tamaño n utilizando un tamaño de memoria adicional de $\mathcal{O}(n)$ [58]. En nuestra implementación de un *tiered vector* y a diferencia de [58] donde se utiliza un conjunto de \sqrt{n} colas de doble entrada de tamaño \sqrt{n} para representar un contenedor de n elementos, se ha empleado un conjunto de colas de doble entrada cuyo tamaño se obtiene a partir de la estrategia de crecimiento y decrecimiento introducida en Brodnik *et al.* [25]. Siguiendo esta estrategia se obtiene un conjunto de $\mathcal{O}(\sqrt{n})$ colas de doble entrada cuyo tamaño es de $\Theta(\sqrt{n})$, por lo que el orden de las operaciones es similar al *tiered vector* original, con la ventaja que se utiliza un tamaño de memoria adicional para el mantenimiento de la estructura, el cuál es de orden óptimo $\mathcal{O}(\sqrt{n})$ [58].

4.7.4 Iteración sobre las entidades

El acceso a las entidades almacenadas en la clase **Mesh** se realiza mediante una clase de tipo iterador [51]. Esta elección de diseño se debe a que la misma no expone la estructura interna del contenedor empleado, la cual no es de interés para el usuario de la clase. El diagrama UML de la clase **MeshEntityIterator** que representa el modelo de iterador de entidades se presenta en la figura Fig. 4.7. El iterador puede ser utilizado de dos formas. La primer forma que se presenta en la Fig. 4.8 es general, y ha sido implementada internamente de forma tal que es robusta ante cambios dinámicos de la malla. La segunda forma, presentada en la Fig. 4.9 es más eficiente, sin embargo la iteración en este caso únicamente es válida para mallas de tipo estático por lo que si es efectuada la inserción o remoción de entidades en forma simultánea al uso del iterador, este último queda invalidado.

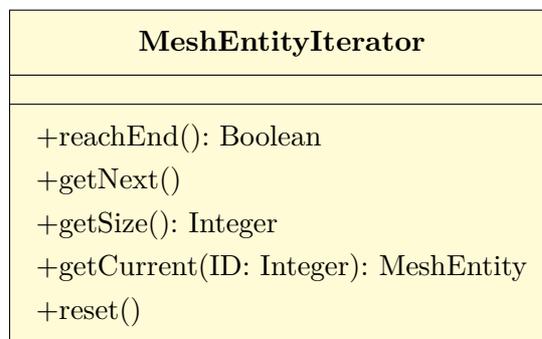


Figura 4.7: Diagrama UML de la clase **MeshEntityIterator**.

4.7.5 Obtención de adyacencias

Los algoritmos para la obtención de adyacencias son dependientes de cuales adyacencias son explícitamente o no almacenadas en memoria [52]. Debido a que la implementación de estos algoritmos para cada una de las representaciones posibles comprende un esfuerzo de programación excesivo, es que se ha adoptado un patrón de tipo "estrategia" *strategy pattern* [51], mediante una clase abstracta interna **MeshTopology** (v. Fig. 4.5) cuyas clases derivadas son las encargadas de proveer los algoritmos concretos correspondientes. Actualmente en el sistema se ha implementado una única clase derivada que provee los algoritmos correspondientes a una representación que almacena todas las adyacencias entre entidades que difieren en una dimensión, es decir en el caso bidimensional, las adyacencias hacia abajo caras-aristas, aristas-vértices y las adyacencias hacia arriba vértices-aristas y aristas-caras.

```

subroutine iteratorUse(container)
  type(Mesh),intent(in) :: container
  type(MeshEntityIterator) :: iterator
  type(Entity) :: entity
  ! iterador sobre los vértices
  iterator = container%getIterator(topoDim = 0 )
  do
  ! si alcanza el final del contenedor sale
  if(iterator%reachEnd()) exit
  ! devuelve la entidad ubicada en la posición del contenedor
  ! al que apunta el iterador
  entity= iterator%getCurrent()
  ! avanza hacia la siguiente entidad en el contenedor
  call iterator%getNext()
  end do
  ! vuelve al iterador a la posición de inicio
  call iterator%reset()
end subroutine

```

Figura 4.8: Código ejemplo de uso del iterador de entidades.

```

subroutine iteratorUseStatic(container)
  type(Mesh),intent(in) :: container
  type(MeshEntityIterator) :: iterator
  type(Entity) :: entity
  integer :: pos
  ! iterador sobre los vértices
  iterator = container%getIterator(topoDim = 0 )
  do pos = 1 , iterator%getSize()
  entity = iterator%getCurrent(pos)
  ! devuelve la entidad de dimensión topológica
  ! TopoDim cuya posición en el contenedor es pos
  end do
end subroutine

```

Figura 4.9: Código ejemplo de uso del iterador de entidades en una malla estática.

4.7.6 Propiedades geométricas

Las propiedades geométricas asociadas a las entidades de malla y relevantes a la aplicación de este trabajo, han sido encapsuladas dentro de la interface de la clase `Mesh` y son

obtenidas internamente mediante las rutinas de la librería de Fortran 90 GEOMETRY [26] disponible bajo licencia GNU LGPL.

4.8 Representación del modelo de malla distribuida. La clase PMesh

La clase `PMesh` cuyo diagrama UML se muestra en la Fig. 4.10, es una clase derivada de la clase `Mesh` y extiende las funcionalidades de ésta a un modelo de malla distribuida. Provee servicios tales como la identificación de las relaciones de propiedad de una entidad de malla con respecto a una partición, la asignación de una numeración global a las entidades de malla, así como la partición del dominio, la migración de entidades y la construcción de celdas remotas para un stencil requerido en la aplicación.

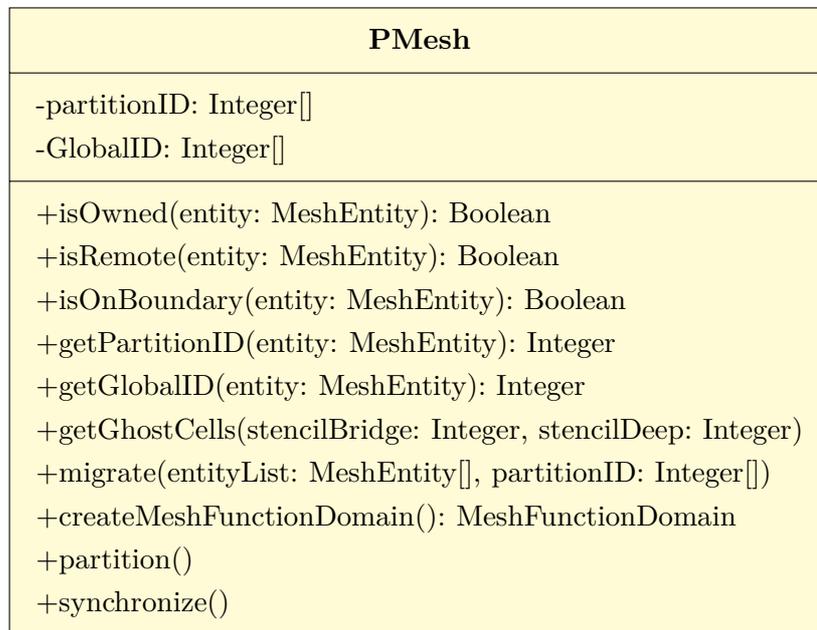


Figura 4.10: Diagrama UML de la clase `PMesh`

4.8.1 Partición de la malla

La tarea de partición de malla es realizada internamente mediante la librería externa ParMETIS [50]. Esta librería obtiene la partición de una malla en forma paralelizada utilizando un algoritmo basado en la estructura de grafo de la topología de la malla. En el método de descomposición de dominio basado en las celdas los vértices de este grafo corresponden a las celdas de la malla y las aristas unen las celdas vecinas, es decir, aquellas que tienen una faceta en común. El algoritmo de partición busca balancear la carga entre

las partes (el número de celdas asignado a cada una), teniendo en cuenta los costos de comunicación entre procesadores mediante la asignación de una función de peso a las aristas del grafo. El resultado de la rutina de partición es una lista con la numeración de la nueva partición a la cual deben ser migradas las celdas.

4.8.2 Migración de entidades

La migración de entidades se realiza comenzando con un intercambio colectivo de mensajes para determinar cuales son aquellos procesadores que iniciarán el envío de entidades. A continuación se emiten los correspondientes mensajes mediante mensajes no bloqueantes. Estos mensajes consisten en el pasaje de las adyacencias entidad-vértice de la correspondiente entidad a migrar. Una vez receptados los mensajes en cada procesador, a partir de la información recibida se adiciona a la parte local las entidades importadas.

4.8.3 Obtención de celdas fantasmas

El algoritmo de obtención de celdas remotas fantasmas requeridas por el stencil de la aplicación, se implementa internamente a partir del almacenamiento en memoria de la adyacencia de segundo orden celda-celda, donde para cada celda esta adyacencia indica todas las celdas que comparten al menos una cara con la misma. Esta adyacencia se obtiene en paralelo usando rutinas disponibles en la librería ParMETIS. Mediante esta adyacencia y la adyacencia celda-vértice almacenadas como arreglos de la librería GA, se implementa un sencillo algoritmo que realiza una búsqueda de todas las celdas remotas requeridas por el stencil empleando únicamente comunicación de tipo unilateral a medida que se avanza en la construcción de las capas.

4.9 Preprocesamiento y Postprocesamiento

La estructura de datos aquí propuesta no es dependiente de un determinado formato de malla. Distintos formatos pueden ser implementados si se brindan las plantillas utilizadas por el mismo para definir por ejemplo dados los vértices de las celdas, los vértices de las caras. No obstante actualmente han sido implementadas rutinas para la lectura y escritura de mallas, así como la escritura de resultados en el formato *CFD General Notation System CGNS* [129]. Este formato, además de ser considerado una práctica recomendada por el Instituto Americano de Aeronáutica y Astronáutica (AIAA), brinda una librería de acceso libre con utilidades tanto para la lectura y escritura de mallas estructuradas y no estruc-

turadas, como para los campos de soluciones asociados a la misma generalmente presentes en códigos de cálculo fluido-dinámico. En la implementación de la rutina de lectura en paralelo de mallas en el formato CGNS, se ha asumido que un sólo procesador posee capacidades de lectura-escritura. De modo de obtener escalabilidad en memoria, la malla nunca es almacenada en forma completa en la memoria de este procesador, sino que es leída por bloques que son enviados mediante sentencias no bloqueantes a los respectivos procesadores. De esta forma la memoria utilizada por cada procesador nunca es superior a una memoria del orden del número de elementos de la malla sobre la cantidad de procesadores disponibles en el sistema distribuido.

4.10 Funciones de malla

El concepto de funciones de malla representa aquellos campos que se encuentran asociados a entidades de malla. Por ejemplo, en el método de los volúmenes finitos que nos compete, las incógnitas del problema se asocian a las celdas requiriéndose además la obtención de flujos numéricos asociados a las caras. Adicionalmente, ciertas regiones del dominio requieren un tratamiento especial, por ejemplo en el caso de la aplicación de condiciones de borde, o cuando el dominio computacional representa diferentes regiones físicas del problema, (con distinto tipo de incógnitas) tal el caso de problemas de interacción fluido-estructura. Es de interés por lo tanto una estructura de datos que pueda satisfacer la siguiente pregunta general: dada una entidad de malla y un campo asociado, ¿qué valor toma el campo para esta entidad?

Al momento de implementar computacionalmente una función de malla, debemos necesariamente acotar el rango de lo que se puede representar y más aún cómo lo podemos representar, en especial considerando la eficiencia. En mecánica computacional son de particular interés las funciones de malla definidas sobre campos escalares o vectoriales de tipo primitivo (reales, enteros, lógico, etc.). Debido a razones de eficiencia estos campos se almacenan preferentemente mediante arreglos de memoria contigua. El acceso a estos campos es realizado de distintas maneras, dependiendo del tipo de algoritmo involucrado. Ejemplos de estos patrones de acceso incluyen los siguientes:

- Acceso a todos los datos del campo en forma colectiva sin necesidad de conocer las entidades asociadas. Este tipo de acceso es común en operaciones colectivas tales como la adición de dos campos o el cálculo de la norma, en el cálculo de los términos fuente de PDEs, en operaciones de resolución de sistemas lineales, etc.

- Acceso colectivos sobre un subconjunto restringido de entidades. Un ejemplo típico es en la aplicación de condiciones de borde.
- Acceso específico sobre una entidad de malla y/o sobre determinadas adyacencias. Por ejemplo, en elementos finitos, acceder a los datos asociados a los nodos de un elemento, o en volúmenes finitos, dada una cara, el acceso a los datos sobre las celdas adyacentes a la cara, para el cálculo de flujos numéricos.

Antes de proseguir introducimos dos conceptos que nos permiten luego introducir las clases que definen los modelos de función de malla. Introducimos en primera instancia el concepto de *dominio* tal como es aquí entendido.

Definición 4.10.1 (Dominio). Un dominio D es una sucesión finita de n elementos $\{d_0, d_1, \dots, d_{n-1}\}$ donde el mapeo $f : \{0, 1, \dots, n-1\} \rightarrow D$ es una función biyectiva. Decimos entonces que i es el *identificador* del elemento d_i perteneciente al dominio D y que n es el *tamaño* del dominio.

El concepto de dominio nos permite introducir el de dominio distribuido.

Definición 4.10.2 (Dominio Distribuido). Un dominio distribuido, \mathcal{D} es una colección de p dominios D_i mutuamente disjuntos,

$$\mathcal{D} = \bigsqcup_{i=0}^{p-1} D_i$$

Sea n_i el tamaño del dominio D_i . Luego la suma

$$n = \sum_{i=0}^{p-1} n_i$$

es denominada *tamaño global* del dominio distribuido \mathcal{D} .

En el caso de dominios distribuidos, el número identificador de un elemento con respecto al subdominio D_i se denomina *identificador local*. Es necesario definir adicionalmente una numeración global de cada elemento con respecto al dominio distribuido. La forma que aquí utilizamos se encuentra dada por:

$$j_G = j + b_i \tag{4.4}$$

donde j_G es la numeración global del elemento d_j del subdominio D_i y donde la función de *offset* b_i se encuentra dada por:

$$b_i = \sum_{k=0}^{i-1} n_k$$

donde n_k es el tamaño del subdominio D_k .

Estos conceptos nos permiten finalmente definir el dominio de función de malla.

Definición 4.10.3 (Dominio de función de malla). Un dominio de función de malla (distribuida) es un dominio (distribuido) cuyos elementos son entidades de malla.

4.10.1 Modelo de dominio de función de malla. La clase `MeshFunctionDomain`

En nuestro sistema la clase `MeshFunctionDomain` implementa el concepto de dominio de funciones definidas sobre mallas distribuidas. Esta clase tiene la responsabilidad de asignar una numeración local y global a un dominio distribuido cuyos elementos son entidades de malla. Por razones de eficiencia el comportamiento de esta clase ha sido diseñado de acuerdo a una estructura de búsqueda de tipo estático [140]. Este tipo de estructuras en su forma más simple comprenden únicamente operaciones de dos tipos: inicialización y posterior obtención de información. La inicialización de una instancia de `MeshEntityDomain` se obtiene mediante la definición de las entidades de malla que forman el dominio. La interfaz provee la posibilidad de definir un dominio homogéneo (formado por todas las entidades de una malla de una dimensión topológica) o de un dominio heterogéneos formados por entidades de malla de dimensión arbitraria. Una vez finalizada la definición del dominio se procede a la creación de una función hash que permite mapear el identificador de una entidad dada en una numeración local y global de la entidad con respecto al dominio. La función hash empleada corresponde a una función hash perfecta mínima (sin colisiones) del tipo introducida en [24]. Este tipo de función provee orden constante en el acceso a los valores de la función, empleando un espacio óptimo de memoria. La implementación de esta función se obtiene a partir de la librería externa *C Minimal Perfect Hashing Library*[2]. En el caso de dominios heterogéneos son creadas tantas funciones de hash como dimensiones topológicas distintas posean las entidades del dominio. En mallas distribuidas, la numeración local de las entidades enumera primero las entidades que pertenecen a la partición, para luego enumerar a las entidades remotas. Todos los detalles de implementación son encapsulados dentro de la interface de la clase que se presenta en la Fig. 4.11. Las operaciones relevantes de la clase son:

- `insertMeshEntity` adiciona un array de entidades de malla al dominio de la función.

MeshFunctionDomain
-entityIDToLocalNum: HashFunction
+insertMeshEntity(entity: MeshEntity[]) +freeze() +getMeshEntityLocalPosition(entity: MeshEntity): Integer +getMeshEntityGlobalPosition(entity: MeshEntity): Integer +associateMeshFunction(): MeshFunction

Figura 4.11: Diagrama UML de la clase `MeshFunctionDomain`.

- **freeze** “congela” la estructura de datos. Es decir, luego de un llamado a esta función se crea la función de hash y no se permiten posteriores inserciones.
- **getMeshEntityLocalPosition**, **getMeshEntityGlobalPosition** devuelven la numeración local y global de la entidad correspondiente respectivamente.
- **associateMeshFunction** asocia una función de malla al dominio actual.

Basados en la estrategia de numeración provista por la clase `MeshFunctionDomain`, se implementan distintos modelos de funciones de malla, en particular funciones cuya imagen es de tipo real, entero y lógico, tanto de carácter escalar como vectorial y/o tensorial. Estas clases proveen tres tipos de patrones de acceso de los valores almacenados en un array: acceso local a los valores asociados a una entidad de malla dada, acceso de los valores asociados un grupo de entidades o acceso total a todos los valores almacenados en la función. Por razones de eficiencia el acceso a los datos almacenados en una instancia de la clase `MeshFunction` no se realiza mediante el copiado de los datos sino que es realizada a través de punteros de memoria. Debe aclararse además que cada procesador posee propiedades de escritura-lectura únicamente sobre los valores de la función asociados a entidades que pertenecen a la parte, teniendo únicamente acceso de lectura sobre los valores de la función asociados a entidades remotas. En la Fig. 4.12 se muestra el diagrama UML de la clase genérica `MeshFunction` de la cual derivan todas las clases concretas que implementan las funciones de malla para los tipos de datos mencionados. Una esquema general del sistema se muestra en el diagrama de clases de la Fig. 4.13 en tanto un código ejemplo que muestra los procedimientos de creación, inicialización y acceso de funciones de malla se presenta en la Fig. 4.14.

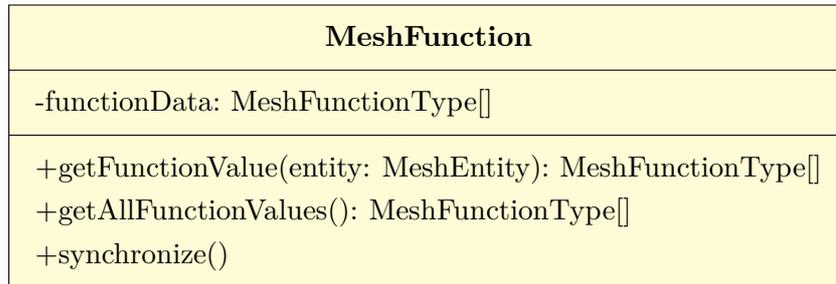


Figura 4.12: Diagrama UML de la clase MeshFunction

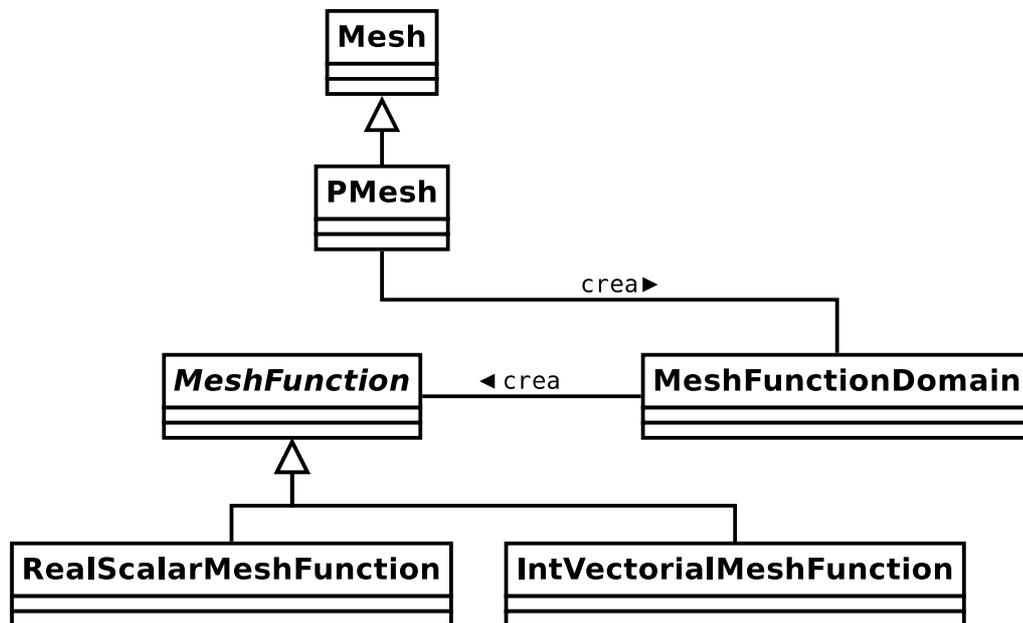


Figura 4.13: Diagrama de clases

```

subroutine MeshFunctionCreation(thisPMesh)
  type(PMesh), intent(in) :: thisPMesh
  type(MeshFunctionDomain) :: thisDomain
  type(RealVectorialMeshFunction) :: Velocity
  integer(ikp), parameter :: ONRegions = 3
  real(rkp), pointer :: currentVelocity(:), allVelocity(:, :)
  type(MeshEntityIterator) :: iterator
  ! Ea clase PMesh es responsable de la inicialización consistente
  ! de un dominio homogéneo definido sobre todas las celdas de la malla
  thisDomain = thisPMesh%createMeshFunctionDomain(domainDim=ONRegions)
  call thisDomain%freeze() ! se crea la función de hash estática
  ! El dominio es responsable de la creación
  ! de una función vectorial real de tres componentes
  ! en este caso para almacenar el vector velocidad
  Velocity = thisDomain%associateMeshFunction( ncomp = 3)
  iterator = thisPMesh%getiterator(ONRegions)
  ! Ejemplo de acceso secuencial por entidad
  iterator = this%PMesh%getRegionIterator
  do
    if(iterator%reachend()) exit
    currentRegion = iterator%getcurrent()
    currentVelocity => Velocity%getFunctionValue(currentRegion)
  ! realiza algún cálculo
    call iterator%getnext()
  end do
  ! Ejemplo de acceso total
  allVelocity => Velocity%getAllFunctionValues()
  ! Sincroniza los valores asociados a las celdas fantasmas
  call Velocity%synchronize()
end subroutine

```

Figura 4.14: Código ejemplo de creación de funciones de malla.

4.11 Aplicación del sistema al esquema de volúmenes finitos

El sistema orientado a objetos de administración de la topología de la malla y de campos asociados a esta en sistemas distribuidos hasta aquí descrito ha sido aplicado extensivamente en el esquema de volúmenes finitos desarrollado en esta tesis. Principalmente en una etapa de preproceso son creados mediante el mismo todos los campos necesarios tales como los relacionados con las variables conservativas, primitivas y de transporte asociados a las celdas, como a las propiedades geométricas asociadas a las celdas (volumen), caras (áreas, normales), y aristas (longitudes). Por razones de eficiencia en las rutinas de evaluación de los flujos numéricos se ha hecho uso de las conectividades cara-celda, almacenada como un arreglo de enteros que para cada cara denota la numeración local de las celdas adyacentes. Este arreglo es construido sencillamente en una instancia de preproceso empleando la numeración provista por el sistema orientado a objetos. Otro arreglo de este tipo es almacenado, por ejemplo, para el stencil requerido en la obtención de los gradientes por el método de mínimos cuadrados. El sistema diseñado ha facilitado y permitido la implementación del esquema en una forma independiente de la dimensión de la malla y más aún requiriendo un número mínimo de líneas de código referidas al paralelizado, prácticamente siendo estas únicamente las llamadas al método de sincronización provista por la interface de las funciones de malla.

Finalmente y de manera de ilustrar el funcionamiento general del código se presenta en la Fig. 4.15 se presenta el diagrama de flujo general del esquema de volúmenes finitos implementado.

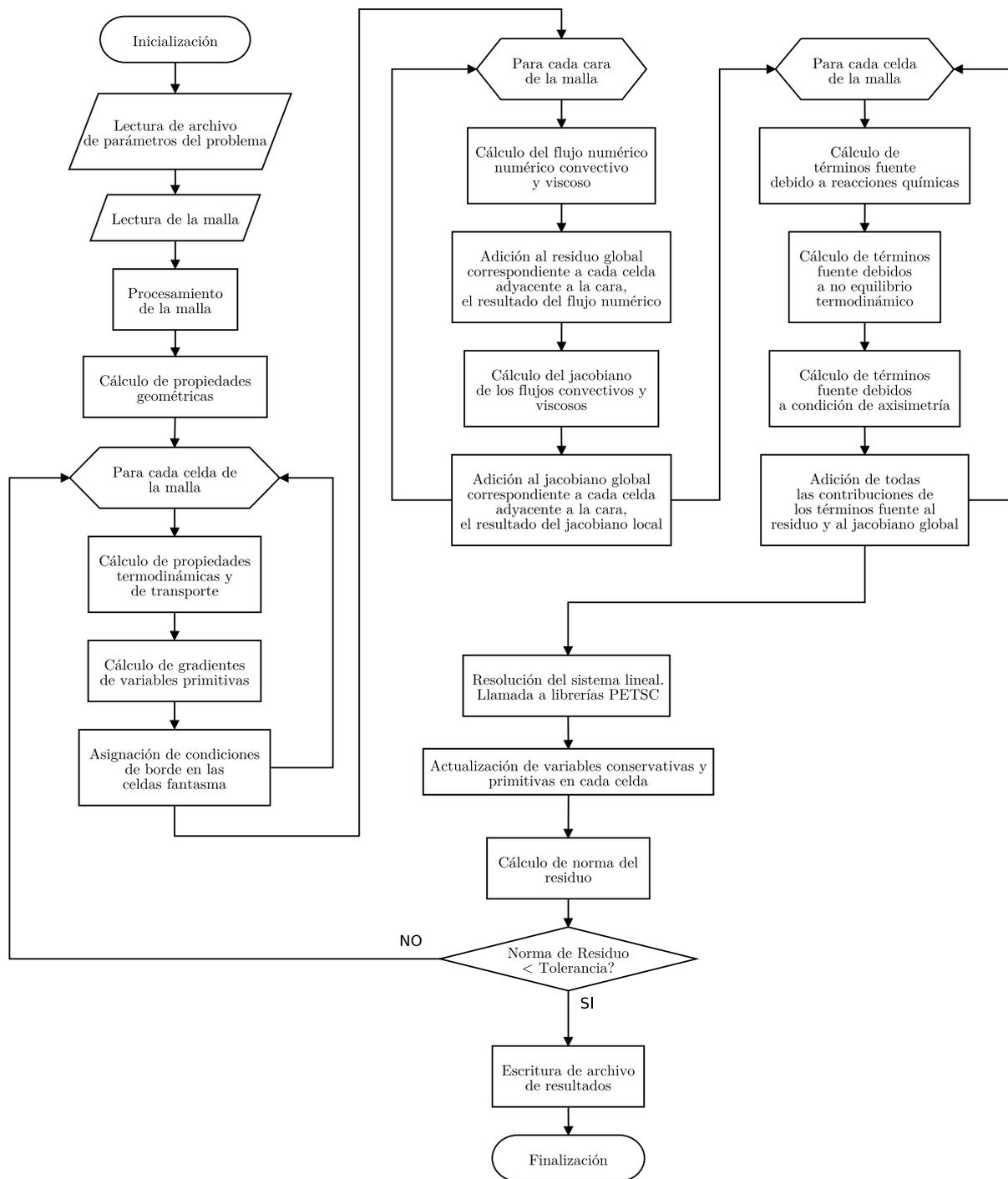


Figura 4.15: Diagrama de flujo general del esquema de volúmenes finitos implementado.

5.1 Introducción

Con el objetivo de evaluar y validar el código desarrollado se presentan en este capítulo resultados de simulaciones numéricas del flujo hipersónico estacionario sobre distintas configuraciones correspondientes tanto a ensayos en vuelo como a experimentos en túneles de viento. Las condiciones del flujo en todos los casos corresponden al régimen laminar de forma tal que se evita la introducción de incertezas producto de la falta de modelado de la turbulencia. El primer conjunto de resultados presentados comprenden una serie de ensayos en vuelo denominados RAM-C, en el cual las condiciones son tales que se presenta ionización parcial del gas y no equilibrio termodinámico. El segundo conjunto corresponde a un modelo de una sonda de reentrada atmosférica empleada en un experimento realizado en el tubo de expansión HYPULSE [72]. Este experimento fue llevado a cabo con el objetivo de realizar mediciones de la transferencia de calor sobre vehículos de reentrada en condiciones de no equilibrio termoquímico, con especial énfasis en la zona de la estela donde se presenta una fuerte interacción de flujo recirculante. En ambos conjuntos de resultados se utiliza una formulación bidimensional con simetría axial.

Las capacidades del código de simular flujos tridimensionales son evaluadas mediante la obtención de resultados del campo de movimiento sobre una configuración cilíndrica empleada en una serie de experimentos llevada a cabo en el túnel HEG [76]. En todos los conjuntos de simulaciones, los resultados obtenidos son comparados con datos experimentales disponibles en la literatura, además de discutirse la concordancia con resultados generados por otros autores.

Finalmente, y con el objetivo de evaluar el rendimiento del código desarrollado en sistemas de cómputo distribuido se presentan y discuten los resultados obtenidos de las

pruebas de escalabilidad realizadas en el clúster empleado en este trabajo.

5.2 Test RAM-C II

5.2.1 Descripción del test

El experimento *Radio Attenuation Measurement* (RAM) fue una serie de mediciones en vuelo llevadas a cabo en el NASA Langley Research Center a finales de la década de 1960 con el objetivo de estudiar el fenómeno de pérdida de comunicación causado por la capa electrónica presente en la reentrada atmosférica de vehículos espaciales [4, 74]. De la serie de mediciones realizadas denominadas RAM-C I, RAM-C II y RAM-C III, la serie RAM-C II se considera la más adecuada para la comparación con resultados numéricos debido a que en las otras series la configuración fue cubierta con una capa de fenólico-grafito que contaminó el campo de flujo. La configuración empleada en el experimento RAM consiste en una sonda tipo cono esférico cuya geometría se muestra en la Fig. 5.1. La sonda fue instrumentada con una serie de reflectómetros para medir la densidad electrónica máxima en la dirección normal a la superficie, y un conjunto de sondas Langmuir para medir la distribución de la densidad electrónica en la capa límite en la parte posterior. Más detalles de este ensayo en vuelo son descritos en [60].

Se han obtenido resultados del flujo laminar axisimétrico estacionario sobre la configuración RAM-C II correspondientes a dos etapas en la trayectoria de reentrada atmosférica a 71 km y 61 km de altura. Las condiciones de la corriente libre para ambas etapas son detalladas en la Tabla 5.1. En ambas condiciones se utiliza el modelo de 7 especies del aire parcialmente ionizado ($N_2, O_2, NO, NO^+, N, O, e^-$), donde los parámetros del modelo cinético se obtuvieron de Park [127] y se detallan en las tablas de la Sección A.4.1 del Apéndice. El modelo de no equilibrio termodinámico corresponde al modelo de dos temperaturas de Park descrito en el Capítulo 2. Los flujos convectivos son evaluados mediante el esquema SLAU, descrito en la Sección 3.3.1, mientras que los flujos difusivos se obtienen de acuerdo a la metodología descrita en la Sección 3.5. El gradiente de las variables en cada celda para evaluar los flujos difusivos es obtenido mediante la formulación de mínimos cuadrados ponderada por la inversa de la distancia, y el gradiente para la reconstrucción de segundo orden es obtenido por medio de una formulación de mínimos cuadrados sin ponderación, de acuerdo a lo sugerido en [8]. El stencil empleado en el método de mínimos cuadrados considera todas las celdas que comparten un vértice en común. La limitación de los gradientes ante la presencia de discontinuidades se realiza empleando la función limitadora de

Venkatakrishnan descrita en la Sección 3.4.2.2. El sistema resultante de ecuaciones en cada paso temporal es resuelto mediante el método iterativo GMRES discutido en la Sección 3.6.2, empleando las librerías externas PETSc. En la resolución en paralelo del sistema, el preconditionador global corresponde al método de Schwarz aditivo y el local en cada procesador corresponde a un preconditionador tipo ILU(0), todos ellos disponibles en PETSc. Son asumidos los valores por default de esta librería en el empleo de estos métodos.

Para ambas condiciones la superficie de la sonda se asume como no catalítica y a una temperatura constante e igual a 1500 K, tal como es considerado en [28]. Debido a las condiciones de simetría axial únicamente la mitad superior del campo de movimiento es discretizada, imponiendo condiciones de borde de simetría. El contorno por donde ingresa el flujo se asume como supersónico en donde son impuestas las condiciones de la corriente libre. El contorno donde el flujo abandona el dominio se considera supersónico en el cuál se extrapolan las condiciones en el interior del dominio para la obtención del estado en las celdas fantasmas adyacentes.

Con el objetivo de analizar la convergencia de la solución con respecto a la malla se utilizaron tres discretizaciones, cuyos números de celdas en la dirección normal y tangencial al cuerpo y tamaño de celda mínimo (altura de la celda adyacente al cuerpo en la dirección normal a la superficie) son detallados en la Tabla 5.2. En la Fig. 5.2 se muestra la malla computacional conformada por 64×150 celdas en las direcciones normal y tangencial al cuerpo respectivamente.

La integración temporal del sistema es inicializada a partir de las condiciones de la corriente libre asignadas a todo el dominio. En una primera instancia se obtiene una solución convergente de primer orden de precisión que luego es tomada como condición inicial para la obtención de la solución de segundo orden. La solución es iterada hasta obtener una reducción de la norma del residuo del sistema de seis órdenes de magnitud. Esta reducción se considera suficiente, ya que se comprueba que iteraciones posteriores producen cambios en las magnitudes del campo de movimiento prácticamente despreciables. El número de CFL es inicializado en 1, y actualizado mediante la expresión descrita en la Sección 3.6.3, donde un valor máximo de CFL del orden de 1×10^{-6} ha sido necesario para no introducir inestabilidades en la solución.

5.2.2 Resultados obtenidos

En la Fig. 5.3 se comparan los resultados obtenidos de la densidad electrónica máxima en la dirección normal a la superficie en función de la coordenada axial (cuyo origen se ubica en el punto de estancamiento, véase Fig. 5.2) con las mediciones en vuelo de la densidad

Tabla 5.1: Condiciones de la corriente libre del test RAM-C II .

Altura [km]	71	61
ρ_∞ [kg/m ³]	7.631×10^{-5}	2.714×10^{-4}
v_∞ [m/s]	7658.6	7636.4
T_∞ [K]	216.0	254.0
M_∞	25.9	23.9
Re_∞ [1/m]	3.84×10^4	1.21×10^5
$c_{N_2, \infty}$	7.624×10^{-1}	7.624×10^{-1}
$c_{O_2, \infty}$	2.376×10^{-1}	2.376×10^{-1}

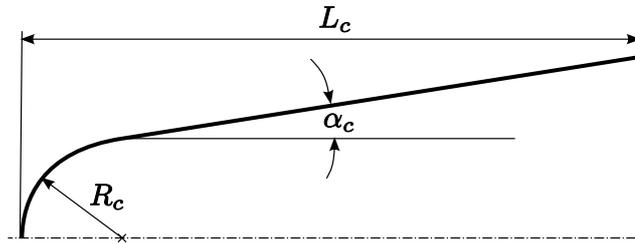


Figura 5.1: Geometría de la configuración del experimento RAM.

$$R_c = 0.1524m, L_c = 1.295m, \alpha_c = 9^\circ$$

Tabla 5.2: Mallas utilizadas en el test RAM-C II.

Malla	(Normal \times Tangencial)	$(\Delta x)_{\min}$ [μm]
I	64×150	5.0
II	96×210	1.0
III	128×300	0.5

electrónica obtenida mediante los reflectómetros y el conjunto de sondas Langmuir (de esta última se poseen datos de la incerteza experimental). La ionización del aire se produce principalmente en la región detrás del choque separado sobre la nariz, y dada la alta velocidad del flujo, los iones y electrones libres son luego transportados por convección hacia la parte posterior, sin que se alcance la total recombinación de estos a pesar de la baja temperatura local del flujo en esta zona tal como se muestra en las líneas de contorno de la densidad numérica electrónica en las Figs. 5.4a y 5.4b. En las condiciones de menor altura, a 61 km, el modelo cinético de Park implementado predice una densidad electrónica menor que la experimental, diferencia que aumenta en la zona posterior de la sonda. Se observa además un cambio de pendiente que se produce en la curva alrededor de la coordenada

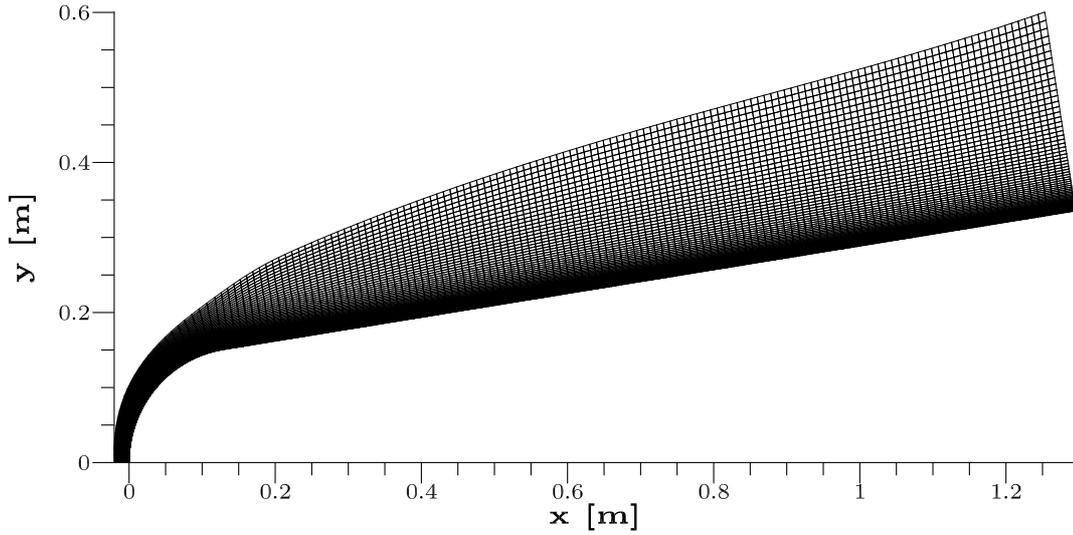


Figura 5.2: Malla utilizada en el test de la sonda RAM-C II (64×150).

axial $x \approx 1.04m$. Este comportamiento también fue notado por otros autores que utilizaron un modelo similar [61, 121]. En las condiciones de mayor altura, a 71 km, el modelo predice una densidad electrónica levemente superior en la zona frontal presentando la curva una pendiente menor que la experimental en la zona posterior tal como se muestra en las Figuras 5.4. No obstante, la densidad electrónica máxima computada en la posición de la sonda Langmuir se encuentra dentro del rango de incerteza experimental. Puede observarse además que los resultados obtenidos con las tres mallas son prácticamente similares.

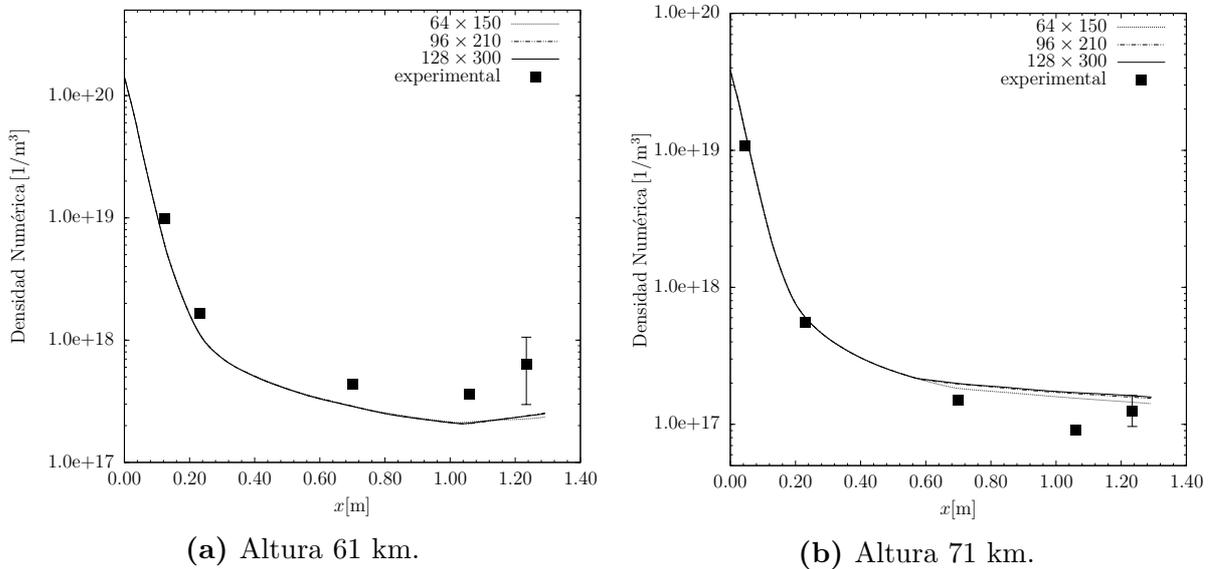
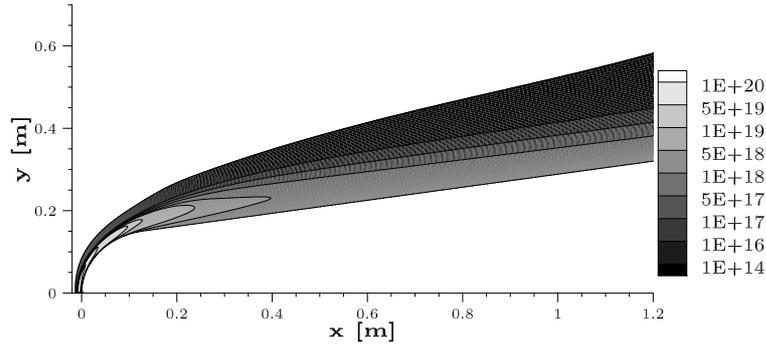
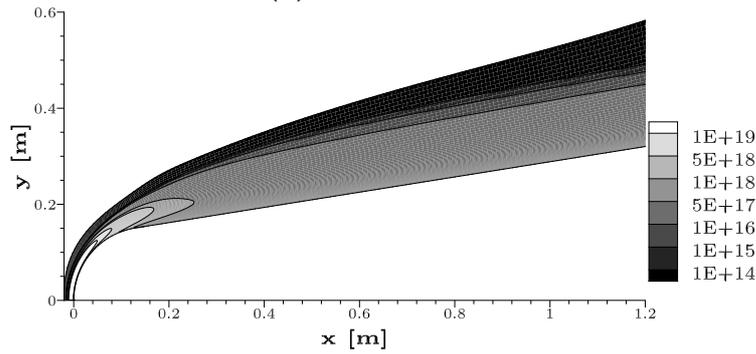


Figura 5.3: Densidad electrónica máxima normal a la superficie vs. coordenada axial. Test RAM C-II. Modelo de 7 especies de Park.



(a) Altura 61 km.



(b) Altura 71 km.

Figura 5.4: Líneas de contorno de la densidad numérica de electrones n_e [$1/m^3$].
Test RAM C-II. Modelo de 7 especies de Park

En la Fig. 5.5a y la Fig. 5.5b se presentan la distribución de la temperatura traslacional-rotacional T y vibracional-electrónica T_{ve} a lo largo de la línea de estancamiento para las condiciones de altura a 61 km y 71 km respectivamente. En este caso se ha graficado únicamente la solución obtenida con la malla más fina de 128×300 elementos. A la altura de 61 km se alcanza una temperatura traslacional-rotacional máxima detrás del choque del orden de 24500 K, mientras que la temperatura vibracional-electrónica máxima es de 10100 K. A la altura de 71 km, la menor densidad en la corriente libre induce un aumento en la posición de la onda de choque, a la vez que aumenta el grado de no equilibrio termodinámico en la capa de choque notado por el aumento en la distancia entre la posición de los máximos obtenidos para las temperaturas del modelo. En la Tabla 5.3 se presenta una comparación cuantitativa de los resultados de las temperaturas máximas y las posiciones de ubicación de estos máximos sobre la línea de estancamiento con aquellos presentados por Grasso et al.[61], obteniéndose una buena concordancia entre ambos conjuntos de resultados, especialmente en las condiciones a mayor altura. En la Fig. 5.6 se muestra la distribución de la temperatura traslacional sobre la línea de estancamiento para las distintas discretizaciones empleadas. Se nota que la malla modifica principalmente el valor

y ubicación de la temperatura máxima aumentando levemente ambas a medida que esta es refinada.

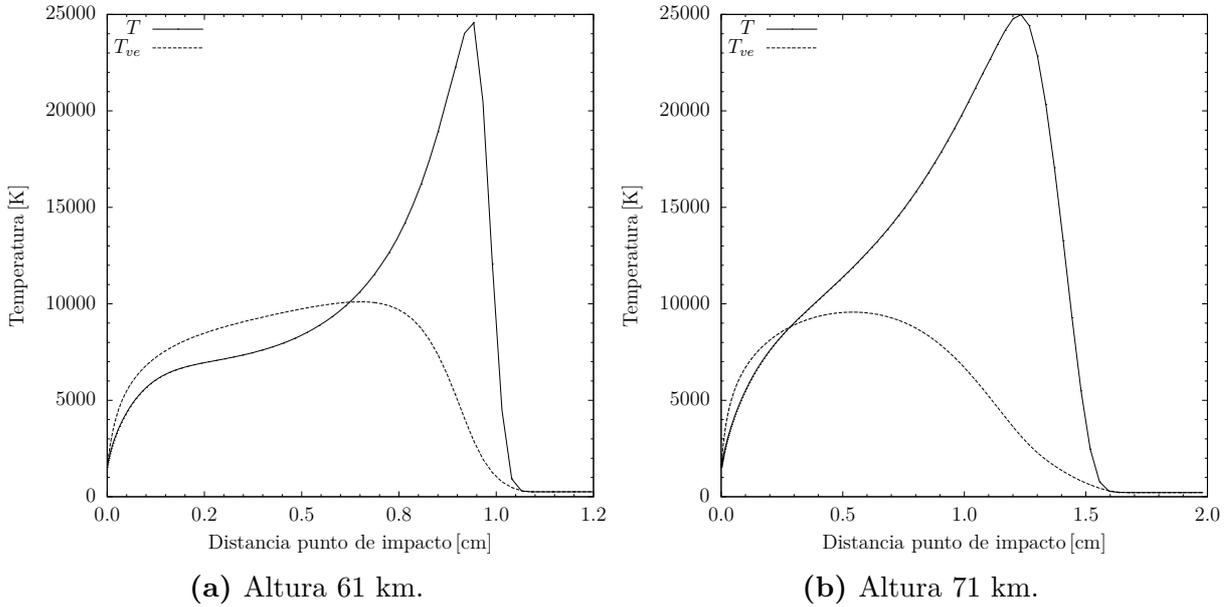


Figura 5.5: Temperaturas T y T_{ve} sobre la línea de estancamiento. Test RAM C-II. Modelo de 7 especies de Park

Tabla 5.3: Comparación resultados en la línea de estancamiento.

Test	Temperatura máxima [K]				Posición temperatura máxima [mm]			
	Cómputo		Grasso [61]		Cómputo		Grasso [61]	
	T	T_{ve}	T	T_{ve}	T	T_{ve}	T	T_{ve}
61 km	24565	10104	24900	9489	9.4	6.7	9.5	7.1
71 km	24985	9568	25030	9265	1.23	5.4	1.24	5.5

Los cambios en la composición provocados por el aumento de la temperatura detrás de la onda de choque sobre la línea de estancamiento son presentados para las condiciones a 61 km y 71 km en las Figs. 5.7a y 5.7b respectivamente. En ambos casos el oxígeno se disocia completamente y llega en esta condición hasta el punto de estancamiento. A la altura de 61 km, el nitrógeno se disocia parcialmente hasta la capa límite en cuyo interior se recombina parcialmente debido a la disminución de la temperatura. Por otro lado a una altura de 71 km el grado de no equilibrio químico es tal que la composición se encuentra prácticamente congelada en el interior de la capa límite. Este comportamiento se encuentra en concordancia con los resultados obtenidos por otros autores [28, 121, 61].

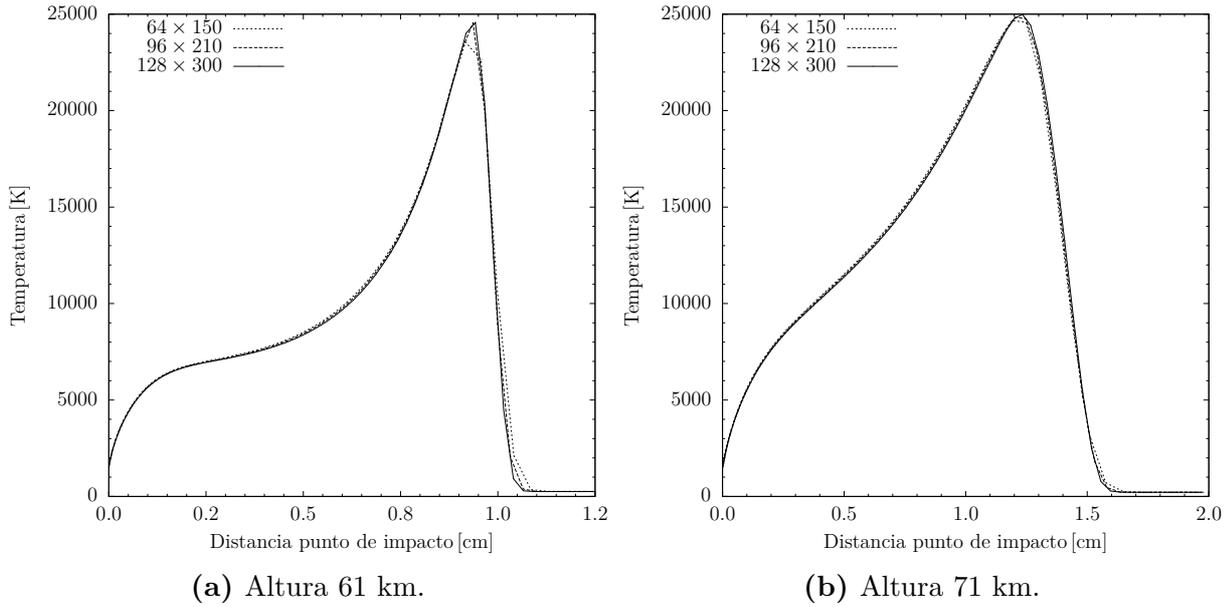
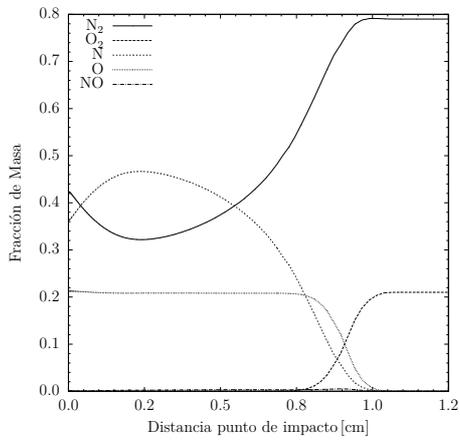


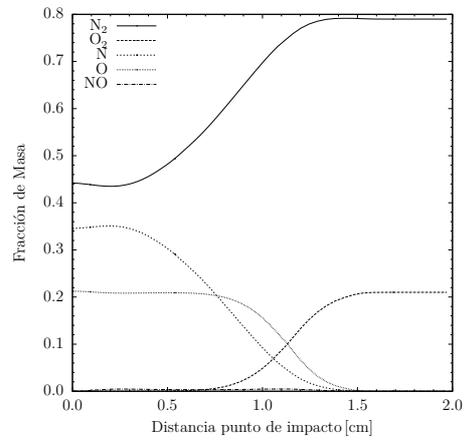
Figura 5.6: Sensibilidad a la malla de la distribución de temperatura sobre la línea de estancamiento.

Test RAM C-II. Modelo de 7 especies de Park

En las Figs. 5.8a y 5.8b, es graficada la transferencia de calor sobre el cuerpo en función de la coordenada de superficie (con origen en el punto de impacto). Se observa que los resultados para las tres mallas son prácticamente similares excepto en la zona de estancamiento del flujo. En esta región el refinamiento de la malla produce una pequeña disminución en la transferencia de calor obtenida en el punto de impacto, así como la aparición de una oscilación entre los dos elementos más cercanos a la línea de simetría. Esta oscilación no se presenta en la solución de primer orden (no mostrada), por lo que se considera que es producto de la alta sensibilidad de los esquemas de la familia AUSM al valor de la velocidad normal en la interface entre celdas cuando ésta es obtenida mediante la reconstrucción lineal de los componentes de la velocidad en forma independiente, sensibilidad que es mayor en las regiones de muy baja velocidad. En las Figs. 5.9a y 5.9b se muestra la distribución de presiones obtenida para ambas alturas y distintas mallas, observando que la misma es independiente del grado de refinamiento y que presenta un comportamiento suave a lo largo de todo la superficie. Finalmente en las Figs. 5.10a y 5.10b se presentan los gráficos de la convergencia en función de la norma L_1 del residuo del sistema para las diferentes discretizaciones utilizadas, donde un número de iteraciones entre 30000 y 45000 es necesario para obtener una reducción de esta norma de 6 órdenes de magnitud, condición que se considera aceptable para asumir la solución como estacionaria.

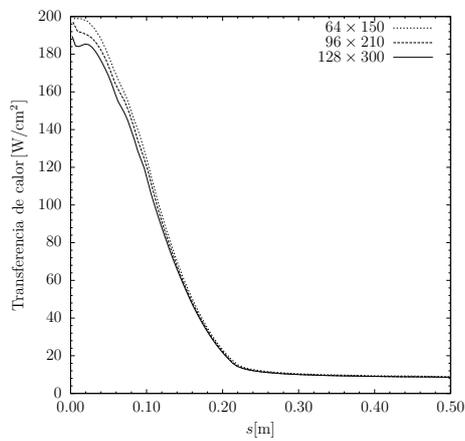


(a) Altura 61 km.

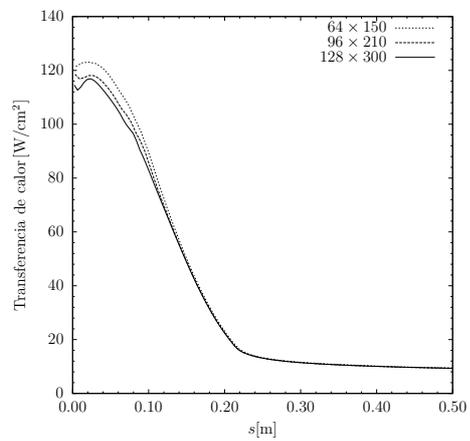


(b) Altura 71 km.

Figura 5.7: Fracciones de masa de las especies sobre la línea de estancamiento.
Test RAM-C II. Modelo de 7 especies de Park

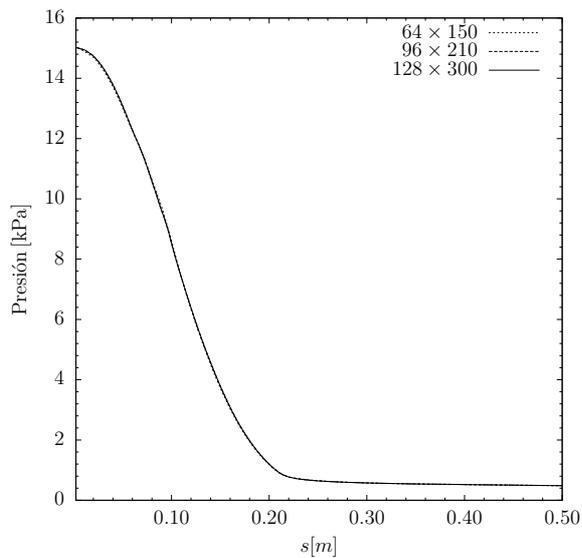


(a) Altura 61 km.

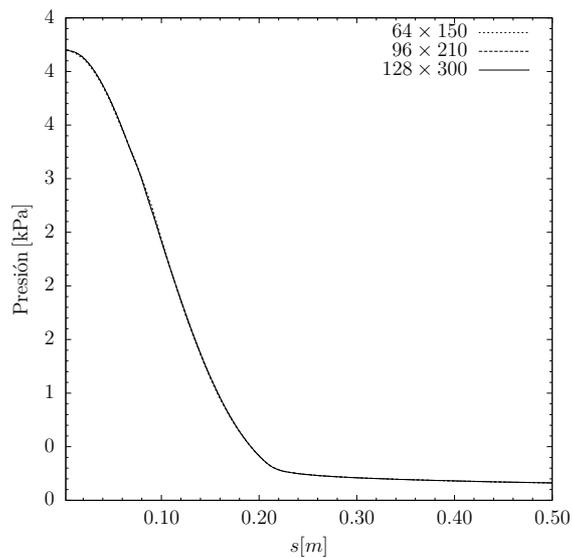


(b) Altura 71 km.

Figura 5.8: Transferencia de calor sobre la superficie vs. coordenada de superficie.
Test RAM-C II. Modelo de 7 especies de Park

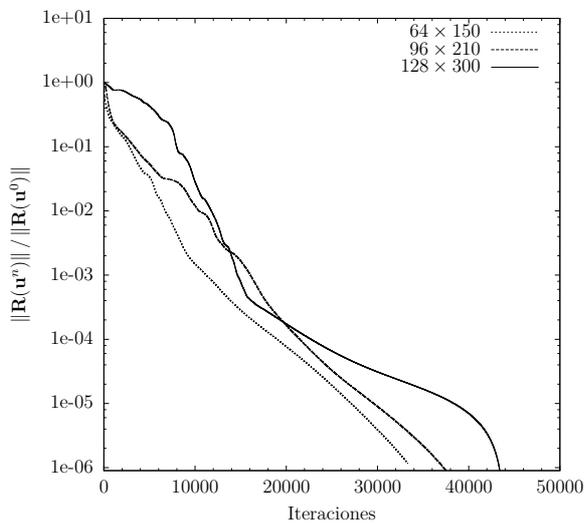


(a) Altura 61 km.

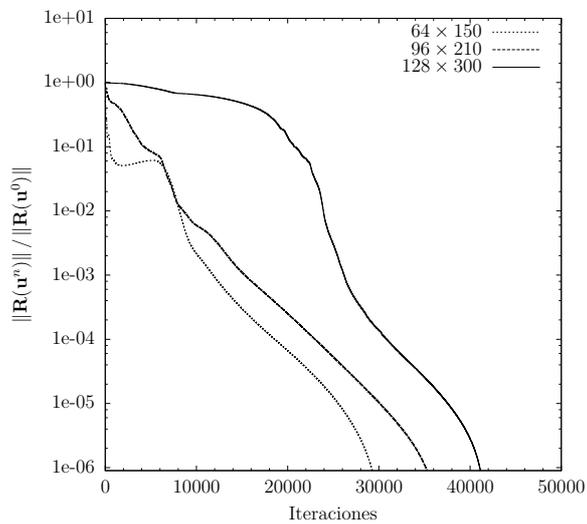


(b) Altura 71 km.

Figura 5.9: Distribución de presión sobre la superficie vs. coordenada de superficie.
Test RAM-C II. Modelo de 7 especies de Park



(a) Altura 61 km.



(b) Altura 71 km.

Figura 5.10: Convergencia en la norma L_1 del residuo.
Test RAM-C II. Modelo de 7 especies de Park

5.3 Test HYPULSE

5.3.1 Descripción del test

El *NASA HYPULSE Expansion Tube* [146] es un tubo de expansión en el cual flujos de alta velocidad y entalpía son obtenidos para distintos gases tales como aire y dióxido de carbono. En particular un tubo de expansión de este tipo permite obtener un flujo en la sección experimental de baja presión el cual se encuentra en equilibrio termodinámico, lo que favorece su utilización en la validación de códigos computacionales al reducir las incertezas en las condiciones de la corriente libre. En el tubo HYPULSE, el estudio realizado por Hollis et al.[72] emplea una configuración basada en el vehículo espacial Mars Pathfinder [164] con el fin de obtener mediciones de la transferencia de calor sobre la superficie del vehículo, haciendo especial énfasis en la región de flujo separado de la estela, de forma de obtener una base de datos de mediciones con el objetivo de ser utilizada en la comparación con resultados numéricos. En la Fig. 5.11 se detalla la geometría de la configuración experimental del test HYPULSE.

Se han obtenido simulaciones del flujo axisimétrico sobre esta configuración para las condiciones del test HYPULSE llevado a cabo por [72], cuando el gas considerado es aire. En este caso se considera que la ionización del gas es despreciable utilizando un modelo cinético de 5 especies N_2, O_2, NO, N, O , donde los parámetros del modelo corresponden nuevamente al modelo de Park detallado en el Apéndice. Asimismo, el no equilibrio termodinámico es representado mediante el modelo de dos temperaturas de Park. En la Tabla 5.4 se detallan las condiciones de la corriente libre del test. El modelo físico y numérico aplicado es similar al ya descrito en el test RAMC-II. Al igual que en [73], la superficie del cuerpo es considerada como no catalítica y a una temperatura constante de 300K. Se realiza un estudio de convergencia de malla, mediante tres discretizaciones que difieren en la cantidad de elementos en la dirección normal y tangencial al cuerpo, y en el tamaño de celda mínimo en la dirección normal en la región de la capa límite tal como se detalla en la Tabla 5.5. Una vista general de la malla empleada se muestra en la Fig. 5.12. La malla fue realizada de forma tal de proveer una discretización alineada con la onda de choque separada y el flujo en la región de la estela.

5.3.2 Resultados obtenidos

Las características generales del campo de movimiento pueden ilustrarse a partir del gráfico de las líneas de corriente presentado en la Fig. 5.13. En éste se observa la separación

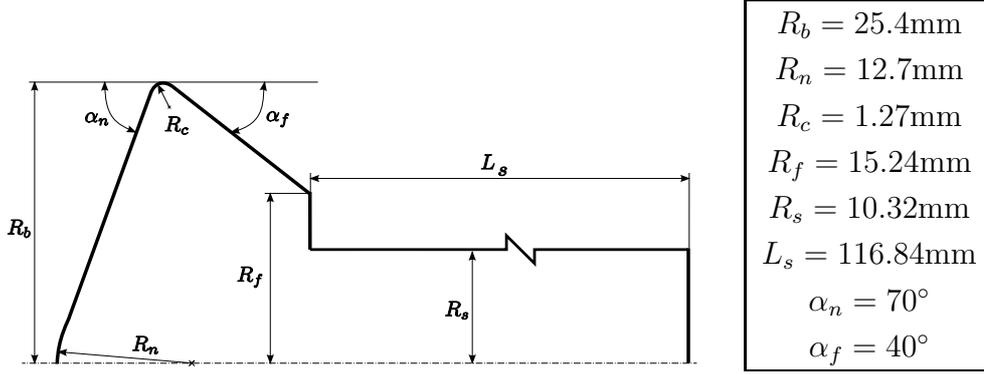


Figura 5.11: Geometría de la configuración experimental del tubo de expansión HYPULSE.

Tabla 5.4: Condiciones de la corriente libre del test HYPULSE.

Condición	Valor
$\rho_\infty [\text{kg/m}^3]$	5.71×10^{-5}
$v_\infty [\text{m/s}]$	5162
$T_\infty [\text{K}]$	1113
$p_\infty [\text{Pa}]$	1824
$c_{\text{N}_2, \infty}$	7.67×10^{-1}
$c_{\text{O}_2, \infty}$	2.33×10^{-1}
M_∞	7.9
$\text{Re}_\infty [1/\text{m}]$	3.3×10^6

Tabla 5.5: Mallas utilizadas en el test HYPULSE.

Malla	(Normal \times Tangencial)	$(\Delta x)_{\min} [\mu\text{m}]$
I	64×220	5.0
II	128×220	1.0
III	160×240	0.5

que se produce en el flujo en la zona del hombro de la superficie posterior para luego volver a adherirse sobre la superficie del soporte del modelo en donde además se presenta un punto de estancamiento. En la región de flujo separado se originan un vórtice mayor y dos vórtices menores los cuales interactúan entre sí incrementando localmente la transferencia de calor en esta región. En la Fig. 5.14 se realiza la comparación de la transferencia de calor obtenida sobre el cuerpo en función de la coordenada de superficie normalizada para las tres discretizaciones con los valores de las mediciones experimentales presentados en [72]. En la parte posterior de la configuración, la malla más gruesa claramente es insuficiente

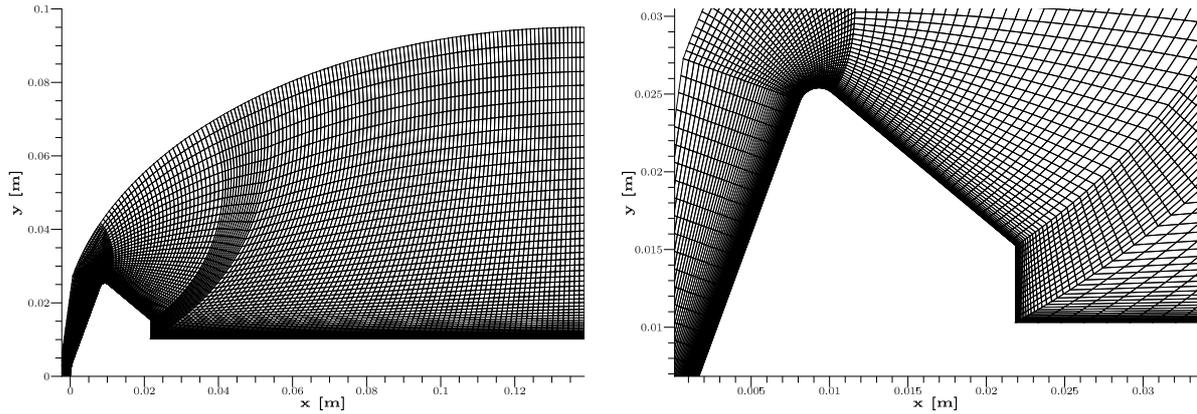


Figura 5.12: Vista global de la malla de la configuración del test HYPULSE.
 Vista global y ampliada de la malla de la configuración del test HYPULSE.

para estimar el valor de la transferencia de calor sobre la superficie mientras que las dos discretizaciones más finas brindan valores que se encuentran dentro del rango de incerteza experimental, si bien las soluciones aumentan su diferencia hacia la zona de estancamiento. Todas las discretizaciones capturan correctamente la posición del punto de desprendimiento del flujo alrededor de $s/R_b = 1.08$ donde la transferencia de calor disminuye abruptamente. En la región posterior se presenta un máximo local en la transferencia de calor en la zona donde el vórtice mayor impacta sobre el cuerpo para s/R_b entre 3.5 y 4. El incremento de la refinación de la malla disminuye el valor obtenido de este máximo y aumenta levemente la ubicación del mismo aguas abajo. Un segundo máximo en la transferencia de calor se observa en $s/R_b \approx 1.8$ que es el punto donde el vórtice mayor impacta en la superficie trasera de la configuración. La posición de este máximo capturada por la solución numérica es levemente inferior a la obtenida en forma experimental, similar al resultado obtenido en [73].

En la Fig. 5.15 se presenta la distribución de presiones obtenida sobre la superficie mediante las tres discretizaciones, brindando todos estos resultados prácticamente similares. Finalmente en la Fig. 5.17a se grafica la distribución del campo de presiones sobre la parte posterior de la sonda, en tanto en la Fig. 5.17b, se presenta la distribución del número de Mach obtenida sobre el dominio. Este último resultado presenta una buena concordancia con la presentada en [73].

La distribución de temperaturas y fracciones de masa sobre la línea de estancamiento son graficadas en las Figs. 5.16a y 5.16b respectivamente para la discretización de 160×300 celdas. La temperatura traslacional presenta un valor máximo detrás de la onda de choque del orden de 12800 K, mientras que el máximo de la temperatura vibracional-electrónica es

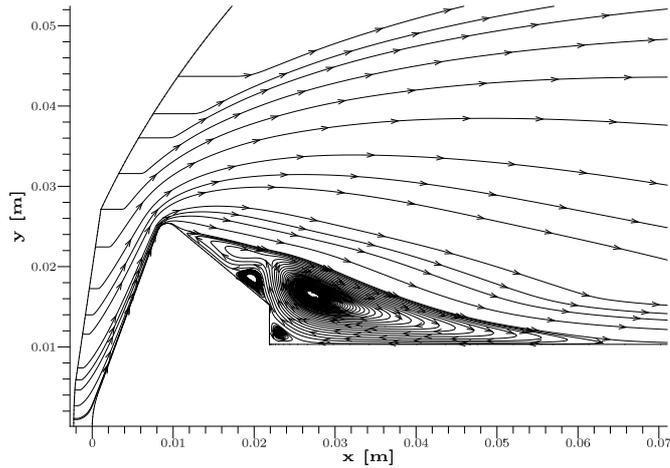
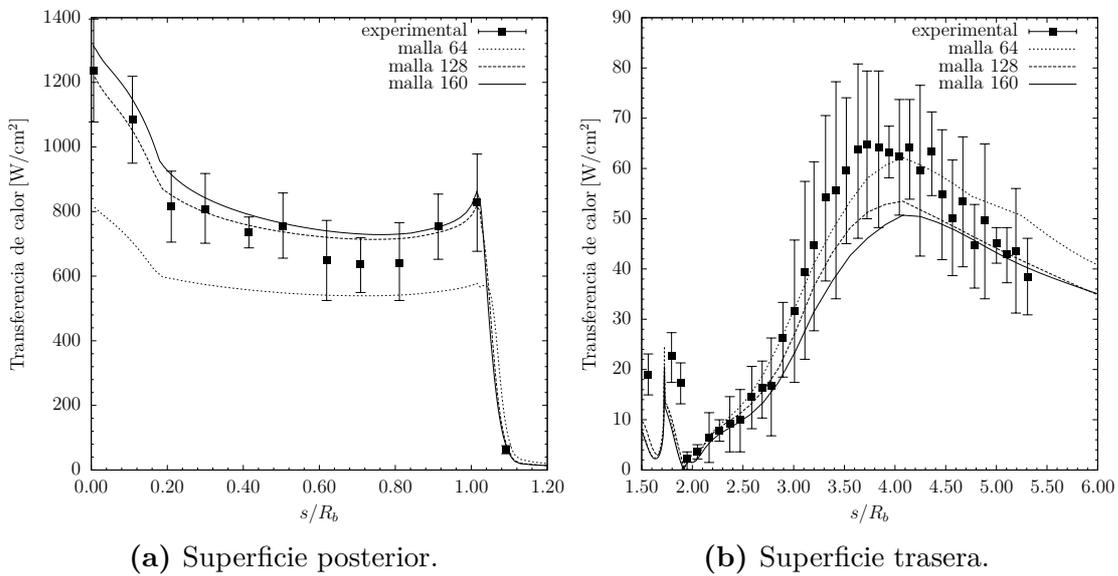


Figura 5.13: Líneas de corriente en la estela.
Test HYPULSE.



(a) Superficie posterior.

(b) Superficie trasera.

Figura 5.14: Transferencia de calor sobre el cuerpo vs. coordenada tangencial normalizada.
Test HYPULSE.

del orden de 7400 K. En cuanto a la composición química las condiciones en la región entre la onda de choque y la capa límite son tales que el oxígeno se encuentra completamente disociado en ésta, presentándose un menor nivel de disociación en el nitrógeno. En la capa límite el descenso de temperatura induce la recombinación total del nitrógeno mientras que se observa una leve recombinación del oxígeno.

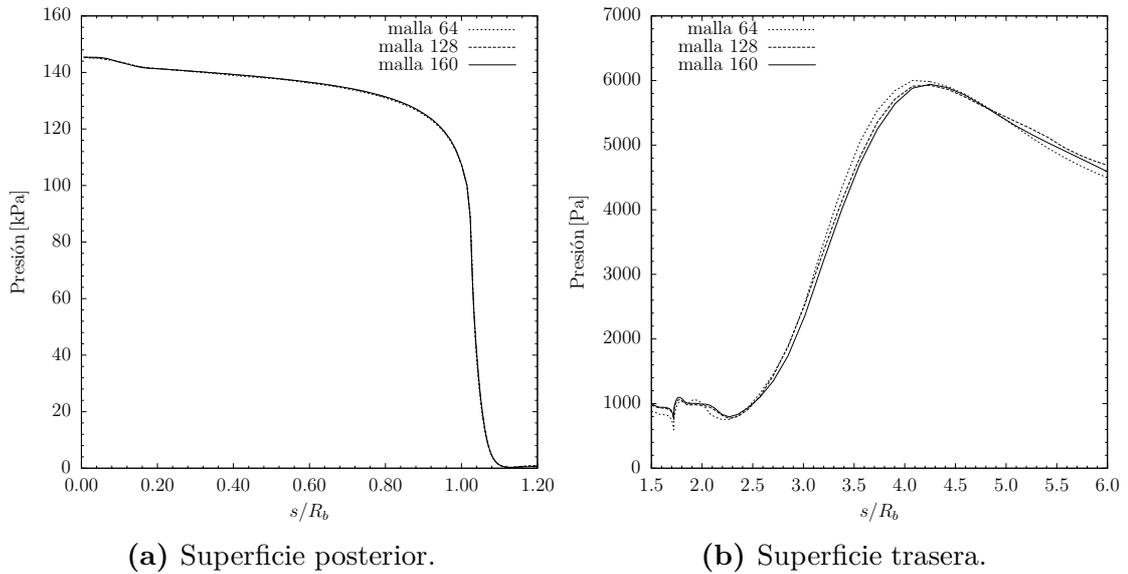


Figura 5.15: Presión sobre el cuerpo vs. coordenada tangencial normalizada.
Test HYPULSE.

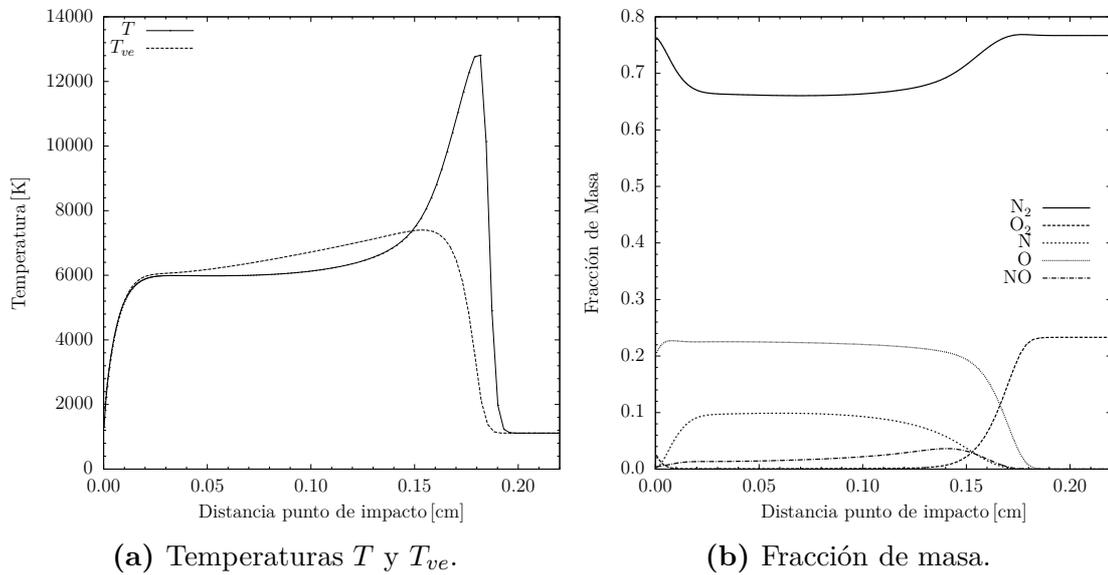
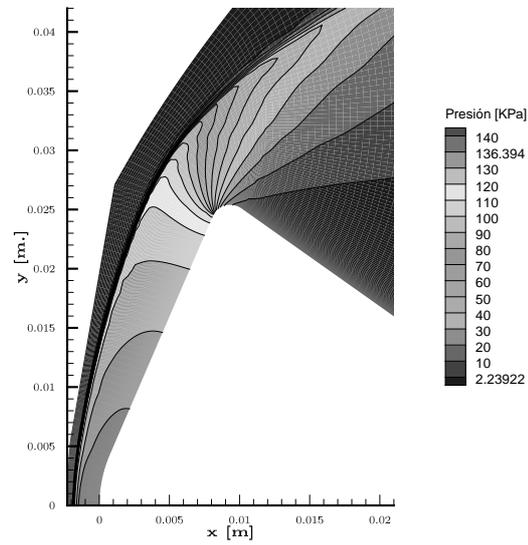
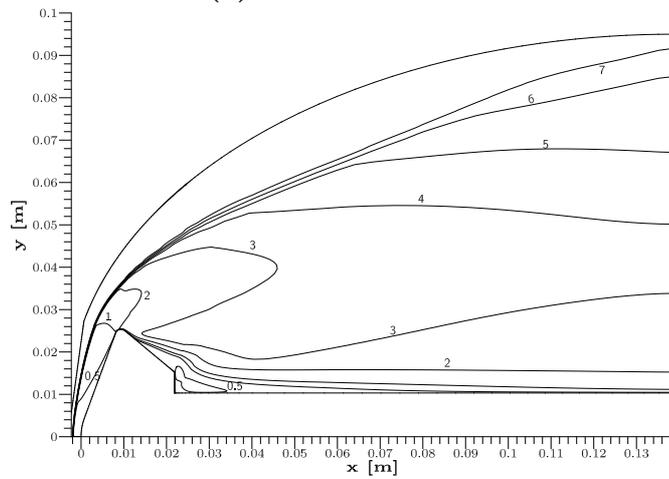


Figura 5.16: Distribución de variables sobre la línea de estancamiento.
Test HYPULSE.



(a) Presión.



(b) Número de Mach.

Figura 5.17: Detalle de líneas de contorno del campo de movimiento.
Test HYPULSE.

5.4 Test Cilindro 3D HEG

En el experimento conducido en el tubo de choque *High Enthalpy Shock Tunnel Göttingen* (HEG) [76] se emplea una configuración tipo cilíndrica con el objetivo de proveer una base de datos de mediciones a ser utilizadas en la validación de códigos computacionales. En particular, se realizaron mediciones sobre la transferencia de calor y presión sobre el cilindro y forma del choque mediante interferometría holográfica. Detalles más precisos de las características del experimento y del tubo de choque son dados en [47, 76].

Se han obtenido resultados numéricos del test HEG para el gas aire a dos condiciones (I) de alta entalpía y (II) de baja entalpía de estancamiento del gas en el reservorio. Los parámetros de la corriente libre en la cámara de ensayos han sido determinadas en [76] mediante la simulación numérica del flujo en la tobera de expansión a partir de las condiciones del reservorio empleando diversos modelos de cinética química. Es concluido en este último trabajo que el modelo cinético de Gupta es el que brinda la mejor correspondencia con las mediciones experimentales de la distancia del choque y presión de estancamiento de la corriente libre.

Las condiciones de la corriente libre en la cámara de ensayo para ambas condiciones del gas en el reservorio son presentadas en la Tabla 5.6.

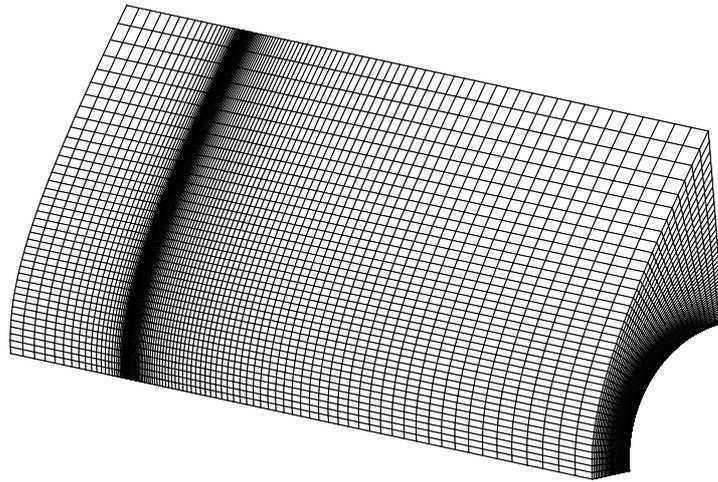
Tabla 5.6: Condiciones de la corriente libre del test del túnel HEG.

Condición	(I)	(II)
$\rho_{\infty}[\text{kg}/\text{m}^3]$	1.547×10^{-3}	3.26×10^{-3}
$v_{\infty}[\text{m}/\text{s}]$	5956	4776
$T_{\infty}[\text{K}]$	901	694
$c_{\text{N}_2,\infty}$	7.543×10^{-1}	7.356×10^{-1}
$c_{\text{O}_2,\infty}$	7.13×10^{-3}	1.34×10^{-1}
$c_{\text{NO},\infty}$	1.026×10^{-2}	5.09×10^{-2}
$c_{\text{N},\infty}$	6.5×10^{-7}	0
$c_{\text{O},\infty}$	2.283×10^{-1}	7.955×10^{-2}

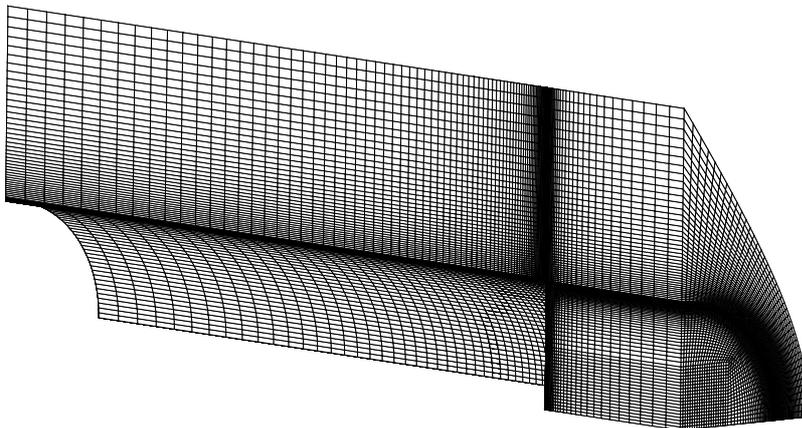
La configuración experimental del test HEG consiste en un cilindro de 90 mm de diámetro y una longitud de envergadura de 380 mm ubicado con el eje en forma transversal en la dirección del flujo.

La malla empleada para ambas condiciones se muestra en la Fig. 5.18 y consiste en una discretización parcialmente no estructurada compuesta por 538000 elementos hexahédricos, con 70 celdas en la dirección normal (con un tamaño normal mínimo de $0.25\mu\text{s}$) y 40 celdas

en la dirección tangencial al cilindro. Tal como puede notarse únicamente un cuarto del dominio es discretizado debido a la doble simetría del problema. La arista formada por la intersección entre la superficie del cilindro y el extremo libre ha sido levemente redondeada de forma de evitar la aparición de singularidades en la solución en esta zona. A diferencia de los resultados anteriores esta es la única malla que es empleada en la obtención de resultados.



(a) Posterior.



(b) Anterior.

Figura 5.18: Vista global del mallado del cilindro HEG.

Los efectos de no equilibrio químico en el aire son modelados a través de un modelo de

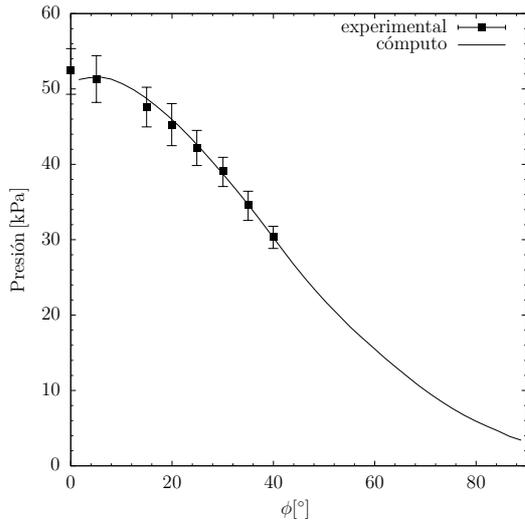
5 especies N_2 , O_2 , NO , N , O utilizando los coeficientes del modelo cinético de Gupta que se muestran en el Apéndice. Tal como es notado en [76], las condiciones del tubo HEG para el gas aire son tales que este puede considerarse en equilibrio termodinámico. Por lo tanto se asume en este caso un modelo de una temperatura. Este modelo es aplicado en forma directa igualando la temperatura vibracional-electrónica T_{ve} al valor de la temperatura traslacional-rotacional T en las expresiones introducidas en el Capítulo 2 y eliminando del sistema la ecuación correspondiente a la conservación de la energía vibracional-electrónica. La metodología de discretización numérica empleada es similar a la de los casos anteriores a excepción de que en este test se presentan únicamente soluciones obtenidas con un esquema de primer orden de precisión, dado que fue notado que el esquema de segundo orden introduce oscilaciones de la presión y las fracciones másicas de la frecuencia de la malla en la dirección de la envergadura. Al igual que es aplicado en [76], la superficie del cilindro ha sido asumida como completamente catalítica y una temperatura constante de 300 K es impuesta temperatura de pared. Las condiciones de convergencia se asumen en forma similar a los casos anteriores, alcanzándose la convergencia en este test en un total de iteraciones del orden de 40000 en ambas condiciones.

En las Figuras 5.19a y 5.19b se comparan los resultados obtenidos de las condiciones (I) y (II) respectivamente, de la distribución de presiones sobre la superficie correspondiente a la línea de corriente ubicada en el plano de simetría vs. la coordenada angular ϕ sobre la superficie del cilindro (0° corresponde al punto de estancamiento) con mediciones experimentales extraídas de [132]. Se observa una excelente concordancia de los resultados numéricos, encontrándose éstos dentro del rango de incerteza experimental prácticamente a lo largo de toda la superficie para ambas condiciones.

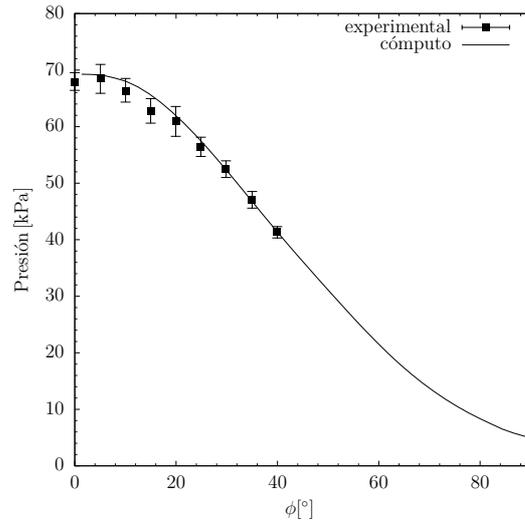
En forma análoga a la anterior en las Figuras 5.20a y 5.20b se comparan los resultados obtenidos de las condiciones (I) y (II) respectivamente, de la transferencia de calor sobre la superficie. A diferencia de la presión en este caso la concordancia entre los resultados numéricos y las mediciones experimentales no es ideal, si bien puede decirse que en la condición (I) de alta entalpía la similitud es mejor.

La posición del choque separado medido como la distancia del choque al punto de impacto sobre la línea de estancamiento en el plano de simetría concuerda bien con las mediciones experimentales obtenidas por interferometría tal como se muestra en los valores de la Tabla 5.7.

En las Figuras 5.21a y 5.21b se muestra el campo de presiones para las condiciones de ensayo (I) y (II) respectivamente, en donde se observa la expansión del flujo en el extremo del cilindro. En forma análoga en las Figuras 5.22a y 5.22b se muestra la vista general del

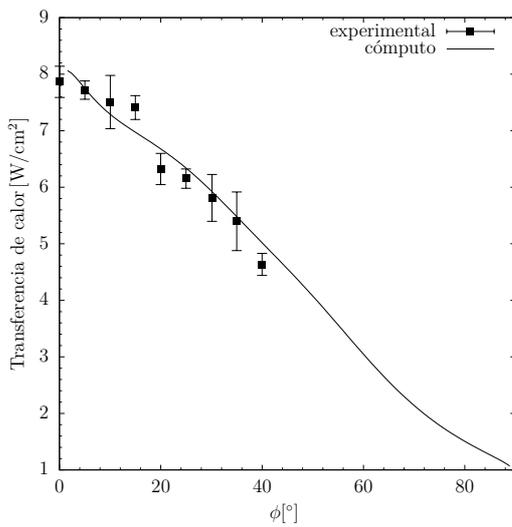


(a) Test (I).

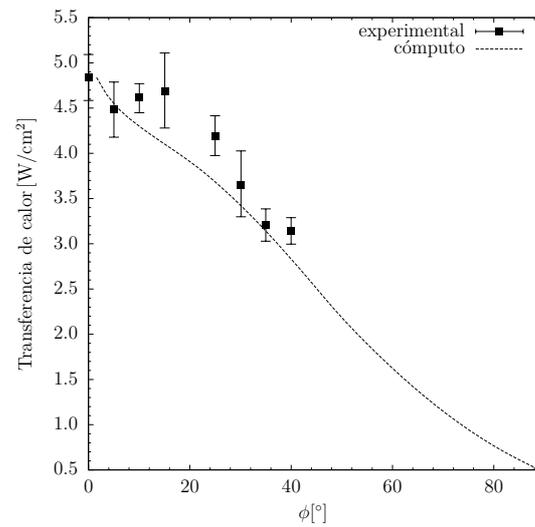


(b) Test (II).

Figura 5.19: Distribución de presión sobre la línea de estancamiento.
Cilindro túnel HEG.



(a) Test (I).



(b) Test (II).

Figura 5.20: Transferencia de calor sobre la línea de estancamiento.
Cilindro túnel HEG.

campo de temperaturas para ambas condiciones, en donde se nota que el gas alcanza una temperatura máxima detrás del choque del orden de 11000 K para la condición del ensayo a baja entalpía y una temperatura máxima del orden de 7800 K para la condición de alta entalpía en el reservorio.

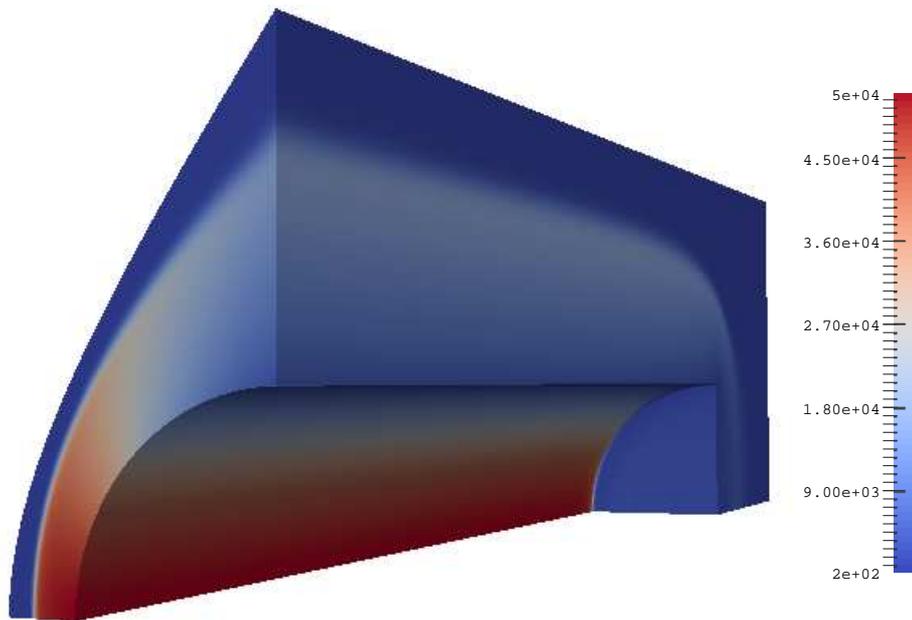
En las Figuras 5.23a, 5.23b, 5.24a y 5.24b se muestra la distribución en el dominio de

Tabla 5.7: Cilindro HEG: comparación de resultados en línea de estancamiento.

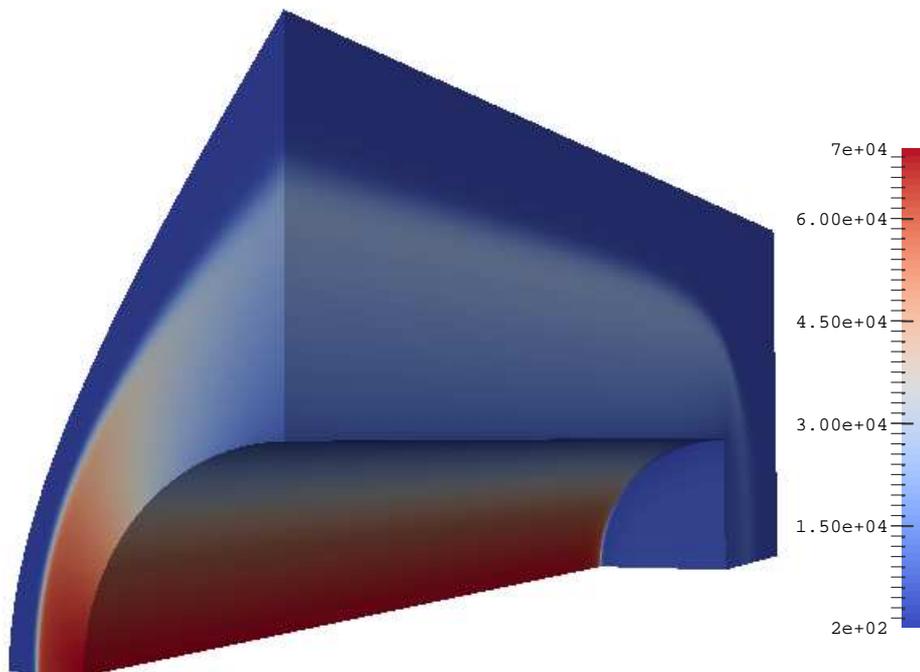
Test	Presión punto de estancamiento [kPa]		Distancia choque a punto de estancamiento [cm]	
	Experimental	Cómputo	Experimental	Cómputo
I	52.2	51.4	1.03	1.05
II	68.0	69.2	1.19	1.13

las fracciones másicas de nitrógeno y oxígeno molecular y nitrógeno y oxígeno atómicos respectivamente para la condición (I). Se observa que el nitrógeno alcanza cierto nivel de disociación detrás de la onda de choque para luego recombinarse completamente en la superficie del cilindro debido a la catalicidad asumida. El oxígeno que en la corriente libre se encuentra prácticamente completamente disociado, experimenta una leve disminución detrás de la onda de choque provocada por la formación de NO para luego recombinarse casi totalmente en la capa límite.

En las Figuras 5.25a, 5.25b, 5.26a y 5.26b se muestra la distribución en el dominio de las fracciones másicas de nitrógeno y oxígeno molecular y nitrógeno y oxígeno atómicos respectivamente para la condición de alta entalpía (II). En este caso se observa que el nitrógeno se disocia levemente detrás del choque para luego recombinarse en la capa límite. Por otro lado el oxígeno que en este caso se encuentra en forma molecular en la corriente libre se disocia completamente detrás de la onda de choque permaneciendo congelado hasta que se recombina nuevamente en la pared debido a la condición catalítica.

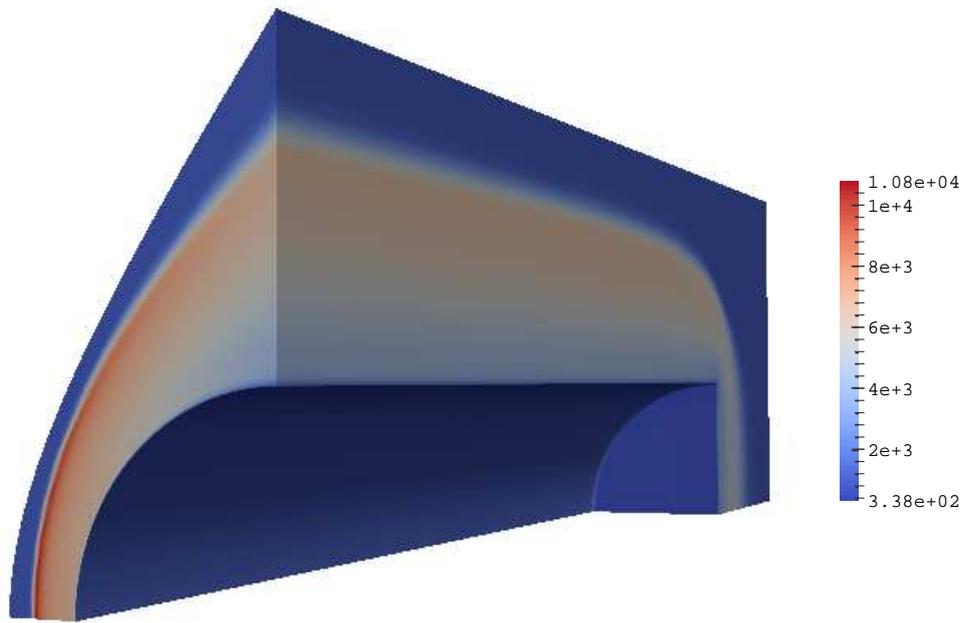


(a) Condición (I)

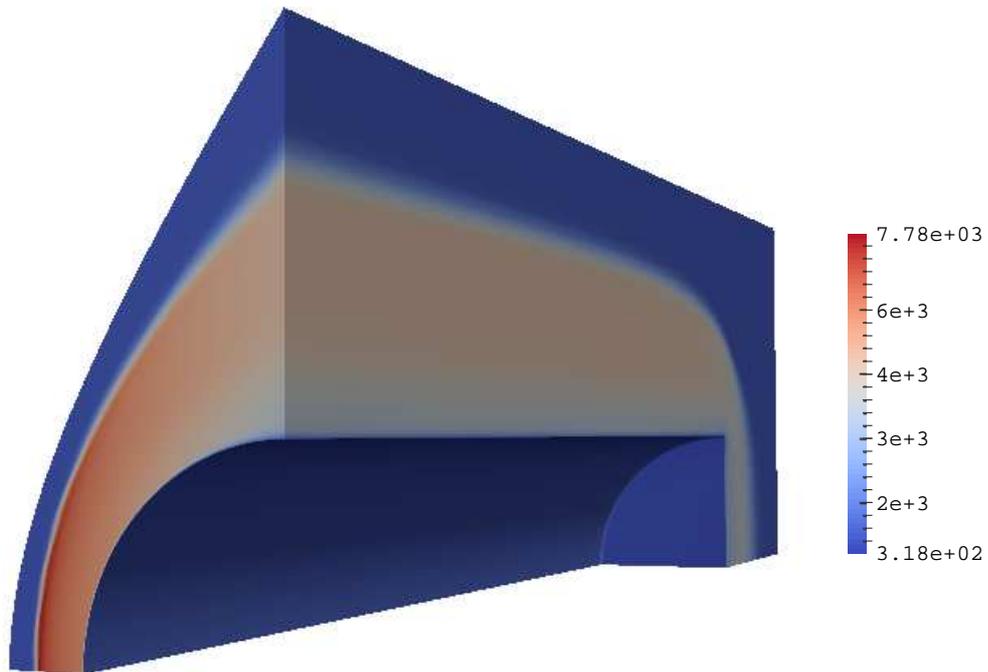


(b) Condición (II).

Figura 5.21: Vista del campo de presiones [Pa].
Cilindro túnel HEG.

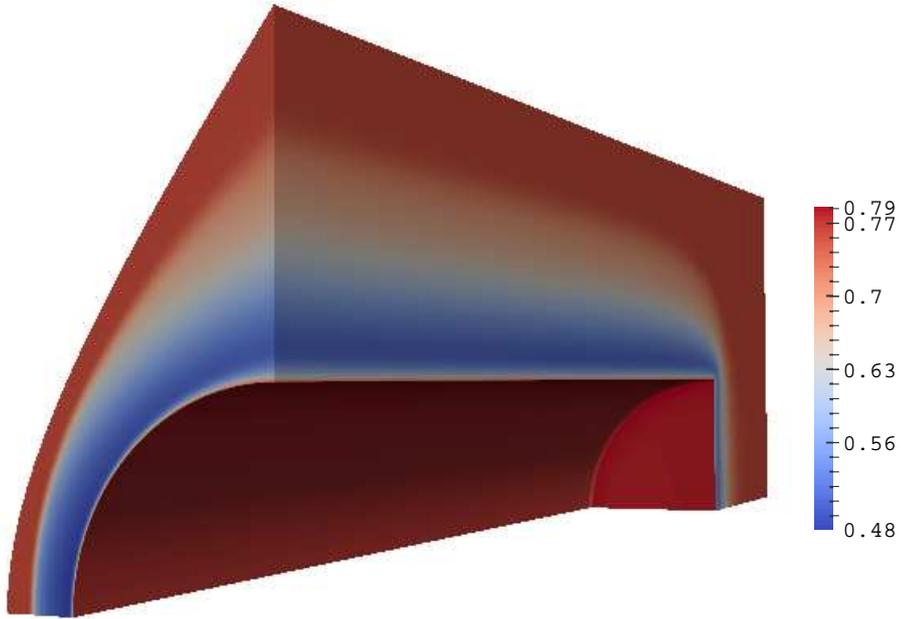


(a) Condición (I)

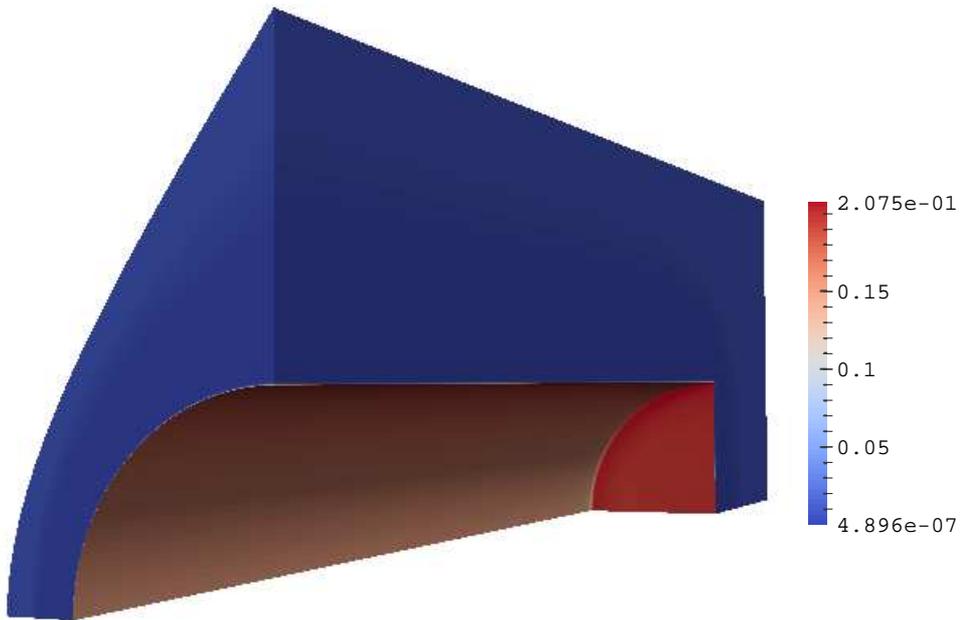


(b) Condición (II).

Figura 5.22: Vista del campo de temperaturas [K].
Cilindro túnel HEG.



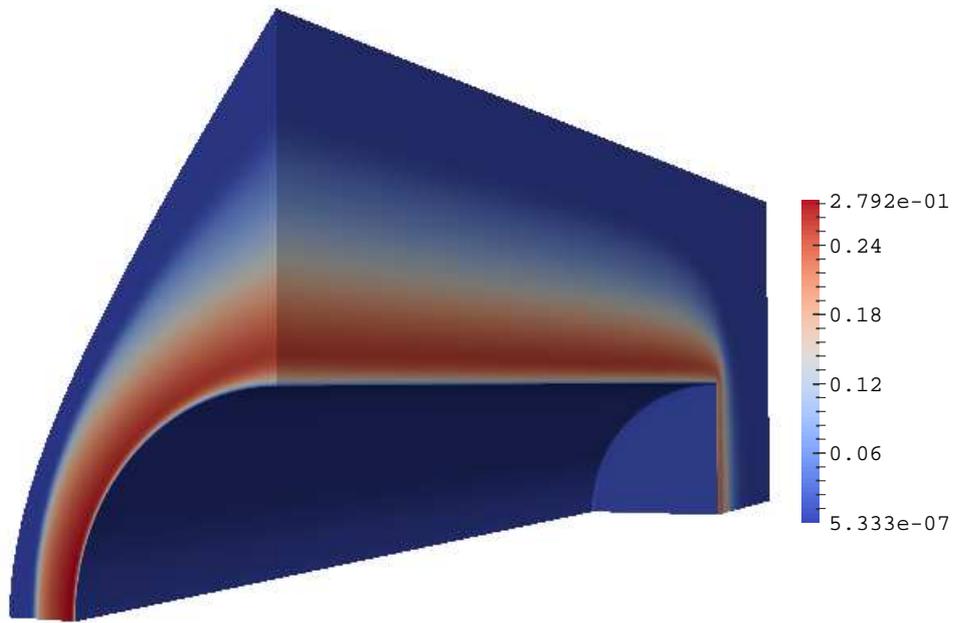
(a) N_2



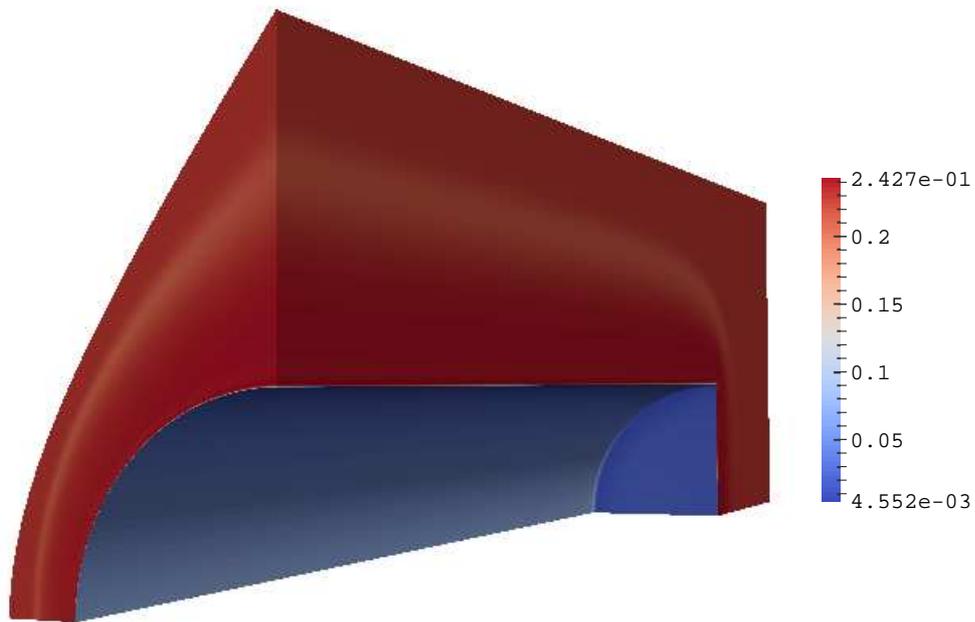
(b) O_2

Figura 5.23: n

Vista de las fracciones másicas de las especies moleculares N_2 y O_2 .
Cóndición (I) del ensayo del cilindro en el túnel HEG.

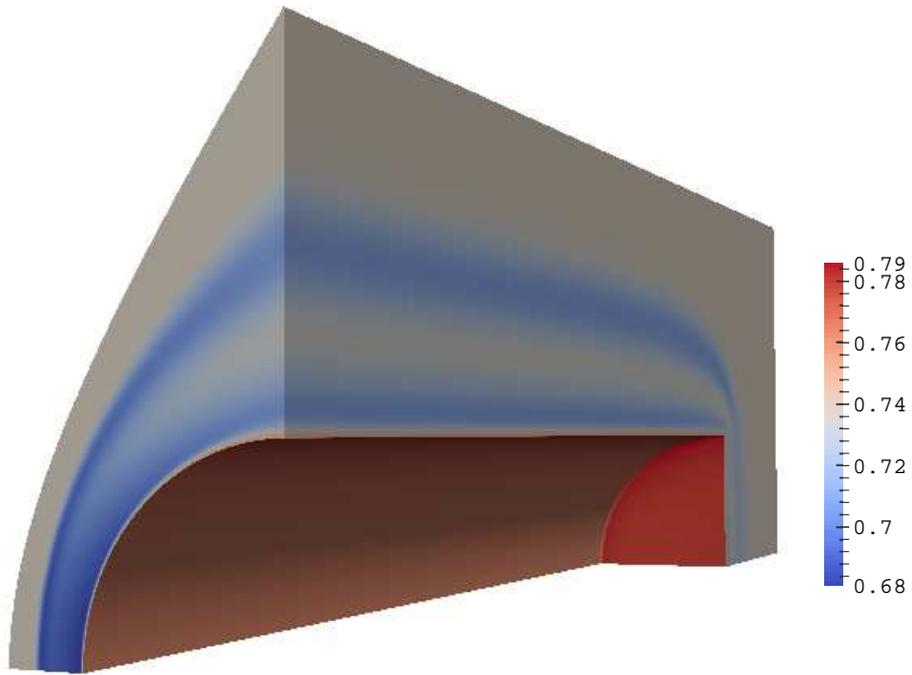


(a) N

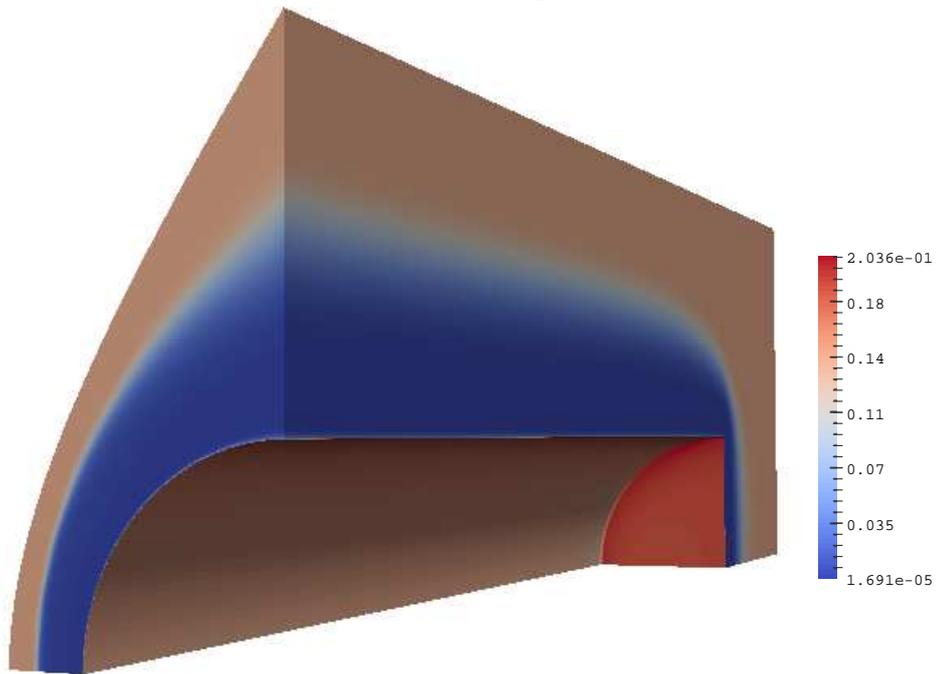


(b) O

Figura 5.24: Vista de las fracciones másicas de las especies atómicas N y O. Condición (I) del ensayo del cilindro en el túnel HEG.

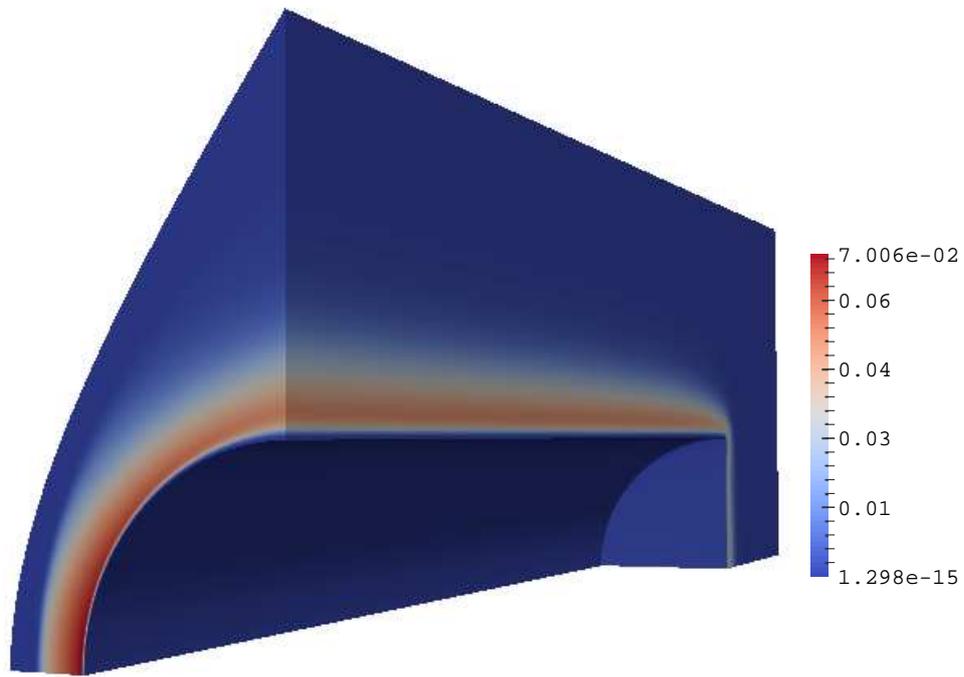


(a) N_2

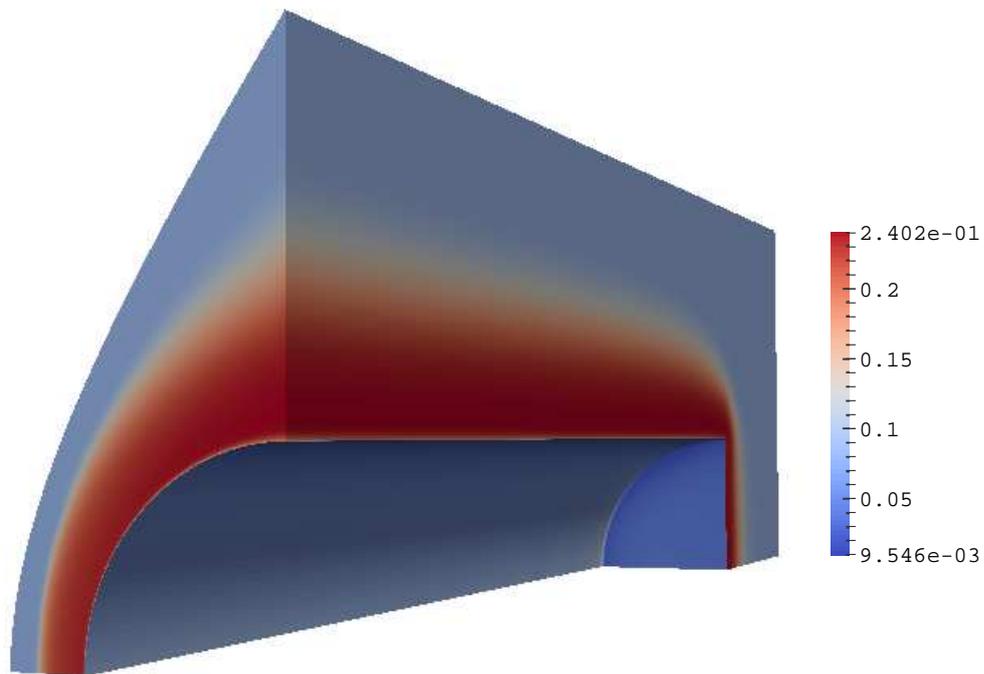


(b) O_2

Figura 5.25: Vista de las fracciones másicas de las especies moleculares N_2 y O_2 .
Condición (II) del ensayo del cilindro en el túnel HEG.



(a) N



(b) O

Figura 5.26: Vista de las fracciones másicas de las especies atómicas N y O. Condición (II) del ensayo del cilindro en el túnel HEG.

5.5 Mediciones de escalabilidad

En esta sección se presentan y discuten los resultados obtenidos de los tests realizados con el objetivo de analizar la escalabilidad del código desarrollado en sistemas de cómputo distribuido.

Los test de escalabilidad han sido realizados en el clúster de la Secretaría de Ciencia y Tecnología de la Universidad Nacional de Córdoba utilizando un máximo de 32 procesadores AMD Opteron 6128 de 16 GB de RAM conectados mediante red Ethernet 1Gb e Infiniband QDR. En los test realizados se han usado los compiladores de la familia GNU GCC 4.9.2. El primer test conducido corresponde al estudio de la escalabilidad fuerte del código, la cual refiere a la aceleración obtenida cuando se aumenta el número de procesadores utilizados manteniendo fijo el tamaño del problema.

El problema elegido corresponde a la obtención de la solución numérica del cilindro del túnel HEG empleando similar metodología numérica, modelización física y condiciones iniciales que las ya descritas en la sección anterior. En este caso particular la malla se encuentra conformada por un total exacto de 1 millón de celdas. La misma se particiona en paralelo mediante la librería ParMETIS y se utiliza una capa de celdas fantasmas conformada por todas aquellas celdas remotas que tienen una cara en común con las celdas pertenecientes a cada parte. Una vista general de la partición de la malla en 16 procesadores se muestra en la Fig. 5.27. Se ha utilizado el tiempo de reloj necesario para realizar una corrida correspondiente a un total de 1000 iteraciones como tiempo de referencia. El tiempo serial requerido para la realización de este número de iteraciones ha sido de 1.084×10^5 s lo que brinda una estimación del tiempo requerido por celda y por paso de tiempo de 1.084×10^{-4} s.

La aceleración o *speedup* es medida mediante la expresión:

$$\text{speedup}(p) = \frac{t_{\text{reloj},1}}{t_{\text{reloj},p}} \quad (5.1)$$

donde $t_{\text{reloj},i}$ denota el tiempo de reloj que requiere una corrida empleando i número de procesadores.

En la Fig. 5.28a se gráficán los valores medidos de *speedup* incrementando en potencias de 2 el número de procesadores hasta un número máximo de 32 procesadores. Se observa que el *speedup* obtenido es sublineal. En la Fig. 5.28b se gráfica el valor de la eficiencia con

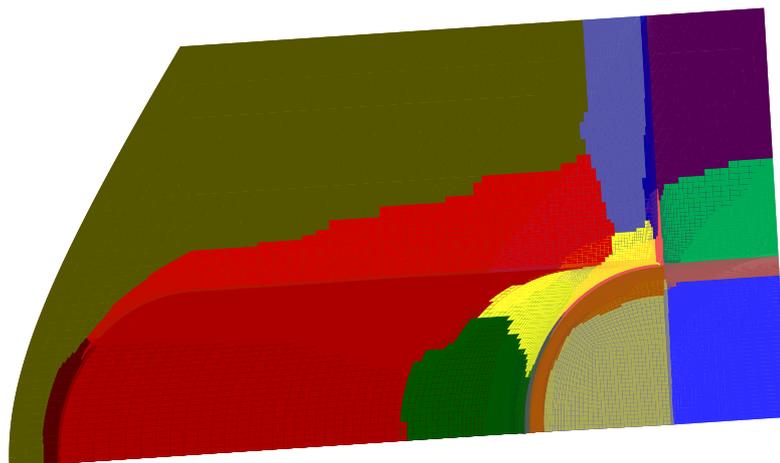


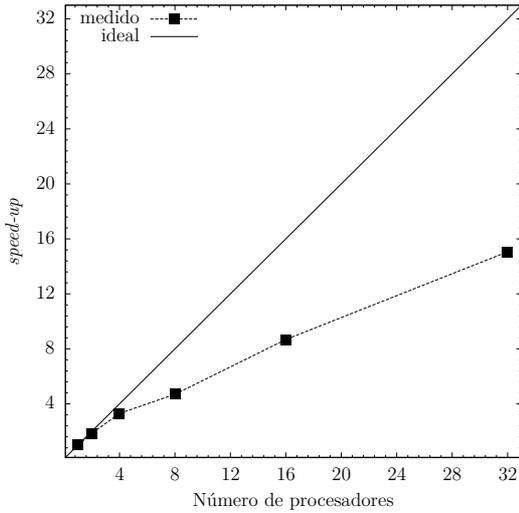
Figura 5.27: Vista de la partición de la malla en 16 procesadores empleada en el test de escalabilidad.

respecto al número de procesadores definida como

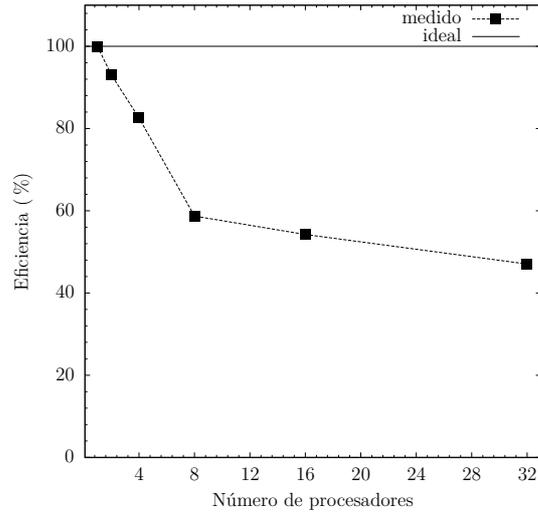
$$\text{eficiencia}(p) = \frac{\text{speedup}(p)}{p} \times 100 \quad (5.2)$$

Se observa de este gráfico que la eficiencia desciende abruptamente hasta un total de 8 procesadores, para luego reducir su pendiente obteniéndose una eficiencia de aproximadamente 43 % cuando es empleado el número máximo de 32 procesadores. En la Tabla 5.8 se muestran el número de celdas locales del procesador con más carga de trabajo, así como el número máximo de celdas remotas, que constituye una medida del costo de comunicación. La partición provee un buen balance de carga en todos los casos, mientras que el número de celdas remotas se mantiene relativamente en el mismo orden de magnitud, por lo que aumenta considerablemente la relación entre la cantidad de comunicación requerida sobre la carga en cada procesador a medida que se incrementa el número de procesadores. Se considera que ésta es una de las posibles causas de la escalabilidad sublineal del sistema aunque mayor investigación en este aspecto es requerida, en particular la realización de un test de escalabilidad en otro clúster con capacidades de comunicación más eficientes.

Además del estudio de escalabilidad fuerte, se realiza la medición de la escalabilidad débil del código. Es decir el tiempo que lleva resolver un problema que mantiene aproximadamente el mismo tamaño en cada número de procesadores. En este caso es esperado idealmente que el tiempo se mantenga constante. El estudio de escalabilidad débil utiliza nuevamente como referencia la discretización sobre el dominio del cilindro HEG. La discretización empleada particiona la malla en un número promedio de 31250 celdas en cada



(a) Test de escalabilidad fuerte.



(b) Test de escalabilidad: eficiencia.

Figura 5.28: Test de escalabilidad: escalabilidad fuerte y eficiencia.

Tabla 5.8: Desbalance de carga en las particiones del test de escalabilidad fuerte

Número procesadores	Número de celdas locales máximo	Desbalance máximo (%)	Número de celdas remotas máximo
1	1000000	0	0
2	515339	3.09	8679
4	250105	0.042	7873
8	125023	0.018	7748
16	62697	0.31	6509
32	32615	0.35	6441

procesador, por lo que el problema a resolver aumenta desde un tamaño de 31250 celdas para el caso serial hasta 1 millón de celdas cuando se utiliza el número máximo de 32 procesadores. En la Fig. 5.29 se grafican los resultados obtenidos del *speedup* definido en esta oportunidad como el valor inverso del *speedup* definido por la (5.1). Se observa en este caso que el tiempo de reloj empleado por el cálculo en paralelo se estabiliza en un valor levemente superior al doble del tiempo requerido por el caso serial a partir de un número de procesadores superior a 8, que indica una estabilización del costo de comunicación en la partición a partir de este número de procesadores.

Finalmente, en la Fig. 5.30 se muestra el gráfico de la escalabilidad de memoria, medida como la relación entre la memoria requerida por el procesador con mayor carga sobre la memoria requerida en el caso serial utilizando para ello las particiones del test de escala-

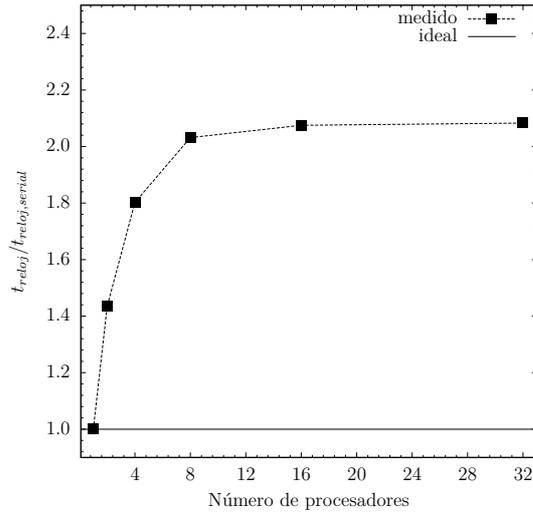


Figura 5.29: Test de escalabilidad: escalabilidad débil.

bilidad fuerte. En el caso serial el consumo total de memoria es de 7.5 GB, de los cuales aproximadamente 4.5 GB corresponden al almacenamiento del jacobiano, 1.8 GB a los campos escalares y vectoriales del flujo y 1.2 GB se requieren en el almacenamiento de la estructura de datos orientada a objetos de la malla, lo que da una estimación de consumo de memoria de 7.5 kB por celda de la malla.

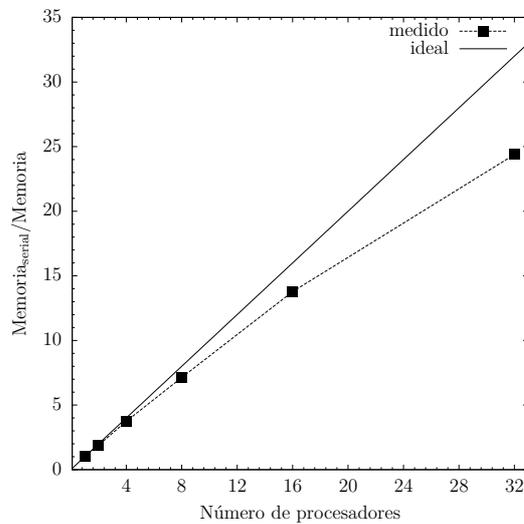


Figura 5.30: Test de escalabilidad: escalabilidad de memoria.

Esta página ha sido intencionalmente dejada en blanco.

En esta tesis se ha presentado el diseño, desarrollo y validación de un nuevo código basado en el método de volúmenes finitos en mallas no estructuradas y orientado a la solución numérica de las ecuaciones de Navier-Stokes compresibles aplicada a la simulación de flujos hipersónicos.

La formulación empleada es general y permite el tratamiento de flujos bidimensionales, axisimétricos y tridimensionales, así como la incorporación de efectos de no equilibrio químico y termodinámico.

Metodos tipo *upwind* al estado del arte de la familia AUSM son incorporados para proveer tanto la captura robusta y precisa de choques como resolución en la capa límite y transferencia de calor. Métodos de reconstrucción lineal de la solución junto a funciones limitadoras para asegurar propiedades de monotonicidad se aplican para obtener segundo orden de precisión. Las propiedades de transporte, viscosidad, conductividad y difusión molecular son evaluadas mediante modelos orientados a gases en no equilibrio termoquímico. Debido a la disparidad de las escalas temporales del flujo, un método implícito totalmente acoplado es utilizado para la integración temporal del sistema mediante la derivación de un jacobiano analítico aproximado. El sistema lineal resultante es solucionado mediante métodos iterativos de tipo GMRES empleando librerías externas, en particular las librerías PETSc. Modelos cinéticos del aire de 5 (N,O,N₂,O₂,NO) y 7 especies (N,O,N₂,O₂,NO⁺,e⁻) han sido implementados para incluir efectos de no equilibrio químico y gas parcialmente ionizado. Efectos de no equilibrio termodinámico son modelados empleando un modelo de dos temperaturas de amplia aceptación en la comunidad.

El código posee funcionalidad en sistemas de cómputo distribuido, haciendo uso para ello de las capacidades ofrecidas por un nuevo sistema flexible y extensible orientado a objetos que permite la administración en paralelo de la topología de la malla en mallas

híbridas no estructuradas, y de los campos asociados a ésta, el cual ha sido introducido y descrito en la presente tesis.

La herramienta computacional desarrollada ha sido evaluada mediante la comparación de los resultados obtenidos con mediciones experimentales tanto de ensayos en vuelo como de tubos de expansión y/o choque.

Se obtuvieron soluciones del flujo axisimétrico sobre la sonda RAM-C II de la cual se disponen datos de ensayos en vuelo, particularmente de la densidad de electrones libres que se origina debido a la ionización parcial del gas provocada por la fuerte onda de choque separada. Los resultados obtenidos del campo de movimiento concuerdan razonablemente tanto con las mediciones experimentales, como con los cálculos realizados por otros autores que emplearon una modelización física similar.

En un segundo conjunto de simulaciones se obtuvieron resultados del flujo axisimétrico estacionario sobre un modelo experimental de cápsula de reentrada ensayado en el tubo de expansión HYPULSE, el cual presenta un campo de movimiento, si bien no ionizado, de características más complejas, tales como la presencia de flujo separado, interacción vorticiosa y no equilibrio termoquímico. En este caso los resultados fueron comparados con datos experimentales de la transferencia de calor sobre el cuerpo, magnitud altamente sensible tanto a las características de la malla como a la precisión de la discretización numérica. Se obtuvo en general una buena concordancia de los resultados numéricos con los valores experimentales, encontrándose estos dentro de los rangos de incerteza experimental. Las características del campo de movimiento tales como la posición del punto de separación, los vórtices en la región de separación y la presencia de un punto de estancamiento en la parte anterior del flujo son capturados en buena concordancia con los resultados presentados por otros autores.

Un tercer conjunto de simulaciones comprendió la evaluación de las capacidades del código de simular flujos tridimensionales. Con este objetivo se obtuvieron resultados del flujo tridimensional estacionario sobre un modelo experimental cilíndrico ensayado en el tubo de choque HEG. Los resultados de presión y transferencia de calor sobre el cuerpo son comparados con mediciones experimentales, presentándose una muy buena concordancia en el cómputo de la presión y una razonable concordancia de la transferencia de calor, si bien en este caso y a diferencia de los anteriores, se empleó únicamente una formulación de primer orden de precisión. Esto se debió a la presencia de un comportamiento oscilatorio de la frecuencia de la malla, en particular de la presión y las fracciones másicas al aplicar la formulación de segundo orden, cuya causa se atribuye a la activación errática de las funciones limitadoras y la alta sensibilidad del esquema numérico convectivo a la misma

en particular en la región de estancamiento que se origina en este tipo de flujos.

Se realizó finalmente un estudio de escalabilidad para evaluar la eficiencia del código en cómputos de sistemas distribuidos. En el caso analizado se obtuvo una escalabilidad fuerte de tipo sublineal. Si bien esta característica dista de ser óptima y debe ser investigada en forma más profunda la posibilidad de su mejora a futuro, se considera satisfactorio el hecho de que el empleo de un clúster de baja capacidad de un máximo de 32 procesadores permitió disminuir el tiempo de cálculo en un orden de magnitud para los casos resueltos.

6.1 Contribuciones originales de esta tesis

El código desarrollado en esta tesis es continuación de una línea de investigación en la cual el autor ha realizado contribuciones previas en la modelización numérica de flujos hipersónicos invíscidos sobre mallas no estructuradas [48], flujos hipersónicos invíscidos en equilibrio termoquímico unidimensionales [136] y bidimensionales sobre mallas estructuradas [137].

Si bien la modelización física y la discretización numérica empleada en esta tesis no es novedosa, esta contiene gran parte del estado del arte en la simulación numérica de flujos hipersónicos por volúmenes finitos cuando son consideradas condiciones de no equilibrio termoquímico. Los distintos componentes de la discretización numérica han sido seleccionados y combinados en una forma tal que la metodología desarrollada es transparente a la malla y puede ser empleada en forma directa en mallas híbridas no estructuradas tanto en esquemas de volúmenes finitos centrado en las celdas como centrados en los vértices, características que son de actual interés en la comunidad de aerodinámica computacional.

Un segundo aspecto abordado por el trabajo comprendió el diseño, desarrollo e implementación de un sistema orientado a objetos para la administración topológica de la malla y los campos asociados a ésta en sistemas de cómputo distribuido. Particularmente en este sentido se considera que se han realizado las siguientes contribuciones originales:

- Diseño e implementación de una estructura de datos orientada a objetos de la topología de malla flexible y extensible, que provee una interface bien definida para ser incorporada en forma directa en la implementación de algoritmos numéricos generales basados en mallas.
- El diseño e implementación de objetos de contenedores de campos escalares, vectoriales y/o tensoriales definidos sobre dominios de entidades de malla arbitrarios que

cumplen la doble función tanto de ocultar al usuario los detalles de los aspectos de paralelizado, como de proveer un acceso robusto y eficiente a los datos almacenados en dichos campos.

- La implementación del sistema empleando las características de orientación a objetos del lenguaje Fortran 2003, lo que constituye al mejor conocimiento del autor, la primer implementación de un sistema de estas características disponible para su empleo en forma directa en dicho lenguaje.

6.2 Trabajo futuro

Durante el desarrollo del código descrito en esta tesis diversos aspectos relacionados tanto con la modelización física, como con la discretización numérica y la implementación computacional no fueron considerados debido a la necesidad de cumplir los objetivos principales establecidos al inicio del trabajo. A continuación se enuncian una serie de propuestas que se consideran posibles de ser desarrolladas en un corto a mediano plazo.

Los modelos físicos implementados en esta tesis, en especial los referidos a las propiedades de transporte, cinética química y no equilibrio termodinámico han sido incorporados principalmente debido a la amplia aceptación que presentan en la actualidad en la comunidad de aerodinámica computacional. Es de interés evaluar a futuro la influencia que tienen estos modelos en especial en lo referido a las características relevantes tales como la transferencia de calor y la distribución de presiones sobre el cuerpo y composición química del gas, al ser comparados con modelos más sencillos, o bien considerar la incorporación de modelos físicos más complejos, tales como por ejemplo, los que surgen al considerar un mayor número de temperaturas en no equilibrio termodinámico, un mayor número de especies en el modelo cinético, o bien modelos de turbulencia orientados a flujos hipersónicos. Se considera que el código desarrollado es suficientemente flexible para permitir la incorporación de estos nuevos modelos en forma sencilla y con un mínimo o nulo impacto en la estructura general del mismo.

En todos los resultados presentados en esta tesis se empleó el esquema SLAU, uno de los más recientes esquemas de la familia AUSM, en la evaluación numérica de los flujos convectivos. La interface computacional diseñada para la evaluación de estos es general, por lo que en el futuro se considera que incorporar y evaluar otros esquemas tales como el esquema de Roe, AUSM, AUSM+, Van-Leer, por mencionar algunos, requeriría un esfuerzo menor, al menos en los aspectos concernientes a la implementación computacional.

Un aspecto que se considera necesario mejorar y analizar en mayor profundidad se

refiere al aumento de la robustez y precisión obtenida mediante la reconstrucción lineal de segundo orden. En particular es necesario estudiar el efecto de la extrapolación de la velocidad en la región de estancamiento, donde el flujo convectivo es altamente sensible a la dirección de la velocidad extrapolada.

La metodología de integración implícita actual del código recurre a una formulación de un jacobiano analítico aproximado tanto de los términos convectivos y difusivos como de no equilibrio termoquímico. En general se ha comprobado que la obtención de este jacobiano requiere una sustancial porción del tiempo de cálculo y de memoria. La complejidad del jacobiano analítico hace necesario que este se obtenga mediante multiplicación sucesiva de matrices de forma de evitar introducir errores en el código producidas por complicadas expresiones algebraicas. De forma de incorporar una mayor generalidad en el código y de reducir los requerimientos de memoria se propone considerar la implementación de metodologías de obtención numérica del jacobiano o bien métodos libres del jacobiano.

Actualmente han sido implementadas únicamente las condiciones de contorno empleadas necesarias para los resultados obtenidos en este trabajo. De manera de aumentar el rango de aplicación del código es de interés la incorporación de condiciones de entrada y salida de flujo subsónico, condiciones de borde basadas en características, así como condiciones de borde más sofisticadas en la pared, por ejemplo para incorporar efectos de catalicidad parcial, radiación térmica y/o ablación.

El código actualmente lee un archivo inicial de datos con un formato preestablecido el cuál permite tanto la lectura de parámetros sencillos del tipo `key=value` como datos más complejos almacenados en forma de tablas, tales como los parámetros del modelo cinético y de transporte. De forma de generalizar y simplificar este proceso se propone la incorporación de capacidades de lectura de archivos de formatos estandarizados, para el cuál el formato XML se presenta como el principal candidato.

Las simulaciones llevadas a cabo en esta tesis han empleado mallas estructuradas, estructuradas en bloque o parcialmente estructuradas. Estas mallas resultaron de utilidad para proveer una discretización bien alineada con las características principales del flujo de forma de no introducir efectos indeseados que puedan perjudicar y/o opacar el proceso de validación. Una vez que el código adquiriera mayor madurez y confiabilidad, es de interés la obtención de soluciones en mallas parcialmente no estructuradas o completamente no estructuradas (conformadas por triángulos, tetraedros) para los cuales la metodología aquí desarrollada es aplicable en forma directa y donde es aprovechable el sistema orientado a objetos de administración de la malla que actualmente ya posee funcionalidad completa en mallas no estructuradas híbridas.

En cuanto a este sistema, una de las características de mayor interés a implementar a mediano plazo es la provisión de capacidades de refinamiento adaptivo. Un primer paso dado en este sentido ha sido la implementación de las funcionalidades de inserción y remoción dinámica de entidades, si bien aún se encuentra abierto el problema de administración de la jerarquía de las entidades refinadas, el cuál presenta una complejidad considerable cuando es considerada su implementación en paralelo.

Otra característica interesante que se propone adicionar, es la incorporación de la capacidad de manipulación de entidades de malla implícitas, es decir entidades de malla que no son almacenadas explícitamente en memoria. Esto contribuiría a la disminución de la memoria utilizada por el núcleo y que no es aprovechable en forma directa por el código de cálculo numérico.

PARÁMETROS FÍSICOS

A.1 Datos de las especies

En la Tabla A.1 se presentan los datos de las especies que comprenden el modelo de 7 especies del aire. Se presentan en esta tabla valores de la masa molar M , entalpía de formación h^0 y temperatura característica vibracional θ_{ve} extraídos de [1], [33] y [78] respectivamente.

Tabla A.1: Datos de las especies.

Especie	$M[\text{kg/mol}]$	$h_J^0[\text{J/kg}]$	$\theta_{ve}[\text{K}]$
N ₂	28.0134×10^{-3}	0.0	3340
O ₂	31.9988×10^{-3}	0.0	2230
NO	30.0061×10^{-3}	2.992×10^6	2690
N	14.0067×10^{-3}	3.361×10^7	0.0
O	15.9994×10^{-3}	1.542×10^7	0.0
NO ⁺	30.0056×10^{-3}	3.279×10^7	2690
e ⁻	5.4858×10^{-7}	0.0	0.0

A.2 Datos de la energía electrónica

En la Tabla A.2 se presentan las temperaturas características de los niveles del modo de energía electrónico θ_{el} y la degeneración de cada nivel g para el modelo de 7 especies del aire. Los valores presentados han sido extraídos de [67], mientras que el nivel de truncamiento se ha elegido de acuerdo a [61].

Tabla A.2: Niveles de energía electrónica.

Especie	Nivel	$\theta_{el,i}$	g_i	Especie	Nivel	$\theta_{el,i}$	g_i
N ₂	1	0.000000E+00	1	O	0	0.000000E+00	5
N ₂	2	7.22316E+04	3	O	1	2.277078E+02	3
O ₂	0	0.000000E+00	3	O	2	3.265689E+02	1
O ₂	1	1.139156E+04	2	O	3	2.283029E+04	5
O ₂	2	1.898474E+04	1	O	4	4.861993E+04	1
O ₂	3	4.755974E+04	1	N	0	0.000000E+00	4
O ₂	4	4.991242E+04	6	N	1	2.76647E+04	10
O ₂	5	5.092269E+04	3	N	2	4.14931E+04	6
O ₂	6	7.189863E+04	3	NO ⁺	0	0.000000E+00	1
NO	0	0.000000E+00	4	NO ⁺	1	7.508968E+04	3
NO	1	5.46735E+04	8	e ⁻	0	0.000000E+00	1

A.3 Datos de propiedades de transporte

A.3.1 Integrales de colisión

En las Tablas A.3 y A.4 se presentan los parámetros de las curvas de ajuste de las integrales de colisión (veáse (2.56)) necesarias para el cálculo de las propiedades de transporte en el modelo de Gupta [66].

Tabla A.3: Integrales de colisión $\Omega_{0,0}$.

† El rango de temperaturas es $1000 < T < 30000$ K excepto donde es notado

Par de colisión	A_0	A_1	A_2	A_3	Rango Temp. K [†]
N ₂ -N ₂	0.0	-0.0112	-0.1182	4.8464	
N ₂ -O ₂	0.0	-0.0465	-0.5729	1.6185	
O ₂ -O ₂	0.0	-0.0410	-0.4977	1.8302	
N ₂ -N	0.0	-0.0194	0.0119	4.1055	

Tabla A.3: Integrales de colisión $\Omega_{0,0}$ (continuación).

Par de colisión	A_0	A_1	A_2	A_3	Rango Temp. K [†]
O ₂ -N	0.0	-0.0179	0.0152	3.9996	
N-N	0.0	0.0033	-0.0572	5.0452	
N ₂ -O	0.0	-0.0139	-0.0825	4.5785	
O ₂ -O	0.0	-0.0226	0.1300	3.3363	
N-O	0.0	0.0048	-0.4195	5.7774	
O-O	0.0	-0.0034	-0.0572	4.9901	
N ₂ -NO	0.0	-0.0291	0.2324	3.2082	
O ₂ -NO	0.0	-0.438	0.5352	1.7252	
NO-N	0.0	-0.0185	0.0118	4.0590	
NO-O	0.0	-0.0179	0.0152	3.9996	
NO-NO	0.0	-0.0364	0.3825	2.4718	
N ₂ -NO ⁺	0.0	0.0	-0.4000	6.8543	
O ₂ -NO ⁺	0.0	0.0	-0.4000	6.8543	
N-NO ⁺	0.0	0.0	-0.4000	6.8543	
O-NO ⁺	0.0	0.0	-0.4000	6.8543	
NO-NO ⁺	0.0	-0.0047	-0.0551	4.873	
NO ⁺ -NO ⁺	0.0	0.0	-2.0000	23.8237	
e ⁻ -N ₂	0.1147	-2.8945	24.5080	-67.3691	
e ⁻ -O ₂	0.0241	-0.3467	1.3887	-0.0110	1000 - 9000
	0.0025	-0.0742	0.7235	-0.2116	9000 - 30000
e ⁻ -N	0.0	0.0	0.0	1.6094	
e ⁻ -O	0.0164	-0.2431	1.1231	-1.5561	1000-9000
	-0.2027	5.6428	-51.5646	155.6091	9000 - 30000
e ⁻ -NO	-0.2202	5.2265	-40.5659	104.716	1000 - 8000
	-0.2871	8.3757	-81.3787	265.6292	8000-30000
e ⁻ -NO ⁺	0.0	0.0	-2.0000	23.8237	

Tabla A.3: Integrales de colisión $\Omega_{0,0}$ (continuación).

Par de colisión	A_0	A_1	A_2	A_3	Rango Temp. K [†]
$e^- - e^-$	0.0	0.0	-2.0000	23.8237	

Tabla A.4: Integrales de colisión $\Omega_{1,1}$.

[†] El rango de temperaturas es $1000 < T < 30000$ K excepto donde es notado

Par de colisión	A_0	A_1	A_2	A_3	Rango Temp. K [†]
$N_2 - N_2$	0.0	-0.0203	0.0683	4.0900	
$N_2 - O_2$	0.0	-0.0558	0.7590	0.8955	
$O_2 - O_2$	0.0	-0.0485	0.6475	1.2607	
$N_2 - N$	0.0	-0.0190	0.0239	4.1782	
$O_2 - N$	0.0	-0.0203	0.0730	3.8818	
$N - N$	0.0	-0.0118	-0.0960	4.3252	
$N_2 - O$	0.0	-0.0169	-0.0143	4.4195	
$O_2 - O$	0.0	-0.0247	0.1783	3.2517	
$N - O$	0.0	0.0065	-0.4467	6.0426	
$O - O$	0.0	-0.0207	0.0780	3.5658	
$N_2 - NO$	0.0	-0.0385	0.4226	2.4507	
$O_2 - NO$	0.0	-0.0522	0.7045	1.0738	
$NO - N$	0.0	-0.0196	0.0478	4.0321	
$NO - O$	0.0	-0.0203	0.0730	3.8818	
$NO - NO$	0.0	-0.0453	0.5624	1.7669	
$N_2 - NO^+$	0.0	0.0	-0.4000	6.7760	
$O_2 - NO^+$	0.0	0.0	-0.4000	6.7760	
$N - NO^+$	0.0	0.0	-0.4000	6.7760	
$O - NO^+$	0.0	0.0	-0.4000	6.7760	
$NO - NO^+$	0.0	-0.0047	-0.4000	6.7760	

Tabla A.4: Integrales de colisión $\Omega_{1,1}$ (continuación).

Par de colisión	A_0	A_1	A_2	A_3	Rango Temp. K [†]
NO ⁺ –NO ⁺	0.0	0.0	-2.0000	24.3602	
e ⁻ –N ₂	0.1147	-2.8945	24.5080	-67.3691	
e ⁻ –O ₂	0.0241	-0.3467	1.3887	-0.0110	1000 - 9000
	0.0025	-0.0742	0.7235	-0.2116	9000 - 30000
e ⁻ –N	0.0	0.0	0.0	1.6094	
e ⁻ –O	0.0164	-0.2431	1.1231	-1.5561	1000-9000
	-0.2027	5.6428	-51.5646	155.6091	9000 - 30000
e ⁻ –NO	-0.2202	5.2265	-40.5659	104.7126	1000 - 8000
	-0.2871	8.3757	-81.3787	265.6292	8000-30000
e ⁻ –NO ⁺	0.0	0.0	-2.0000	24.3061	
e ⁻ –e ⁻	0.0	0.0	-2.0000	24.3061	

A.4 Datos del modelo cinético

A.4.1 Modelo cinético de Park

En la Tabla A.5 se presentan las constantes para la evaluación del coeficiente de reacción directa $k_{f,r}(T_{f,r}) = C_{f,r} T_{f,r}^{N_{f,r}} \exp(-\Theta_{f,r}/T_{f,r})$ correspondientes al modelo cinético de Park [127], además de las temperaturas de control en los sentidos directo $T_{f,r}$ e inverso $T_{b,r}$ utilizadas para modelar el acoplamiento cinético-vibracional. En la Tabla A.6 se presentan la eficiencia de las especies catalíticas del modelo.

Tabla A.5: Parámetros del coeficiente de reacción directa, $k_{f,r}$ [cm³/mol-s²].
Modelo cinético de Park.

r	Reacción	$C_{f,r}$	$N_{f,r}$	$\Theta_{f,r}$	$T_{f,r}$	$T_{b,r}$
1	N ₂ + M ₁ \rightleftharpoons 2N + M ₁	7.0E+21	-1.60	1.1320E+05	$\sqrt{TT_{ve}}$	T
2	N ₂ + M ₂ \rightleftharpoons 2N + M ₂	3.0E+22	-1.60	1.1320E+05	$\sqrt{TT_{ve}}$	T
3	N ₂ + e ⁻ \rightleftharpoons 2N + e ⁻	3.00E+24	-1.60	1.1320E+05	T_{ve}	T_{ve}

Tabla A.5: (Continuación).

r	Reacción	$C_{f,r}$	$N_{f,r}$	$\Theta_{f,r}$	$T_{f,r}$	$T_{b,r}$
4	$O_2 + M_3 \rightleftharpoons 2O + M_3$	2.00E+21	-1.50	5.9500E+04	$\sqrt{TT_{ve}}$	T
5	$O_2 + M_4 \rightleftharpoons 2O + M_4$	1.00E+22	-1.50	5.9500E+04	$\sqrt{TT_{ve}}$	T
6	$NO + M_5 \rightleftharpoons N + O + M_5$	5.00E+15	0.00	7.5500E+04	$\sqrt{TT_{ve}}$	T
7	$NO + M_6 \rightleftharpoons N + O + M_6$	1.10E+17	0.00	7.5500E+04	$\sqrt{TT_{ve}}$	T
8	$O + N_2 \rightleftharpoons N + NO$	6.40E+17	-1.00	3.8400E+04	T	T
9	$O + NO \rightleftharpoons N + O_2$	8.40E+12	0.00	1.9450E+04	T	T
10	$N + O \rightleftharpoons NO^+ + e^-$	8.80E+08	1.00	3.1900E+04	T	T_{ve}

Tabla A.6: Eficiencia de las especies catalíticas. Modelo de Park.

Especie	N_2	O_2	NO	N	O	NO^+	e^-
M_1	1.0	1.0	1.0	0.0	0.0	1.0	0.0
M_2	0.0	0.0	0.0	1.0	1.0	0.0	0.0
M_3	1.0	1.0	1.0	0.0	0.0	1.0	0.0
M_4	0.0	0.0	0.0	1.0	1.0	0.0	0.0
M_5	1.0	1.0	1.0	0.0	0.0	1.0	0.0
M_6	0.0	0.0	0.0	1.0	1.0	0.0	0.0

En la Tabla A.7 se presentan los coeficientes de la curva de ajuste para la evaluación de la constante de equilibrio para el modelo de Park. Estos coeficientes, extraídos de [126], son dados en función de la densidad numérica total de la mezcla de gases.

Tabla A.7: Coeficientes en la expresión de la constante de equilibrio,

$$K_{eq}(T) \left[\frac{\text{cm}^3}{\text{mols}} \right] = \exp \left[A_1(T/10000) + A_2 + A_3 \ln(10000/T) + A_4(1000/T) + A_5(1000/T)^2 \right]$$

 Modelo de Park.

Densidad Numérica [partículas/cm ³]	A ₁	A ₂	A ₃	A ₄	A ₅
Reacción 1 a 3: N ₂ + M \rightleftharpoons 2N + M					
1.00E+14	3.49070E+00	8.31330E-01	4.09780E+00	-1.27280E+01	7.48700E-02
1.00E+15	2.07230E+00	1.38970E+00	2.06170E+00	-1.18280E+01	1.51050E-02
1.00E+16	1.60600E+00	1.57320E+00	1.39230E+00	-1.15330E+01	-4.54300E-03
1.00E+17	1.53510E+00	1.60610E+00	1.29930E+00	-1.14940E+01	-6.98000E-03
1.00E+18	1.47660E+00	1.62910E+00	1.21530E+00	-1.14570E+01	-9.44400E-03
1.00E+19	1.47660E+00	1.62910E+00	1.21530E+00	-1.14570E+01	-9.44400E-03
Reacción 4 a 5 : O ₂ + M \rightleftharpoons 2O + M					
1.00E+14	1.81030E+00	1.96070E+00	3.57160E+00	-7.36230E+00	8.38610E-02
1.00E+15	9.14354E-01	2.31600E+00	2.28850E+00	-6.79690E+00	4.63380E-02
1.00E+16	6.41830E-01	2.42530E+00	1.90260E+00	-6.62770E+00	3.51510E-02
1.00E+17	5.53880E-01	2.46000E+00	1.77630E+00	-6.57200E+00	3.14450E-02
1.00E+18	5.24550E-01	2.47150E+00	1.73420E+00	-6.55340E+00	3.02090E-02
1.00E+19	5.09890E-01	2.47730E+00	1.71320E+00	-6.54410E+00	2.95910E-02
Reacción 6 a 7 : NO + M \rightleftharpoons N + O + M					
1.00E+14	2.16490E+00	7.85770E-02	2.85080E+00	-8.54220E+00	5.30430E-02
1.00E+15	1.00720E+00	5.35450E-01	1.19110E+00	-7.80980E+00	4.39400E-03
1.00E+16	6.38170E-01	6.81890E-01	6.63360E-01	-7.57730E+00	-1.10250E-02
1.00E+17	5.58890E-01	7.15580E-01	5.53960E-01	-7.53040E+00	-1.40890E-02
1.00E+18	5.15000E-01	7.32860E-01	4.90960E-01	-7.50250E+00	-1.59380E-02
1.00E+19	5.07650E-01	7.35750E-01	4.80420E-01	-7.49790E+00	-1.62470E-02
Reacción 8: O + N ₂ \rightleftharpoons N + NO					
1.00E+14	1.32610E+00	7.52680E-01	1.24740E+00	-4.18570E+00	2.18400E-02
1.00E+15	1.06530E+00	8.54170E-01	8.70930E-01	-4.01880E+00	1.07210E-02
1.00E+16	9.67940E-01	8.91310E-01	7.29100E-01	-3.95550E+00	6.48800E-03
1.00E+17	9.76460E-01	8.90430E-01	7.45720E-01	-3.96420E+00	7.12300E-03
1.00E+18	9.61880E-01	8.96170E-01	7.24790E-01	-3.95550E+00	6.50900E-03
1.00E+19	9.69210E-01	8.93290E-01	7.35310E-01	-3.95960E+00	6.81800E-03

Tabla A.7: (Continuación.)

Densidad Numérica [partículas/cm ³]	A ₁	A ₂	A ₃	A ₄	A ₅
Reacción 9: O + NO \rightleftharpoons N + O ₂					
1.00E+14	3.54380E-01	-1.88210E+00	-7.21110E-01	-1.17970E+00	-3.08310E-02
1.00E+15	9.36130E-02	-1.78060E+00	-1.09750E+00	-1.01280E+00	-4.19490E-02
1.00E+16	-3.73200E-03	-1.74340E+00	-1.23940E+00	-9.49520E-01	-4.61820E-02
1.00E+17	4.81500E-02	-1.74430E+00	-1.22270E+00	-9.58240E-01	-4.55450E-02
1.00E+18	-9.75800E-03	-1.73860E+00	-1.24360E+00	-9.49000E-01	-4.61590E-02
1.00E+19	-2.42800E-03	-1.74150E+00	-1.23310E+00	-9.53650E-01	-4.58500E-02
Reacción 10: N + O \rightleftharpoons NO ⁺ + e ⁻					
1.00E+14	-2.18520E+00	-6.67090E+00	-4.29680E+00	-2.21750E+00	-5.07480E-02
1.00E+15	-1.02760E+00	-7.12780E+00	-2.63700E+00	-2.95000E+00	-2.10000E-03
1.00E+16	-6.58710E-01	-7.27420E+00	-2.10960E+00	-3.18230E+00	1.33100E-02
1.00E+17	-5.79240E-01	-7.30790E+00	-1.99990E+00	-3.22940E+00	1.63820E-02
1.00E+18	-5.35380E-01	-7.32520E+00	-1.93700E+00	-3.25720E+00	1.82300E-02
1.00E+19	-5.28010E-01	-7.32810E+00	-1.92640E+00	-3.26180E+00	1.85400E-02

A.4.2 Modelo cinético de Gupta

En la Tabla A.8 se presentan las constantes para la evaluación del coeficiente de reacción directa utilizados en el modelo cinético de 5 especies del aire de Gupta [66]. Asimismo en la Tabla A.9 se muestran las eficiencias de las especies catalíticas del modelo.

Tabla A.8: Parámetros del coeficiente de reacción directa, $k_{f,r}$ $\left[\frac{\text{cm}^3}{\text{mols}} \right]$
Modelo cinético de Gupta.

r	Reacción	$C_{f,r}$	$N_{f,r}$	$\Theta_{f,r}$	$T_{f,r}$	$T_{b,r}$
1	O ₂ + M ₁ \rightleftharpoons 2O + M ₁	3.61E+18	-1.00	5.940E+04	$\sqrt{TT_{ve}}$	T
2	N ₂ + M ₂ \rightleftharpoons 2N + M ₂	1.92E+17	-0.50	1.131E+05	$\sqrt{TT_{ve}}$	T
3	N ₂ + N \rightleftharpoons 2N + N	4.15E+22	-1.50	1.131E+05	$\sqrt{TT_{ve}}$	T
4	NO + M ₃ \rightleftharpoons N + O + M ₃	3.97E+20	-1.5	7.560E+04	$\sqrt{TT_{ve}}$	T
5	NO + O \rightleftharpoons O ₂ + N	3.18E+09	1.00	-1.970E+04	T	T
6	N ₂ + O \rightleftharpoons NO + N	6.75E+13	0.00	3.750E+04	T	T

Tabla A.9: Eficiencia de las especies catalíticas. Modelo de Gupta.

Especie	N ₂	O ₂	NO	N	O
M ₁	2.0	9.0	1.0	1.0	25.0
M ₂	2.5	1.0	1.0	0.0	1.0
M ₃	1.0	1.0	20.0	20.0	20.0

En la Tabla A.10 se presentan los coeficientes de la curva de ajuste para la evaluación de la constante de equilibrio según el modelo de Gupta [66].

Tabla A.10: Coeficientes en la expresión de la constante de equilibrio.
 $K_{eq}(T) \left[\frac{\text{cm}^3}{\text{mols}} \right] = \exp[AZ^5 + BZ^4 + CZ^3 + DZ^2 + EZ + F]$, $Z = \ln(10000/T)$
 Modelo de Gupta.

Densidad Numérica [1/cm ³]	A	B	C	D	E	F
Reacción 1: O ₂ + M ₁ ⇌ 2O + M ₁						
1.00E+14	0.00000E+00	-8.28621E-01	-1.05568E+00	1.51416E+00	-1.07091E+01	-3.07176E+00
1.00E+15	0.00000E+00	-7.19214E-01	-1.35815E+00	9.73802E-01	-9.13167E+00	-3.52942E+00
1.00E+16	0.00000E+00	-6.16239E-01	-1.60998E+00	3.65775E-01	-7.68180E+00	-3.82001E+00
1.00E+17	0.00000E+00	-5.38034E-01	-1.76687E+00	-2.14344E-01	-6.55629E+00	-3.94645E+00
1.00E+18	0.00000E+00	-4.81290E-01	-1.83099E+00	-8.28353E-01	-5.62039E+00	-3.96649E+00
1.00E+19	0.00000E+00	-4.66031E-01	-1.78672E+00	-1.24877E+00	-5.15926E+00	-3.92801E+00
Reacción 2: N ₂ + M ₂ ⇌ 2N + M ₂						
1.00E+14	0.00000E+00	-1.42518E+00	-1.79191E+00	-1.52245E-01	-1.72635E+01	-7.77060E+00
1.00E+15	0.00000E+00	-1.31460E+00	-2.11364E+00	-6.55486E-01	-1.56315E+01	-8.31884E+00
1.00E+16	0.00000E+00	-1.20533E+00	-2.40055E+00	-1.23908E+00	-1.40810E+01	-8.70302E+00
1.00E+17	0.00000E+00	-1.11597E+00	-2.60376E+00	-1.81730E+00	-1.28199E+01	-8.90679E+00
1.00E+18	0.00000E+00	-1.04068E+00	-2.73172E+00	-2.46330E+00	-1.16894E+01	-8.98864E+00
1.00E+19	0.00000E+00	-1.00734E+00	-2.74128E+00	-2.93912E+00	-1.10496E+01	-8.97632E+00
Reacción 3: N ₂ + N ⇌ 2N + N						
1.00E+14	0.00000E+00	-1.42518E+00	-1.79191E+00	-1.52245E-01	-1.72635E+01	-7.77060E+00
1.00E+15	0.00000E+00	-1.31460E+00	-2.11364E+00	-6.55486E-01	-1.56315E+01	-8.31884E+00
1.00E+16	0.00000E+00	-1.20533E+00	-2.40055E+00	-1.23908E+00	-1.40810E+01	-8.70302E+00
1.00E+17	0.00000E+00	-1.11597E+00	-2.60376E+00	-1.81730E+00	-1.28199E+01	-8.90679E+00
1.00E+18	0.00000E+00	-1.04068E+00	-2.73172E+00	-2.46330E+00	-1.16894E+01	-8.98864E+00
1.00E+19	0.00000E+00	-1.00734E+00	-2.74128E+00	-2.93912E+00	-1.10496E+01	-8.97632E+00
Reacción 4: NO + M ₃ ⇌ N + O + M ₃						
1.00E+14	0.00000E+00	-1.02874E+00	-1.21018E+00	1.11429E+00	-1.31595E+01	-5.72854E+00
1.00E+15	0.00000E+00	-9.18760E-01	-1.52228E+00	5.92488E-01	-1.15548E+01	-6.23150E+00
1.00E+16	0.00000E+00	-8.12622E-01	-1.79165E+00	-3.32370E-03	-1.00546E+01	-6.56888E+00
1.00E+17	0.00000E+00	-7.28842E-01	-1.97170E+00	-5.82492E-01	-8.86131E+00	-6.73398E+00
1.00E+18	0.00000E+00	-6.62823E-01	-2.06774E+00	-1.21250E+00	-7.82813E+00	-6.78492E+00
1.00E+19	0.00000E+00	-6.38527E-01	-2.05038E+00	-1.66061E+00	-7.27765E+00	-6.75953E+00

Tabla A.10: (Continuación.)

Densidad Numérica [1/cm ³]	<i>A</i>	<i>B</i>	<i>C</i>	<i>D</i>	<i>E</i>	<i>F</i>
Reacción 5: NO + O \rightleftharpoons O ₂ + N						
1.00E+14	0.00000E+00	-2.33168E-01	-2.25679E-01	-5.17639E-01	-2.78006E+00	-3.02215E+00
1.00E+15	0.00000E+00	-2.32567E-01	-2.35307E-01	-4.99081E-01	-2.75280E+00	-3.06745E+00
1.00E+16	0.00000E+00	-2.29430E-01	-2.52843E-01	-4.86866E-01	-2.70247E+00	-3.11424E+00
1.00E+17	0.00000E+00	-2.23855E-01	-2.76009E-01	-4.85915E-01	-2.63469E+00	-3.15291E+00
1.00E+18	0.00000E+00	-2.14580E-01	-3.07925E-01	-5.01912E-01	-2.53742E+00	-3.18381E+00
1.00E+19	0.00000E+00	-2.05544E-01	-3.34842E-01	-5.29614E-01	-2.44806E+00	-3.19689E+00
Reacción 6: N ₂ + O \rightleftharpoons NO + N						
1.00E+14	0.00000E+00	-3.96440E-01	-5.81737E-01	-1.26653E+00	-4.10395E+00	-2.04206E+00
1.00E+15	0.00000E+00	-3.95839E-01	-5.91364E-01	-1.24797E+00	-4.07669E+00	-2.08735E+00
1.00E+16	0.00000E+00	-3.92703E-01	-6.08901E-01	-1.23576E+00	-4.02636E+00	-2.13415E+00
1.00E+17	0.00000E+00	-3.87127E-01	-6.32066E-01	-1.23481E+00	-3.95858E+00	-2.17281E+00
1.00E+18	0.00000E+00	-3.77852E-01	-6.63983E-01	-1.25081E+00	-3.86131E+00	-2.20371E+00
1.00E+19	0.00000E+00	-3.68817E-01	-6.90900E-01	-1.27851E+00	-3.77195E+00	-2.21680E+00

MATRICES JACOBIANAS

B.1 Jacobiano de los términos convectivos

El jacobiano de los términos convectivos se deriva asumiendo que los flujos convectivos se obtienen mediante el esquema de Van Leer. El flujo de Van Leer generalizado para el caso de no equilibrio termoquímico puede escribirse como [95]:

$$(\mathbf{F} \cdot \mathbf{n})_{LR} = \Phi^+(\mathbf{u}_{L,\mathbf{n}}) + \Phi^-(\mathbf{u}_{R,\mathbf{n}}) \quad (\text{B.1})$$

donde,

$$\Phi^\pm(\mathbf{u}) = \begin{cases} \mathbf{0} & \text{si } \pm M_n < -1 \\ \mathbf{F}(\mathbf{u}) \cdot \mathbf{n} & \text{si } \pm M_n > 1 \end{cases} \quad (\text{B.2})$$

y,

$$\Phi^\pm(\mathbf{u}) = \begin{bmatrix} \pm \frac{\rho_s(v_n \pm a)^2}{4a} \\ \pm \frac{\rho(v_n \pm a)^2}{4a} \left[\mathbf{v} - \frac{1}{\gamma}(v_n \mp 2a) \right] \\ \pm \frac{\rho(v_n \pm a)^2}{4a} \left[\frac{(\gamma-1)v_n \pm 2a}{2(\gamma^2-1)} + \frac{E}{\rho} - \frac{a^2}{\gamma(\gamma-1)} - v_n^2 \right] \\ \pm \frac{\rho(v_n \pm a)^2}{4a} \frac{\epsilon_{ve}}{\rho} \end{bmatrix}, \quad \text{si } |M_n| < 1 \quad (\text{B.3})$$

en donde M_n es el número de Mach definido según la velocidad v_n de la celda en la dirección de la interface, $M_n = \frac{\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}}{a}$

El jacobiano de (B.1) en el caso supersónico es simplemente la matriz jacobiana del flujo físico convectivo evaluada en el estado correspondiente de acuerdo a la (B.2) y se encuentra dada por [95]:

$$\mathbf{A}_n = \begin{bmatrix} \delta_{sr}v_n & c_s \mathbf{n}^T & 0 & 0 \\ \left(\kappa \frac{\|\mathbf{v}\|^2}{2} + \chi_r\right) \mathbf{n} - v_n \mathbf{v} & \mathbf{v} \otimes \mathbf{n}^T - \kappa \mathbf{n} \otimes \mathbf{v}^T + v_n I_d & \kappa \mathbf{n} & (\kappa_{ve} - \kappa) \mathbf{n} \\ \left(\kappa \frac{\|\mathbf{v}\|^2}{2} - H + \chi_r\right) v_n & H \mathbf{n}^T - \kappa v_n \mathbf{v}^T & (\kappa + 1) v_n & (\kappa_{ve} - \kappa) v_n \\ -\varepsilon_{ve} & \varepsilon_{ve} \mathbf{n}^T & 0 & v_n \end{bmatrix} \quad (\text{B.4})$$

en donde,

$$\kappa = \frac{\sum_s \rho_s R_s}{\sum_s \rho_s c_{v,s}^{tr}} \quad (\text{B.5a})$$

$$\kappa_{ve} = \frac{\rho_e R_e}{\sum_s \rho_s c_{v,s}^{ve}} \quad (\text{B.5b})$$

$$\chi_{s \neq e} = R_s T - \kappa \varepsilon_{tr,s} - \kappa_{ve} \varepsilon_{ve,s} \quad (\text{B.5c})$$

$$\chi_e = R_e T_{ve} - \kappa_{ve} \varepsilon_{ve,e} \quad (\text{B.5d})$$

En el caso subsónico, es útil reescribir el flujo de Van Leer utilizando el conjunto de variables auxiliares

$$\varphi^\pm = \begin{bmatrix} \varphi_{\rho_s}^\pm \\ \varphi_{\rho \mathbf{v}}^\pm \\ \varphi_E^\pm \\ \varphi_{\varepsilon_{ve}}^\pm \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \pm \frac{\rho_s (v_n \pm a)^2}{4a} \\ \mathbf{v} - \frac{1}{\gamma} (v_n \mp 2a) \\ \frac{\{(\gamma-1)v_n \pm 2a\}^2}{2(\gamma^2-1)} + \frac{E}{\rho} - \frac{a^2}{\gamma(\gamma-1)} - v_n^2 \\ \frac{\varepsilon_{ve}}{\rho} \end{bmatrix} \quad (\text{B.6})$$

y

$$\mathbf{w} = (\rho_s, \mathbf{v}, E, \varepsilon_{ve}, a)^T \quad (\text{B.7})$$

de forma tal que el jacobiano del flujo con respecto a las variables conservativas se obtiene haciendo:

$$\frac{\partial \Phi^\pm}{\partial \mathbf{u}} = \frac{\partial \Phi^\pm}{\partial \varphi^\pm} \frac{\partial \varphi^\pm}{\partial \mathbf{w}} \frac{\partial \mathbf{w}}{\partial \mathbf{u}} \quad (\text{B.8})$$

donde:

$$\frac{\partial \Phi^\pm}{\partial \varphi^\pm} = \begin{bmatrix} \delta_{sr} & 0 & 0 & 0 \\ \varphi_{\rho \mathbf{v}}^\pm & \sum_s \varphi_{\rho s}^\pm & 0 & 0 \\ \varphi_E^\pm & 0 & \sum_s \varphi_{\rho s}^\pm & 0 \\ \varphi_{\varepsilon_{ve}}^\pm & 0 & 0 & \sum_s \varphi_{\rho s}^\pm \end{bmatrix} \quad (\text{B.9})$$

$$\frac{\partial \varphi^\pm}{\partial \mathbf{w}} = \begin{bmatrix} \pm \frac{(v_n \pm a)^2}{2a} \delta_{sr} & \pm \frac{\rho_s (v_n \pm a)}{2a} \mathbf{n}^T & 0 & 0 & \frac{\rho_s (v_n \pm a)}{2a} \mp \frac{\rho_s (v_n \pm a)^2}{4a^2} \\ 0 & I - \frac{1}{\gamma} \mathbf{n} \oplus \mathbf{n}^T & 0 & 0 & \pm \frac{2}{\gamma} \mathbf{n} \\ -\frac{E}{\rho^2} & \frac{2(\gamma-1)v_n \pm 2a}{\gamma+1} \mathbf{n}^T & \frac{1}{\rho} & 0 & \mp \frac{(\gamma-1)v_n \pm 2a}{\gamma^2-1} - 2\frac{a}{\gamma(\gamma-1)} \\ -\frac{\varepsilon_{ve}}{\rho^2} & 0 & 0 & \frac{1}{\rho} & 0 \end{bmatrix} \quad (\text{B.10})$$

y donde los jacobianos no triviales para el cómputo de $\frac{\partial \mathbf{w}}{\partial \mathbf{u}}$ son:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial v_i}{\partial \rho_s} = -\frac{v_i}{\rho} \\ \frac{\partial v_i}{\partial v_j} = \frac{\delta_{ij}}{\rho} \\ \frac{\partial v_i}{\partial E} = 0 \\ \frac{\partial v_i}{\partial \varepsilon_{ve}} = 0 \end{array} \right. \left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial a}{\partial \rho_s} = \frac{\gamma(\gamma-1)}{2\rho a} \left[\frac{1}{2} \|\mathbf{v}\|^2 - \frac{a}{\gamma(\gamma-1)} - h_s^0 \right] \\ \frac{\partial a}{\partial \rho v_i} = -\frac{\gamma(\gamma-1)}{2\rho a} v_i \\ \frac{\partial a}{\partial E} = \frac{\gamma(\gamma-1)}{2\rho a} \\ \frac{\partial a}{\partial \varepsilon_{ve}} = -\frac{\gamma(\gamma-1)}{2\rho a} \end{array} \right.$$

B.2 Jacobiano de los flujos difusivos

La matriz jacobiana de los flujos difusivos se deriva a partir de transformar los flujos a un sistema de coordenadas cartesiano definido por la terna ortonormal de versores \mathbf{n}, \mathbf{r} y \mathbf{t} , (en el caso más general tridimensional) en donde el versor \mathbf{n} se encuentra orientado en la dirección normal a la interface de una cara de forma tal que puede escribirse:

$$\mathbf{f}^v \cdot \mathbf{n} = Q^{-1} \mathbf{f}_n^v \quad (\text{B.11})$$

en donde para el caso tridimensional se tiene:

$$\mathbf{f}_n^v = \begin{bmatrix} -J_{n,s} \\ \tau_{nn} \\ \tau_{nr} \\ \tau_{nt} \\ \tau_{nn}v_n + \tau_{nr}v_r + \tau_{nt}v_t - \dots \\ \left(-\kappa_{tr}\frac{\partial T}{\partial n} - \kappa_{ve}\frac{\partial T_{ve}}{\partial n}\right) - \sum_s \left(-\rho D_s \frac{\partial c_s}{\partial n} h_s\right) \\ -\kappa_{ve}\frac{\partial T_{ve}}{\partial n} - \sum_s \left(-\rho D_s \frac{\partial c_s}{\partial n} \varepsilon_{ve,s}\right) \end{bmatrix} \quad (\text{B.12})$$

$$Q = \begin{bmatrix} \delta_{sr} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & n_x & n_y & n_z & 0 & 0 \\ 0 & r_x & r_y & r_z & 0 & 0 \\ 0 & t_x & t_y & t_z & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (\text{B.13})$$

Aplicando ahora la hipótesis de capa delgada, son despreciados los términos en (B.12) que involucran derivadas en las direcciones tangenciales a la cara, $\partial/\partial r$ y $\partial/\partial t$ quedando solo los términos que involucran derivadas en la dirección normal $\partial/\partial n$. Una simplificación adicional consiste en asumir que los términos que no involucran derivadas son constantes de forma tal que (B.12) puede reescribirse como:

$$\mathbf{f}^v \cdot \mathbf{n} = M_v \frac{\partial \mathbf{w}_n}{\partial n} \quad (\text{B.14})$$

donde

$$M_v = \begin{bmatrix} \rho D_s & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{4}{3}\mu & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \mu & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mu & 0 & 0 \\ \rho D_s h_s & \frac{4}{3}\mu v_n & \mu v_r & \mu v_t & \kappa_{tr} & \kappa_{ve} \\ \rho D_s \varepsilon_s & 0 & 0 & 0 & 0 & \kappa_{ve} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{w}_n = \begin{bmatrix} c_s \\ v_n \\ v_r \\ v_t \\ T \\ T_{ve} \end{bmatrix} \quad (\text{B.15})$$

La derivada de las variables primitivas en la dirección normal es aproximada ahora mediante la relación

$$\frac{\partial \mathbf{w}_n}{\partial n} = \frac{\mathbf{w}_{R,n} - \mathbf{w}_{L,n}}{\Delta n} \quad (\text{B.16})$$

en donde $\mathbf{w}_{L,n}$ y $\mathbf{w}_{R,n}$ denotan el vector de variables primitivas de los estados en las celdas la izquierda y derecha de la interface respectivamente y en donde Δn es la distancia entre los centroides de dichas celdas. Con estas simplificaciones y expresando el flujo con respecto a las variables primitivas en el sistema de coordenadas cartesiano original se obtiene finalmente:

$$\mathbf{f}^v \cdot \mathbf{n} = Q^{-1} M_n Q (\mathbf{w}_R - \mathbf{w}_L) \quad (\text{B.17})$$

en donde

$$M_n = \frac{M_v}{\Delta n} \quad (\text{B.18})$$

Finalmente el jacobiano de los flujos viscosos con respecto al vector de variables conservativas se obtiene a partir de:

$$\frac{\partial(\mathbf{f}_n^v \cdot \mathbf{n})}{\partial \mathbf{u}_L} = \frac{\partial(\mathbf{f}_n^v \cdot \mathbf{n})}{\partial \mathbf{w}_L} \frac{\partial \mathbf{w}_L}{\partial \mathbf{u}_L} = Q^{-1} M_n Q \frac{\partial \mathbf{w}_L}{\partial \mathbf{u}_L} \quad (\text{B.19})$$

$$\frac{\partial(\mathbf{f}_n^v \cdot \mathbf{n})}{\partial \mathbf{u}_R} = \frac{\partial(\mathbf{f}_n^v \cdot \mathbf{n})}{\partial \mathbf{w}_R} \frac{\partial \mathbf{w}_R}{\partial \mathbf{u}_R} = Q^{-1} M_n Q \frac{\partial \mathbf{w}_R}{\partial \mathbf{u}_R} \quad (\text{B.20})$$

donde nuevamente las filas de la matriz jacobiana $\frac{\partial \mathbf{w}}{\partial \mathbf{u}}$ no triviales son:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial c_s}{\partial \rho_r} = \frac{\delta_{sr} - c_s}{\rho} \\ \frac{\partial c_s}{\partial \rho v_i} = 0 \\ \frac{\partial c_s}{\partial E} = 0 \\ \frac{\partial c_s}{\partial \varepsilon_{ve}} = 0 \end{array} \right. \quad \left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial T}{\partial \rho_s} = \frac{1}{\rho c_v^{tr}} \left[\frac{\|\mathbf{v}\|^2}{2} - (\varepsilon_s - \varepsilon_{ve,s}) \right] \\ \frac{\partial T}{\partial \rho v_i} = -\frac{v_i}{\rho c_v^{tr}} \\ \frac{\partial T}{\partial E} = \frac{1}{\rho c_v^{tr}} \\ \frac{\partial T}{\partial \varepsilon_{ve}} = -\frac{1}{\rho c_v^{tr}} \end{array} \right. \quad \left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial T_{ve}}{\partial \rho_s} = -\frac{\varepsilon_{ve,s}}{\rho c_v^{ve}} \\ \frac{\partial T_{ve}}{\partial \rho v_i} = -\frac{v_i}{\rho c_v^{ve}} \\ \frac{\partial T_{ve}}{\partial E} = \frac{1}{\rho c_v^{ve}} \\ \frac{\partial T_{ve}}{\partial \varepsilon_{ve}} = -\frac{1}{\rho c_v^{ve}} \end{array} \right.$$

donde,

$$c_v^{tr} = \sum_{s=1}^{ne} c_s c_{v,s}^{tr}, \quad c_v^{ve} = \sum_{s=1}^{ne} c_s c_{v,s}^{ve} \quad (\text{B.21})$$

B.3 Jacobiano de los términos fuentes

B.3.1 Jacobiano de los términos de cinética química

El jacobiano de los términos de producción y destrucción de masa por reacciones químicas puede escribirse como:

$$\frac{\partial \dot{\omega}_i}{\partial \alpha} = \sum_{j=1}^{ne} \left(\frac{\partial \dot{\omega}_i}{\partial \rho_j} \right) + \frac{\partial \dot{\omega}_i}{\partial T} + \frac{\partial \dot{\omega}_i}{\partial T_{ve}} \quad (\text{B.22})$$

donde α representa una variable conservativa del sistema, y donde:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \dot{\omega}_i}{\partial \rho_j} = M_i \sum_{r=1}^{n_{rea}} (\nu_{ir}^b - \nu_{ir}^f) \left[k_{f,r} \left(\frac{\nu_{jr}^f}{\rho_j} \right) \prod_{s=1}^{ne} \left(\frac{\rho_s}{M_s} \right)^{\nu_{sr}^f} - k_{b,r} \left(\frac{\nu_{jr}^b}{\rho_j} \right) \prod_{s=1}^{ne} \left(\frac{\rho_s}{M_s} \right)^{\nu_{sr}^b} \right] \end{array} \right. \quad (\text{B.23})$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \dot{\omega}_i}{\partial T} = M_i \sum_{r=1}^{n_{rea}} (\nu_{ir}^b - \nu_{ir}^f) \left[\frac{\partial k_{f,r}}{\partial T_k} \prod_{s=1}^{ne} \left(\frac{\rho_s}{M_s} \right)^{\nu_{sr}^f} - \frac{\partial k_{b,r}}{\partial T_k} \prod_{s=1}^{ne} \left(\frac{\rho_s}{M_s} \right)^{\nu_{sr}^b} \right] \end{array} \right. \quad (\text{B.24})$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \dot{\omega}_i}{\partial T_{ve}} = M_i \sum_{r=1}^{n_{rea}} (\nu_{ir}^b - \nu_{ir}^f) \left[\frac{\partial k_{f,r}}{\partial T_k} \prod_{s=1}^{ne} \left(\frac{\rho_s}{M_s} \right)^{\nu_{sr}^f} - \frac{\partial k_{b,r}}{\partial T_{ve}} \prod_{s=1}^{ne} \left(\frac{\rho_s}{M_s} \right)^{\nu_{sr}^b} \right] \end{array} \right. \quad (\text{B.25})$$

La derivada parcial de los coeficientes de reacción con respecto a las temperaturas T y T_{ve} se obtienen a partir de:

$$\frac{\partial k_{f,r}}{\partial T} = \frac{\partial k_{f,r}}{\partial T_{f,r}} \frac{\partial T_{f,r}}{\partial T}, \quad \frac{\partial k_{f,r}}{\partial T_{ve}} = \frac{\partial k_{f,r}}{\partial T_{f,r}} \frac{\partial T_{f,r}}{\partial T_{ve}} \quad (\text{B.26a})$$

$$\frac{\partial k_{b,r}}{\partial T} = \frac{\partial k_{b,r}}{\partial T_{b,r}} \frac{\partial T_{b,r}}{\partial T}, \quad \frac{\partial k_{b,r}}{\partial T_{ve}} = \frac{\partial k_{b,r}}{\partial T_{b,r}} \frac{\partial T_{b,r}}{\partial T_{ve}} \quad (\text{B.26b})$$

en la cual $T_{f,r}$ y $T_{b,r}$ denotan la temperatura de control de la velocidad de reacción directa e inversa respectivamente. Las derivadas de los coeficientes de reacción con respecto a esta temperatura se obtienen en forma directa de las Ecs. 2.86 y 2.87:

$$\frac{\partial k_{f,r}}{\partial T_{f,r}} = \frac{k_{f,r}}{T_{f,r}} \left(N_{f,r} + \frac{\Theta_{f,r}}{k_{f,r}} \right) \quad (\text{B.27})$$

$$\frac{\partial k_{b,r}}{\partial T_{b,r}} = \frac{1}{K_{eq,r}} \frac{\partial k_{f,r}}{\partial T_{b,r}} - \frac{k_{b,r}}{K_{eq,r}} \frac{\partial K_{eq,r}}{\partial T_{b,r}} \quad (\text{B.28})$$

con,

$$\frac{\partial K_{eq,r}}{\partial T_{b,r}} = -K_{eq,r} \left(\frac{10000}{T_{b,r}^2} \right) \left(-A_{1,r}/Z^2 + A_{3,r}/Z + A_{4,r} + 2A_{5,r}Z \right), \quad Z = 10000/T_{b,r} \quad (\text{B.29})$$

para la curva de ajuste de Park (v. Ec. (2.88)) y

$$\frac{dK_{eq,r}}{dT_{b,r}} = -K_{eq,r} \left(\frac{1}{T_{b,r}^2} \right) \left(5A_r Z^4 + 4B_r Z^3 + 3C_r Z^2 + 2D_r Z + E_r \right), \quad Z = \ln(10000/T_{b,r}) \quad (\text{B.30})$$

para la curva de ajuste de Gupta (v. Ec. (2.89)) Finalmente las derivadas de la temperatura de control se obtienen mediante:

$$\frac{\partial T_{(f,b),r}}{\partial T} = \begin{cases} 1 & \text{si } T_{(f,b),r} \equiv T \\ 0 & \text{si } T_{(f,b),r} \equiv T_{ve} \\ \frac{1}{2} \left(\frac{T_{ve}}{\sqrt{TT_{ve}}} \right) & \text{si } T_{(f,b),r} \equiv \sqrt{TT_{ve}} \end{cases} \quad (\text{B.31})$$

$$\frac{\partial T_{(f,b),r}}{\partial T_{ve}} = \begin{cases} 0 & \text{si } T_{(f,b),r} \equiv T \\ 1 & \text{si } T_{(f,b),r} \equiv T_{ve} \\ \frac{1}{2} \left(\frac{T}{\sqrt{TT_{ve}}} \right) & \text{si } T_{(f,b),r} \equiv \sqrt{TT_{ve}} \end{cases} \quad (\text{B.32})$$

B.3.2 Jacobianos de los términos de simetría axial

La derivación de la contribución a la matriz jacobiana de los términos correspondientes a la formulación axisimétrica (v. Sección 2.2.6) se obtiene separando primero los términos en una contribución invíscida y viscosa.

$$\mathbf{s}^{\text{axi}} = \mathbf{s}^c + \mathbf{s}^d = -\frac{v_r}{r} \begin{bmatrix} \rho_s \\ \rho \mathbf{v} \\ E + p \\ \epsilon_{ve} \end{bmatrix} + \frac{1}{r} \begin{bmatrix} -J_{r,s} \\ \tau_{xr} \\ \tau_{rr} - \tau_{\varphi\varphi} \\ \tau_{xr} v_x + \tau_{rr} v_r - (q_r^T + q_r^D) \\ -(q_{ve,r}^T + q_{ve,r}^D) \end{bmatrix} \quad (\text{B.33})$$

El jacobiano del término convectivo se obtiene en forma directa utilizando el jacobiano del flujo físico convectivo y el jacobiano de la presión. El jacobiano de la contribución difusiva merece un tratamiento especial. En este existe una contribución dada por el jacobiano de las derivadas espaciales de las variables primitivas. Para obtener entonces

este expresión se utiliza primero la fórmula del gradiente dada por el método de Gauss, en donde para una variable primitiva cualquiera φ_i asociada a la celda i se tiene:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \varphi_i}{\partial x} &= \frac{1}{\mathcal{V}_{\Omega_i}} \sum_j \varphi_{ij} n_{x,ij} \mathcal{A}_{ij} \\ \frac{\partial \varphi_i}{\partial y} &= \frac{1}{\mathcal{V}_{\Omega_i}} \sum_j \varphi_{ij} n_{y,ij} \mathcal{A}_{ij}\end{aligned}$$

en la cual el índice j recorre las celdas vecinas a la celda i .

Asumiendo ahora que la variable en la cara φ_{ij} es tomada como el promedio aritmético de las celdas adyacentes, y despreciando las derivadas con respecto a las variables en las celdas vecinas de forma tal de restringir las contribuciones del jacobiano local de los términos fuente únicamente al bloque diagonal de la matriz jacobiana global, se tiene

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial \mathbf{u}_i} \left(\frac{\partial \varphi_i}{\partial x} \right) &= \frac{1}{2\mathcal{V}_{\Omega_i}} \sum_j n_{x,ij} \mathcal{A}_{ij} \frac{\partial \varphi_i}{\partial \mathbf{u}_i} \\ \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}_i} \left(\frac{\partial \varphi_i}{\partial r} \right) &= \frac{1}{2\mathcal{V}_{\Omega_i}} \sum_j n_{r,ij} \mathcal{A}_{ij} \frac{\partial \varphi_r}{\partial \mathbf{u}_r}\end{aligned}$$

Con esta última relación y utilizando los jacobianos de las variables primitivas ya dados es posible entonces completar la evaluación del jacobiano aproximado de los términos fuente de simetría axial.

B.4 Jacobiano de la relajación de la energía vibracional

Los términos de la relajación de la energía vibracional contribuyen a la última fila de los jacobianos de los términos fuentes. Este jacobiano tiene contribuciones dadas por cuatro términos:

$$\frac{\partial \Omega}{\partial \mathbf{u}} = -\frac{\partial p_e \nabla \cdot \mathbf{v}}{\partial \mathbf{u}} + \frac{\partial \Omega_{v-tr}}{\partial \mathbf{u}} + \frac{\partial \Omega_{el-tr}}{\partial \mathbf{u}} + \frac{\partial \Omega_{v,disoc.}}{\partial \mathbf{u}} \quad (\text{B.34})$$

La contribución del jacobiano del término de trabajo de la presión electrónica y el término debido de intercambio de energía por colisiones entre electrones y partículas pesadas es despreciado. El jacobiano del término de intercambio de energía vibracional-traslacional es obtenido mediante:

$$\frac{\partial \Omega_{v-tr}}{\partial \mathbf{u}} = \sum_s \frac{\partial \Omega_{tr-ve}}{\partial \rho_s} \frac{\partial \rho_s}{\partial \mathbf{u}} + \frac{\partial \Omega_{ve-tr}}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial \mathbf{u}} + \frac{\partial \Omega_{ve-tr}}{\partial T_{ve}} \frac{\partial T_{ve}}{\partial \mathbf{u}} \quad (\text{B.35})$$

donde se utilizan las aproximaciones:

$$\frac{\partial \Omega_{v-tr}}{\partial \rho_s} = \frac{\rho_s c_{v,s}^v}{\bar{\tau}_v} (T - T_{ve}) \quad (\text{B.36})$$

$$\frac{\partial \Omega_{v-tr}}{\partial T} = \frac{\sum_{s=mol.} \rho_s c_{v,s}^v}{\bar{\tau}_v} \quad (\text{B.37})$$

$$\frac{\partial \Omega_{v-tr}}{\partial T_{ve}} = - \frac{\sum_{s=mol.} \rho_s c_{v,s}^v}{\bar{\tau}_v} \quad (\text{B.38})$$

$$(\text{B.39})$$

Finalmente, el jacobiano de los términos del cambio de energía vibracional-electrónico producido por disociación molecular se encuentra dado por:

$$\frac{\partial \Omega_{v-disoc.}}{\partial \mathbf{u}} = \sum_s \left[\frac{\partial \dot{\omega}_s}{\partial \mathbf{u}} \varepsilon_{ves} + \dot{\omega}_s c_{v,s}^v \frac{\partial T_{ve}}{\partial \mathbf{u}} \right] \quad (\text{B.40})$$

Esta página ha sido intencionalmente dejada en blanco.

BIBLIOGRAFÍA

- [1] *NIST Chemistry WebBook, NIST Standard Reference Database Number 69*. National Institute of Standards and Technology, 2005.
- [2] CMPH Web page. <http://cmph.sourceforge.net>, 2014.
- [3] M. Aftosmis, D. Gaitonde, and T. S. Tavares. Behavior of linear reconstruction techniques on unstructured meshes. *AIAA Journal*, 33:2038–2049, 1994.
- [4] N. D. Akey and A. Cross. Radio blackout alleviation and plasma diagnostic results from a 25,000 foot per second blunt-body reentry. NASA TN D-5615, 1970.
- [5] E. Akin. *Object Oriented Programming Via Fortran 90/95*. Cambridge University Press, 2003.
- [6] J. R. Amaladas and H. Kamath. Implicit and multigrid procedures for steady-state computations with upwind algorithms. *Computers & Fluids*, 28(2):187–212, 1999.
- [7] J. D. Anderson. *Hypersonic and High Temperature Gas Dynamics*. McGraw-Hill Book Co., 1989.
- [8] W. K. Anderson and D. L. Bonhaus. An implicit upwind algorithm for computing turbulent flows on unstructured grids. *Computers & Fluids*, 23(1):1–21, 1994.
- [9] J. P. Appleton and K. N. C. Bray. The conservation equations for a nonequilibrium plasma. *Journal of Fluid Mechanics*, 20(4):659–672, 1964.
- [10] B. F. Armaly and L. Sutton. Viscosity of multicomponent partially ionized gas mixtures. AIAA Paper 80-1495, 1980.

- [11] S. Balay, S. Abhyankar, M. F. Adams, J. Brown, P. Brune, K. Buschelman, V. Eijkhout, W. D. Gropp, D. Kaushik, M. G. Knepley, L. C. McInnes, K. Rupp, B. F. Smith, and H. Zhang. PETSc users manual. Technical Report ANL-95/11 - Revision 3.5, Argonne National Laboratory, 2014.
- [12] S. Balay, S. Abhyankar, M. F. Adams, J. Brown, P. Brune, K. Buschelman, V. Eijkhout, W. D. Gropp, D. Kaushik, M. G. Knepley, L. C. McInnes, K. Rupp, B. F. Smith, and H. Zhang. PETSc Web page, 2014. <http://www.mcs.anl.gov/petsc>.
- [13] S. Balay, W. D. Gropp, L. C. McInnes, and B. F. Smith. Efficient management of parallelism in object oriented numerical software libraries. In *Modern Software Tools in Scientific Computing*, pages 163–202. Birkhäuser Press, 1997.
- [14] W. Bangerth, R. Hartmann, and G. Kanschat. deal.II – a general purpose object oriented finite element library. *ACM Trans. Math. Softw.*, 33(4), 2007.
- [15] T. J. Barth. A 3-D upwind euler scheme solver for unstructured meshes. AIAA Paper 91-1578, 1991.
- [16] T. J. Barth and D. C. Jespersen. The design and application of upwind schemes on unstructured meshes. AIAA Paper 89-0366, 1989.
- [17] P. Bastian, M. Blatt, A. Dedner, C. Engwer, R. Klöfkorn, M. Ohlberger, and O. Sander. A generic grid interface for parallel and adaptive scientific computing. Part I: abstract framework. *Computing*, 82(2-3):103–119, 2008.
- [18] M. W. Beall and M. S. Shephard. A general topology-based mesh data structure. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 40(9):1573–1596, 1997.
- [19] G. Berti. A generic toolbox for the grid craftsman. In *Proceedings of the 17th GAMM-Seminar Leipzig*, pages 1–28, 2001.
- [20] A. Bhatia, S. Roy, and R. Gosse. 2-D hypersonic non-equilibrium flow simulation using r-p adaptive time-implicit discontinuous Galerkin method. AIAA Paper 2013-302, 2013.
- [21] A. Björck. *Numerical Methods for Least Squares Problems*. Society for Industrial and Applied Mathematics, 1996.
- [22] J. Blazek. *Computational Fluid Dynamics: Principles and Applications*. Elsevier Ltd., Second edition, 2005.

- [23] J. Blazek, S. Irmisch, and A. Haselbacher. Unstructured mixed-grid Navier-Stokes solver for turbomachinery applications. AIAA Paper 99-0664, 1999.
- [24] F. C. Botelho, R. Pagh, and N. Ziviani. Simple and space-efficient minimal perfect hash functions. In *Proceedings of the 10th International Workshop on Algorithms and Data Structures*, volume 4619, pages 139–150. Springer-Verlag, 2007.
- [25] A. Brodnik, S. Carlsson, E. Demaine, J. Munro, and R. Sedgewick. Resizable arrays in optimal time and space. In *Proceedings of the 6th International Workshop on Algorithms and Data Structures, WADS '99*, pages 37–48, 1999.
- [26] J. Burkardt. GEOMETRY, 2014. <http://people.sc.fsu.edu/~jburkardt>.
- [27] T. Bussing and E. Murman. Finite-volume method for the calculation of compressible chemically reacting flows. *AIAA Journal*, 26(9):1070–1078, 1988.
- [28] G. V. Candler. *The computation of weakly ionized hypersonic flows in thermochemical nonequilibrium*. PhD thesis, University of Stanford, 1989.
- [29] G. V. Candler, M. D. Barnhardt, T. W. Drayna, I. Nompelis, D. M. Peterson, and P. Subbareddy. Unstructured grid approaches for accurate aeroheating simulations. AIAA Paper 2007-3959, 2007.
- [30] G. V. Candler and R. W. MacCormack. The computation of hypersonic ionized flows in chemical and thermal nonequilibrium. AIAA Paper 88-0511, 1988.
- [31] G. V. Candler, D. J. Mavriplis, and L. Trevino. Current status and future prospects for the numerical simulation of hypersonic flows. AIAA Paper 2009-153, 2009.
- [32] W. Celes, G. H. Paulino, and R. Espinha. Efficient handling of implicit entities in reduced mesh representations. *Journal of Computing and Information Science in Engineering*, 5:348–359, 2005.
- [33] M. W. Chase, C. A. Davis, J. R. Downey, D. J. Frurip, R. A. McDonald, and A. N. Syverud. JANAF Thermochemical Tables, 3rd ed. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, 14, 1985.
- [34] W. J. Coirier. An adaptively-refined, cartesian, cell-based scheme for the Euler and Navier-Stokes equations. NASA TM-106754, 1994.

- [35] G. Compère, J. F. Remacle, J. Jansson, and J. Hoffman. A mesh adaptation framework for dealing with large deforming meshes. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 82:843–867, 2010.
- [36] M. S. Darwish and F. Moukalled. TVD schemes for unstructured grids. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 46(4):599–611, 2003.
- [37] H. Deconinck, P. L. Roe, and R. Struijs. A multidimensional generalization of Roe’s flux difference splitter for the Euler equations. *Computers & fluids*, 22(2):215–222, 1993.
- [38] V. K. Decyk, C. D. Norton, and B. K. Szymanski. How to express C++ concepts in Fortran 90. *Sci. Program.*, 6(4):363–390, 1997.
- [39] V. K. Decyk, C. D. Norton, and B. K. Szymanski. How to support inheritance and run-time polymorphism in Fortran 90. *Computer Physics Communications*, 115:9–17, 1998.
- [40] G. S. Deiwert and G. V. Candler. Three-dimensional supersonic and hypersonic flows including separation. AGARD Report 764, 1989.
- [41] B. Diskin and J. Thomas. Accuracy of gradient reconstructions on grids with high aspect ratio. NIA Report 2008-12, 2008.
- [42] M. Druguet, G. V. Candler, and I. Nompelis. Effect on numerics on Navier-Stokes computations of hypersonic double-cone flows. *AIAA Journal*, 43(3):616–623, 2005.
- [43] A. Dufrene, M. MacLean, R. A. Parker, T. Wadhams, and M. Holden. Characterization of the new LENS expansion tunnel facility. AIAA Paper 2010-1564, 2010.
- [44] S. Eberhardt and S. Imlay. Diagonal implicit scheme for computing flows with finite rate chemistry. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 6(2):208–216, 1992.
- [45] K. T. Edquist, A. A. Dyakonov, M. J. Wright, and C. Y. Tang. Aerothermodynamic design of the Mars science laboratory heatshield. AIAA Paper 2009-4075, 2009.
- [46] B. Einfeldt. On Godunov-type methods for gas dynamics. *Journal of Computational Physics*, 25:294–318, 1988.
- [47] G. Eitelberg. First results of calibration and use of the HEG. AIAA Paper 94-2525, 1994.

- [48] S. Elaskar, O. Falcinelli, J. Tamagno, and J. Saldía. Further applications of a scheme for reducing numerical viscosity: 3D hypersonic flow. *Journal of Physics. Conference Series*, 166, 2009.
- [49] O. Falcinelli, S. Elaskar, and J. Tamagno. Reducing the numerical viscosity in non-structured three-dimensional finite volumes computations. *AIAA Journal of Spacecraft and Rockets*, 45(2):406–408.
- [50] G. G. Karypis and V. Kumar. A parallel algorithm for multilevel graph partitioning and sparse matrix ordering. *J. Parallel Distrib. Comput.*, 48(1):71–95, 1998.
- [51] E. Gamma, R. Helm, R. Johnson, and J. Vlissides. *Design Patterns: Elements of Reusable Object-oriented Software*. Addison-Wesley Longman Publishing Co., Inc., 1995.
- [52] R. V. Garimella. Mesh data structure selection for mesh generation and FEA applications. *International Journal of Numerical Methods in Engineering*, 55(4):451–478, 2002.
- [53] D. Gaston, C. Newman, G. Hansen, and D. L.-Grandié. MOOSE: A parallel computational framework for coupled systems of nonlinear equations. *Nuclear Engineering and Design*, 239(10):1768 – 1778, 2009.
- [54] D. Giordano. Impact of the Born-Oppenheimer approximation on aerothermodynamics. *AIAA Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 21(3):647–657, 2007.
- [55] P. Gnoffo. An upwind-biased, point-implicit relaxation algorithm for viscous, compressible perfect-gas flows. NASA STI/Recon Technical Report N, 1990.
- [56] P. Gnoffo, R. Gupta, and J. Shinn. Conservation equations and physical models for hypersonic air flows in thermal and chemical nonequilibrium. NASA TP-2867, 1989.
- [57] P. Gnoffo and J. A. White. Computational aerothermodynamic simulation issues on unstructured grids. AIAA Paper 2004-2371, 2004.
- [58] M. T. Goodrich and G. J. Kloss. Tiered vectors: efficient dynamic arrays for rank-based sequences. In *Algorithms and Data Structures*, pages 205–216. Springer, 1999.
- [59] S. Gordon and J. B. McBride. Computer program for calculation of complex equilibrium compositions and applications. Part I : Analysis. NASA RP-1311, 1994.

- [60] W. L. Grantham. Flight results of a 25000-foot-per-second reentry experiment using microwave reflectometers to measure plasma electron density and standoff distance. NASA TN-D 6062, 1970.
- [61] F. Grasso and G. Capano. Modeling of ionizing hypersonic flows in nonequilibrium. *Journal of Spacecraft and Rockets*, 32(2):217–224, 1995.
- [62] W. D. Gropp, D. K. Kaushik, D. E. Keyes, and B. F. Smith. High-performance parallel implicit CFD. *Parallel Computing*, 27(4):337–362, 2001.
- [63] B. Grossman and P. Cinnella. Flux-split algorithms for flows with non-equilibrium chemistry and vibrational relaxation. *Journal of Computational Physics*, 88(1):131–168, 1990.
- [64] B. Grossman and R. W. Walters. Analysis of flux-split algorithms for Euler’s equations with real gases. *AIAA Journal*, pages 524–531, 1987.
- [65] B. Grünbaum. *Convex Polytopes*, volume 221 of *Graduate Text in Mathematics*. Springer, second edition, 2003.
- [66] R. N. Gupta, J. M. Yos, R. A. Thompson, and K. Lee. A review of reaction rates and thermodynamic and transport properties for an 11-species air model for chemical and thermal nonequilibrium calculations to 30000 K. NASA RP-1232, 1990.
- [67] L. V. Gurvich, I. V. Veyts, and C. B. Alcock. *Thermodynamic Properties of Individual Substances. Pts. 1-2*, volume 1. Hemisphere Publishing Corp., fourth edition, 1989.
- [68] A. Harten. On a class of high resolution total-variation-stable finite-difference schemes. *Journal of Computational Physics*, 49:357–393, 1983.
- [69] A. Harten and J. M. Hyman. Self adjusting grid methods for one-dimensional hyperbolic conservation laws. *Journal of Computational Physics*, 50:235–269, 1983.
- [70] A. Harten and P. D. Lax. Uniformly high-order accurate nonoscillatory schemes I. *SIAM Journal of Numerical Analysis*, 24(2):279–309, 1987.
- [71] A. Haselbacher and J. Blazek. Accurate and efficient discretization of navier-stokes equations on mixed grids. *AIAA Journal*, 38(11):2094–2102, 2000.

- [72] B. R. Hollis and J. N. Perkins. High-enthalpy aerothermodynamics of a Mars entry vehicle. Part 1: experimental results. *Journal of Spacecraft and Rockets*, 34(4):449–456, 1997.
- [73] B. R. Hollis and J. N. Perkins. High-enthalpy aerothermodynamics of a Mars entry vehicle. Part 2: computational results. *Journal of Spacecraft and Rockets*, 34(4):457–463, 1997.
- [74] W. L. Jones and A. E. Cross. Electrostatic probe measurements of plasma parameters for two reentry flight experiments at 25.000 feet per second. NASA TN D-6617, 1972.
- [75] E. Josyula and W. F. Bailey. Governing equations for weakly ionized plasma flow-fields of aerospace vehicles. *Journal of Spacecraft and Rockets*, 40(6), 2003.
- [76] S. Karl, J. M. Schramm, and K. Hannemann. High enthalpy cylinder flow in HEG: A basis for CFD validation. AIAA 2003-4252, 2003.
- [77] M. P. Kessler and A. M. Awruch. Analysis of hypersonic flows using finite elements with taylor-galerkin scheme. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 44(12):1355–1376, 2004.
- [78] J. Kestin and J. R. Dorfman. *A Course in Statistical Thermodynamics*. Academic Press, 1976.
- [79] K. H. Kim, C. Kim, and O. Rho. Methods for the accurate computations of hypersonic flows: I. AUSMPW+ scheme. *J. Comput. Phys.*, 174(1):38–80, 2001.
- [80] K. H. Kim, J. H. Lee, and O. H. Rho. An improvement of AUSM schemes by introducing the pressure-based weight functions. *Computer & Fluids*, 27(3):311–346, 1998.
- [81] B. S. Kirk and G. Carey. Validation studies of fully implicit, parallel finite element simulations of laminar hypersonic flows. *AIAA Journal*, 48(6):1025–1036, 2010.
- [82] B. S. Kirk, J. W. Peterson, R. H. Stogner, and G. F. Carey. libMesh: A C++ Library for Parallel Adaptive Mesh Refinement/Coarsening Simulations. *Engineering with Computers*, 22(3–4):237–254, 2006.
- [83] K. Kitamura, E. Shima, Y. Nakamura, and P. L. Roe. Evaluation of Euler fluxes for hypersonic heating computations. *AIAA Journal*, 48(4):763–776, 2010.

- [84] H. F. O. Knab and S. Jonas. Multiple temperature description of reaction rates constant with regard to consistent chemical vibrational coupling. AIAA Paper 92-2947, 1992.
- [85] D. A. Knoll and D. E. Keyes. Jacobian-free Newton-Krylov methods: a survey of approaches and applications. *Journal of Computational Physics*, 193(2):357–397, 2004.
- [86] D. E. Knuth. *The Art of Computer Programming, Volume 1 (3rd Ed.): Fundamental Algorithms*. Addison Wesley Longman Publishing Co., Inc., 1997.
- [87] D. B. Landrum and G. V. Candler. Vibration-dissociation coupling in nonequilibrium flows. *Journal of thermophysics and heat transfer*, 6(4):643–649, 1992.
- [88] A. Lani. *An object oriented and high performance platform for aerothermodynamics simulation*. PhD thesis, Université Libre de Bruxelles, 2008.
- [89] A. Lani, T. Quintino, D. Kimpe, H. Deconinck, S. Vandewalle, and S. Poedts. The COOLFluid framework: design solutions for high performance object oriented scientific computing software. In *Computational Science-ICCS 2005*, pages 279–286. Springer, 2005.
- [90] C. Lawson and R. Hanson. *Solving Least Squares Problems*. Prentice-Hall, 1974.
- [91] J. H. Lee. Basic governing equations for the flight regimes of aeroassisted orbital transfer vehicles. *Thermal Design of Aeroassisted Orbital Transfer*, 96:3–53, 1985.
- [92] M. Liou. A sequel to AUSM, part II: AUSM+ up for all speeds. *Journal of Computational Physics*, 214(1):137–170, 2006.
- [93] M. Liou and C. J. S. Jr. A new flux splitting scheme. *Journal of Computational Physics.*, 107(1):23–39, 1993.
- [94] M.-S. Liou, B. V. Leer, and J.-S. Shuen. Splitting of inviscid fluxes for real gases. *Journal of Computational Physics*, 87:1–24, 1990.
- [95] Y. Liu and M. Vinokur. Upwind algorithms for general thermo-chemical nonequilibrium flows. AIAA Paper 89-0201, 1989.
- [96] M. MacLean and T. White. Implementation of generalized minimum residual krylov subspace method for chemically reacting flows. AIAA Paper 2012-0441, 2012.

- [97] P. Marrone and C. E. Treanor. Chemical relaxation with preferential dissociation from excited vibrational levels. *Physics of Fluids*, 6:1215–1221, 1963.
- [98] S. Mathur and J. Murthy. A pressure-based method for unstructured meshes. *Numerical Heat Transfer Part B*, 31(2), 1997.
- [99] D. J. Mavriplis. Three-dimensional multigrid Reynolds-averaged Navier-Stokes solvers for unstructured meshes. *AIAA Journal*, 33(3):445–453, 1990.
- [100] D. J. Mavriplis. Unstructured mesh discretizations and solvers for computational aerodynamics. *AIAA Paper 2007-3955*, 2007.
- [101] D. J. Mavriplis. Revisiting the least-squares procedure for gradient reconstruction on unstructured meshes. *AIAA Paper 2003-3986*, 2008.
- [102] J. Mena, R. Pepe, A. Lani, and H. Deconinck. Assessment of residual distribution method heat flux prediction capabilities: Application to atmospheric entry problems. *AIAA Paper 2014-1391*, 2014.
- [103] M. Metcalf, J. Reid, and M. Cohen. *Modern Fortran Explained*. Oxford University Press, Inc., 4th edition, 2011.
- [104] R. C. Millikan and D. R. White. Systematics of vibrational relaxation. *Journal of Chemical Physics*, (39):3209–3213, 1963.
- [105] M. Liou. A sequel to AUSM: AUSM+. *Journal of Computational Physics*, 129(2):364–382, 1996.
- [106] J. N. Moss and A. L. Simmonds. Galileo probe forebody flowfield predictions during Jupiter entry. *AIAA Paper 82-874*, 1982.
- [107] S. Muzaferija and D. Gosman. Finite-volume CFD procedure and adaptive error control strategy for grids of arbitrary topology. *Journal of Computational Physics*, 138:766–787, 1997.
- [108] S. Nagdewe, G. Shevare, and H.-D. Kim. Study on the numerical schemes for hypersonic flow simulation. *Shock Waves*, 19(5):433–442, 2009.
- [109] J. Nieplocha, B. Palmer, V. Tipparaju, M. Krishnan, H. Trease, and E. Apra. Advances, applications and performance of the Global Arrays shared memory programming toolkit. *International Journal of High Performance Computing Applications*, 20(2):203–231.

- [110] J. Nieplocha, V. Tipparaju, M. Krishnan, and D. Panda. High performance remote memory access communications: the ARMCI approach. *International Journal of High Performance Computing and Applications*, 20(2):233–253, 2006.
- [111] I. Nompelis, J. D. Bender, and G. V. Candler. Implementation and comparisons of parallel implicit solvers for hypersonic flow computations on unstructured meshes. AIAA Paper 2011-3547, 2011.
- [112] I. Nompelis, T. W. Drayna, and G. V. Candler. A parallel unstructured implicit solver for hypersonic reacting flow simulation. AIAA Paper 2005-4867, 2005.
- [113] S. Northrup and C. P. Groth. Parallel implicit adaptive mesh refinement for unsteady fully-compressible reactive flows. AIAA Paper 2013-2433.
- [114] C. Norton, B. K. Szymanski, K. Boleslaw, and V. K. Decyk. Object-oriented parallel computation for plasma simulation. *Commun. ACM*, 38(10):88–100, 1995.
- [115] R. W. Numrich and J. Reid. Co-array fortran for parallel programming. *SIGPLAN Fortran Forum*, 17(2):1–31, 1998.
- [116] F. Olawsky, F. Infed, and M. Auweter-Kurtz. Preconditioned Newton-method for computing supersonic and hypersonic nonequilibrium flows. *Journal of Spacecraft and Rockets*, 41(6):907–914, 2004.
- [117] J. Olejniczak and G. Candler. Vibrational energy conservation with vibration-dissociation coupling: General theory and numerical studies. *Physics of Fluids*, 7(7):1764–1774, 1995.
- [118] D. Olynick, Y.-K. Chen, and M. E. Tauber. Aerothermodynamics of the Stardust sample return capsule. *Journal of Spacecraft and Rockets*, 36(3):442–462, 1999.
- [119] S. Osher. Riemann solvers, the entropy condition, and difference approximations. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 21(2):217–235, 1984.
- [120] S. Osher and S. Chakravarthy. Upwind schemes and boundary conditions with applications to euler equations in general geometries. *Journal of Computational Physics*, 50:447–481, 1983.
- [121] G. Palmer. Explicit thermochemical nonequilibrium algorithm applied to compute three-dimensional aeroassist flight experiment flowfields. *Journal of Spacecraft and Rockets*, 27(5):545–553, 1990.

- [122] G. E. Palmer and M. J. Wright. Comparison of methods to compute high-temperature gas viscosity. *AIAA Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 17(2):232–239, 2003.
- [123] C. Park. Radiation enhancement by nonequilibrium in Earth’s atmosphere. *Journal of Spacecraft and Rockets*, 22(1):27–36, 1985.
- [124] C. Park. Assessment of two-temperature kinetic model for ionizing air. AIAA Paper 87-1574, 1987.
- [125] C. Park. Assessment of two-temperature kinetic model for ionizing air. *AIAA Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 3(3):233–244, 1989.
- [126] C. Park. *Nonequilibrium Hypersonic Aerothermodynamics*. John Wiley Jr. & Sons, 1989.
- [127] C. Park. Review of chemical-kinetic problems of future NASA mission: I: Earth entries. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 7:385–398, 1993.
- [128] C. Park, R. Jaffe, and H. Partridge. Chemical-kinetics parameters of hyperbolic earth entry. *AIAA Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 15(1):76–90, 2001.
- [129] D. Poirier, S. R. Allmaras, D. R. McCarthy, M. F. Smith, and F. Y. Enomoto. The CGNS system. AIAA Paper 98-3007, 1998.
- [130] J. J. Quirk. A contribution to the great riemann solver debate. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 18:555–574, 1994.
- [131] J. D. Ramshaw and C. H. Chang. Ambipolar diffusion in multicomponent plasmas. *Plasma Chemistry and Plasma Processing*, 11(3):395–482, 1991.
- [132] B. Reimann and v. Hannemann. Numerical investigation of double-cone and cylinder experiments in high enthalpy flows using the DLR TAU code. AIAA Paper 2010–1282, 2010.
- [133] J. Remacle and M. S. Shephard. An algorithm oriented mesh database. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 58(2), 2003.
- [134] P. L. Roe. Characteristic-based schemes for the Euler equations. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 18(1):337–365, 1986.

- [135] J. Rumbaugh, I. Jacobson, and G. Booch. *Unified Modeling Language Reference Manual, The (2nd Edition)*. Pearson Higher Education, 2004.
- [136] J. Saldia, S. Elaskar, and J. Tamagno. A scheme for inviscid compressible flow, considering a gas in thermo-chemical equilibrium. *International Journal of Computational Methods*, 12(03):1550015, 2015.
- [137] J. Saldía, S. Elaskar, and J. Tamagno. A numerical scheme for inviscid compressible flow, considering a gas in thermo-chemical equilibrium. In *Proceedings of the 5th International Workshop on Radiation of High Temperature Gases in Atmospheric Entry*. ESA SP 714, 2012.
- [138] K. Sanjeev. *Numerical Simulation of Chemically Reactive Hypersonic Flows*. PhD thesis, RWTH Aachen, 2005.
- [139] L. C. Scalabrin and I. D. Boyd. Numerical simulation of weakly ionized hypersonic flow for reentry configurations. AIAA Paper 2006-3773, 2006.
- [140] D. C. Schmidt and B. Haible. Users Guide to gperf 3.1. Free Software Foundation, 2011.
- [141] E. S. Seol and M. S. Shephard. Efficient distributed mesh data structure for parallel automated adaptive analysis. *Engineering with Computers*, 22(3-4):197–213, 2006.
- [142] E. Shima and K. Kitamura. Parameter-free simple low-dissipation ausm-family scheme for all speed. *AIAA Journal*, 49(8):1693–1709, 2011.
- [143] J. L. Steger and R. F. f. Flux vector splitting of the inviscid gasdynamic equations with applications to finite difference methods. *Journal of Computational Physics*, 40:263–293, 1981.
- [144] K. Stephani, D. Goldstein, and P. Varghese. Effects of rarefaction on hypersonic boundary layer flow over discrete surface roughness. AIAA Paper 2010-456, 2010.
- [145] K. Sutton and P. A. Gnoffo. Multi-component diffusion with application to computational aerothermodynamics. AIAA Paper 98-2575, 1998.
- [146] J. Tamagno, R. Bakos, M. Pulsonetti, and J. Erdos. Hypervelocity real gas capabilities of GASL’s expansion tube (HYPULSE) facility. AIAA Paper 90-1390, 1990.

- [147] J. Tamagno, S. Elaskar, and J. García. A numerical study of planar detonations. *Latin American Applied Research*, 42(2):161–166.
- [148] J. Tamagno, S. Elaskar, and G. Rios. Numerical simulation of time-dependent reacting flows. *Applied Numerical Mathematics*, 47:515–530, 2003.
- [149] T. J. Tautges, R. Meyers, K. Merkle, C. Stimpson, and C. Ernst. MOAB: a mesh-oriented database. SAND2004-1592, Sandia National Laboratories, 2004. Report.
- [150] The MPI Forum. MPI: A message passing interface, 1993.
- [151] UPC Consortium. UPC Language Specifications, v1.2. Tech report, Lawrence Berkeley National Lab, 2005.
- [152] B. van Leer. Towards the ultimate conservative difference scheme. V. a second order sequel to Godunov’s method. *Journal of Computational Physics*, 32:101–136, 1979.
- [153] B. van Leer. Flux-vector splitting for the Euler equations. ICASE82-30, NASA Langley Research Center, 1982.
- [154] V. Venkatakrishnan. Convergence to steady state solutions of the euler equations on unstructured grids with limiters. *Journal of Computational Physics*, 118:120–130, 1995.
- [155] V. Venkatakrishnan and D. J. Mavriplis. Implicit solvers for unstructured meshes. *Journal of Computational Physics*, 105(1):83–91, 1993.
- [156] J. L. Verant and P. Sagnier. Assessment of total conditions and flow thermochemical nature in the ONERA F4 high enthalpy wind tunnel. AIAA Paper 96-2239, 1996.
- [157] P. Vijayan and Y. Kallinderis. A 3D finite-volume scheme for the Euler equations on adaptive tetrahedral grids. *Journal of Computational Physics*, 113(2):249–267, 1994.
- [158] W. G. Vincenti and C. H. K. Jr. *Introduction to Physical Gas Dynamics*. Krieger Publishing, 1965.
- [159] M. Vinokur and J. L. Montagné. Generalized flux-vector splitting and Roe average for an equilibrium real gas. *Journal of Computational Physics*, 89:276–300, 1990.

- [160] L. Walpot, L. Caillault, R. C. Molina, C. O. Laux, and T. Blanquaert. Convective and radiative heat flux prediction of Huygens's entry on Titan. *Journal of thermophysics and heat transfer*, 20(4):663–671, 2006.
- [161] Z. J. Wang. A fast nested multi-grid viscous flow solver for adaptive cartesian/quad grids. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 33(5):657–680, 2000.
- [162] J. Weiss, J. P. Maruszewski, and W. A. Smith. Implicit solution of preconditioned Navier-Stokes equations using algebraic multigrid. *AIAA Journal*, 37(1):29–36, 1999.
- [163] H. G. Weller, G. Tabor, H. Jasak, and C. Fureby. A tensorial approach to computational continuum mechanics using object-oriented techniques. *Computers in Physics*, 12(6):620–631, 1998.
- [164] P. F. Wercinski. Mars aerocapture analysis for the MESUR/Mars-Pathfinder aeroshell in low L/D configurations. AIAA Paper 95-3495, 1995.
- [165] C. R. Wilke. A viscosity equation for gas mixtures. *Journal of Chemical Physics*, 18(4):517–519, 1950.
- [166] R. Wirfs-Brock, B. Wilkerson, and L. Wiener. *Designing Object-oriented Software*. Prentice-Hall, Inc., 1990.
- [167] M. J. Wright, D. Bose, and G. V. Candler. Data-parallel line relaxation method for the Navier-Stokes equations. *AIAA Journal*, 36(9):1603–1609, 1998.
- [168] H. C. Yee. Upwind and symmetric shock-capturing schemes. NASA TM-89464, 1987.
- [169] J. M. Yos. Approximate equations for the viscosity and translational thermal conductivity of gas mixtures. Technical Report AVSSD-0112-67-RM, Avco Missiles, Space and Electronics Group, Missile Systems Div., 1967.
- [170] S. Yu. Convenient method to convert two-dimensional CFD codes into axisymmetric ones. *Journal of Propulsion and Power*, 9(3):493–495, 1993.