

**SIMULACION NUMERICA DE FLUJOS DE
ALTA ENTALPIA NO VISCOSOS
CONSIDERANDO GAS EN EQUILIBRIO
TERMOQUIMICO**

Juan Pablo Saldía

Autor

Dr. Sergio Elaskar

Director

Dr. José Tamagno

Co-director

Tesis presentada como requisito parcial para la obtención del grado de
Magíster en Ciencias de la Ingeniería. Mención Aeroespacial.

Universidad Nacional de Córdoba

Instituto Universitario Aeronáutico

Agosto de 2012

Resumen

En la presente tesis se implementa el esquema *Total Variation Diminishing* (TVD) introducido por Harten y generalizado por Yee, para la obtención de la solución numérica de las ecuaciones de Euler unidimensionales y bidimensionales, considerando que el gas se encuentra en equilibrio termoquímico. En el contexto del esquema de Harten Yee se ha implementado una metodología adaptiva de introducción de las funciones limitadoras en cada onda del problema local de Riemann. Esta técnica introduce la función limitadora conocida como *superbee* en las familias de ondas linealmente degeneradas únicamente en las regiones del dominio donde la intensidad de éstas es mayor a las ondas del campo genuinamente no lineal, bajo un criterio de comparación. En caso contrario se utiliza la función limitadora *minmod* en todas las ondas. De esta manera se busca mejorar la resolución numérica de discontinuidades de contacto evitando la tendencia a la aparición de oscilaciones no físicas y pérdida de robustez a que dan lugar generalmente la utilización de funciones limitadoras compresivas.

Las propiedades en el equilibrio químico del gas se obtienen mediante un algoritmo de minimización de la energía libre de Gibbs. Debido al alto costo computacional que representa el cálculo directo del equilibrio químico en el contexto de un esquema fluidodinámico, se utiliza un proceso de interpolación de los valores de las propiedades termodinámicas previamente almacenados en una base de datos.

Se presentan resultados en problemas de Riemann unidimensionales con condiciones de alta entalpía especialmente diseñados para gases en equilibrio químico, en los cuales a su vez se comparan la técnica adaptiva con otras dos variantes del esquema TVD de Harten Yee: la primera, que utiliza la función limitadora *minmod* en todas las ondas y la segunda que utiliza la función limitadora *superbee* en las ondas linealmente degeneradas en todo el dominio. Utilizando las mismas condiciones que en los problemas unidimensionales se presentan resultados transitorios bidimensionales correspondientes a problemas de Riemann con simetría cilíndrica. Finalmente, el esquema desarrollado es aplicado para la solución del flujo estacionario bidimensional en régimen hipersónico sobre configuraciones de interés aeroespacial: cuerpos romos. En todos los casos mencionados se discuten y analizan las diferencias existentes entre los resultados obtenidos mediante las tres variantes de introducción de funciones limitadoras en el esquema de Harten Yee mencionadas.

INDICE GENERAL

LISTA DE FIGURAS	v
LISTA DE TABLAS	vii
1. INTRODUCCION	1
1.1. Breve reseña de esquemas numéricos aplicados a las ecuaciones de Euler .	4
1.2. Organización de la tesis	6
BIBLIOGRAFIA	7
2. SISTEMAS DE ECUACIONES HIPERBOLICOS	11
2.1. Leyes de conservación	11
2.2. Ondas de expansión	13
2.3. Soluciones discontinuas	16
2.3.1. Ondas de choque	19
2.3.2. Discontinuidades de contacto	19
2.4. El problema de Riemann	20
BIBLIOGRAFIA	21
3. ECUACIONES DE EULER	25
3.1. Sistema de ecuaciones	25
3.1.1. Consideraciones termodinámicas	26
3.1.2. Hiperbolicidad	28
3.2. Ondas de expansión	31
3.3. Soluciones discontinuas	32
3.3.1. Condiciones de Rankine–Hugoniot	32
3.3.2. Ondas de choque	33
3.3.3. Discontinuidades de contacto	35

3.4. Problema de Riemann	35
BIBLIOGRAFIA	38
4. EQUILIBRIO QUIMICO	41
4.1. Condiciones de equilibrio termodinámico	41
4.2. Cálculo de las condiciones de equilibrio químico	45
4.2.1. Formulación no estequiométrica	45
4.2.2. Expresión para el potencial químico	46
4.3. Solución numérica del equilibrio químico. El programa CEA2	48
4.3.1. Implementación computacional	49
4.3.1.1. Obtención de la base de datos	49
4.3.1.2. Interpolación	50
4.3.1.3. Resultados	51
BIBLIOGRAFIA	54
5. ESQUEMA NUMERICO	57
5.1. Consideraciones preliminares	57
5.2. Esquema TVD de Harten	61
5.2.1. Condición de entropía	65
5.3. Extensión a sistemas	66
5.3.1. Estado promedio de Roe generalizado	68
5.4. Extensión a las ecuaciones de Euler bidimensionales	71
5.4.1. Integración temporal	75
5.4.2. Condiciones de contorno	76
5.4.2.1. Contorno sólido	76
5.4.2.2. Contorno abierto	78
5.4.2.3. Condición de simetría	79
BIBLIOGRAFIA	80
6. RESULTADOS	85
6.1. Resultados unidimensionales	86
6.1.1. Casos de prueba	86
6.1.2. Resultados obtenidos	87
6.1.2.1. Caso de prueba A	88
6.1.2.2. Caso de prueba B	88
6.1.2.3. Caso de prueba C	89

6.1.2.4.	Caso de prueba D	89
6.1.2.5.	Caso de prueba E	89
6.1.3.	Discusión general	89
6.2.	Resultados bidimensionales	96
6.2.1.	Problemas de Riemann con simetría cilíndrica	96
6.2.1.1.	Resultados obtenidos	99
6.2.1.2.	Caso de prueba A	99
6.2.1.3.	Caso de prueba B	99
6.2.1.4.	Caso de prueba C	100
6.2.1.5.	Caso de prueba D	100
6.3.	Flujo bidimensional estacionario hipersónico sobre cuerpos romos	105
6.3.1.	Descripción de los casos resueltos	106
6.3.1.1.	Definición geométrica	106
6.3.1.2.	Discretización del dominio	107
6.3.1.3.	Condiciones de borde	107
6.3.1.4.	Condiciones iniciales e integración temporal	109
6.3.1.5.	Corrector de entropía	110
6.3.2.	Resultados obtenidos. Caso I. Altura: 20 km. Mach: 25	111
6.3.3.	Resultados obtenidos. Caso II. Altura: 40 km. Mach: 25	113
6.3.4.	Discusión general	114
	BIBLIOGRAFIA	132
7.	CONCLUSIONES	135
7.1.	Conclusiones del presente trabajo	135
7.2.	Trabajo futuro	137
	BIBLIOGRAFIA	138

LISTA DE FIGURAS

2.1. Esquema de una superficie de discontinuidad.	17
2.2. Esquema de ondas del problema de Riemann.	22
3.1. Intersección de ondas en el problema de Riemann.	36
4.1. Distribución acumulada del error de la presión.	52
4.2. Distribución acumulada del error del coeficiente politrópico γ	53
5.1. Transformación de coordenadas del dominio físico al computacional.	72
5.2. Tipos de contornos abiertos.	78
6.6. Esquema del problema de Riemann con simetría cilíndrica.	96
6.7. Problema de Riemann con simetría cilíndrica. Condiciones de contorno.	97
6.12. Problema del cuerpo romo.	105
6.13. Problema del cuerpo romo. Definición del dominio físico.	107
6.14. Problema del cuerpo romo. Discretización utilizada.	108
6.15. Problema del cuerpo romo. Condiciones de contorno.	109
6.16. Líneas de contorno. Densidad. Altura: 20 Km. Mach: 15.	115
6.17. Líneas de contorno. Presión. Altura: 20 Km. Mach: 15.	115
6.18. Líneas de contorno. Temperatura. Altura: 20 Km. Mach: 15.	116
6.19. Líneas de contorno. Mach. Altura: 20 Km. Mach: 15.	116
6.20. Líneas de contorno. Composición química. Altura: 20 Km. Mach: 15.	117
6.21. Distribución de densidad. Altura: 20 Km. Mach: 15	118
6.22. Distribución de presión. Altura: 20 Km. Mach: 15	118
6.23. Distribución de temperatura. Altura: 20 Km. Mach: 15	119
6.24. Distribución de Mach. Altura: 20 Km. Mach: 15	119
6.25. Distribución de densidad. Altura: 20 Km. Mach: 15	120

6.26. Distribución de presión. Altura: 20 Km. Mach: 15	120
6.27. Distribución de temperatura. Altura: 20 Km. Mach: 15	121
6.28. Convergencia de malla. Presión. Altura: 20 Km. Mach: 15.	122
6.29. Convergencia de malla. Temperatura. Altura: 20 Km. Mach: 15.	122
6.30. Norma L_2 del residuo. Altura: 20 Km. Mach: 15. Malla: 35×25	123
6.31. Norma L_2 del residuo. Altura: 20 Km. Mach: 15. Malla: 70×50	123
6.32. Líneas de contorno. Densidad. Altura: 40 Km. Mach: 25.	124
6.33. Líneas de contorno. Presión. Altura: 40 Km. Mach: 25.	124
6.34. Líneas de contorno. Temperatura. Altura: 40 Km. Mach: 25.	125
6.35. Líneas de contorno. Mach. Altura: 40 Km. Mach: 25.	125
6.36. Líneas de contorno. Composición química. Altura: 40 Km. Mach: 25. . .	126
6.37. Distribución de densidad. Altura: 40 Km. Mach: 25	127
6.38. Distribución de presión. Altura: 40 Km. Mach: 25	127
6.39. Distribución de temperatura. Altura: 40 Km. Mach: 25	128
6.40. Distribución de Mach. Altura: 40 Km. Mach: 25	128
6.41. Distribución de densidad. Altura: 40 Km. Mach: 25	129
6.42. Distribución de presión. Altura: 40 Km. Mach: 25	129
6.43. Distribución de temperatura. Altura: 40 Km. Mach: 25	130
6.44. Norma L_2 del residuo. Altura: 40 Km. Mach: 25. Malla: 35×25	131
6.45. Norma L_2 del residuo. Altura: 40 Km. Mach: 25. Malla: 70×50	131

LISTA DE TABLAS

4.1. Condiciones de espontaneidad y equilibrio	43
4.2. Procedimiento de interpolación. Parámetros de las bases de datos.	52
4.3. Tiempo computacional requerido por el proceso de interpolación	53
5.1. Tratamiento de las variables primitivas en contornos abiertos.	79
6.1. Problema de Riemann 1D. Condiciones iniciales.	86
6.2. Problemas de Riemann con simetría cilíndrica. Condiciones iniciales.	97
6.3. Problema del cuerpo romo. Parámetros geométricos del dominio físico.	107
6.4. Problema del cuerpo romo. Condiciones iniciales de cada caso.	110
6.5. Errores en el cálculo de la temperatura. Altura: 20 km. Mach: 15.	121
6.6. Errores en el cálculo de la temperatura. Altura: 40 km. Mach: 25.	130

El estudio del flujo de gases sobre cuerpos a velocidades altamente superiores a la velocidad del sonido, presenta grandes desafíos debido a la presencia de fenómenos físicos que se manifiestan en una amplia diversidad de formas: fuertes ondas de choque, cambios en la composición química e ionización del gas, crecimiento de la capa límite, turbulencia y radiación térmica, entre otros. Estos fenómenos interactúan fuertemente entre sí, aumentando la complejidad del problema. Debido a las particularidades mencionadas es que este tipo de flujos se denominan bajo la categoría especial de *flujos hipersónicos* o *de alta entalpía*¹, para diferenciarlos de los flujos cuya velocidad es levemente superior a la del sonido, e.g., *flujos supersónicos*. No existe sin embargo, un límite preciso entre ambas categorías, aunque la experiencia ha asumido que un flujo puede comenzar a considerarse hipersónico cuando su número de Mach² es aproximadamente mayor a 5 [1].

Todo vehículo espacial que reingresa en la atmósfera terrestre experimenta en su trayectoria regiones donde el flujo incidente es hipersónico. La capacidad de predecir en forma precisa tanto la transferencia de calor como las fuerzas aerodinámicas sobre vehículos espaciales en este régimen de vuelo, es un aspecto crucial tanto en el diseño de sistemas de protección térmica, como en el de sistemas de control aerodinámicos eficientes. Este y otros desafíos son abordados por la disciplina conocida como *aerodinámica hipersónica* y constituyen una de las principales motivaciones para el estudio de este tipo de flujos.

Una característica notable del flujo hipersónico es la alta energía cinética involucrada y como ésta es transferida a los modos de energía térmica cuando el fluido encuentra

¹Los flujos de alta entalpía incluyen a los flujos compresibles a velocidades arbitrarias bajo condiciones de alta temperatura.

²Mach = $\frac{u}{c}$ donde u es la velocidad local del fluido y c es la velocidad del sonido

la superficie de un cuerpo, elevando abruptamente la temperatura sobre el mismo. Por ejemplo, la temperatura sobre la superficie del cohete Apollo a Mach 36 puede llegar a ser del orden de los 11000 K, que es aproximadamente dos veces la temperatura sobre la superficie del Sol [1]. A estas altas temperaturas ocurre la disociación e incluso ionización de las especies que componen el gas, provocando la modificación de sus propiedades termodinámicas. Si la velocidad de las partículas de fluido es tal que puede considerarse que ésta es despreciable en comparación a la velocidad que toman lugar las reacciones químicas entonces se dice que se asumen las hipótesis de *equilibrio termoquímico*. Por otra parte si la velocidad del fluido es comparable a las de las reacciones químicas, entonces se dice que el flujo se encuentra en *no equilibrio químico*. Estos fenómenos de cambios en la estructura química causados por la transferencia de energía a los modos de energías interna se denominan *efectos de alta temperatura*. La no inclusión de estos efectos en el cálculo de flujos hipersónicos, es decir cuando se mantienen las hipótesis de gas calórico perfecto, da lugar a una gran sobre estimación de la temperatura sobre la superficie de cuerpos [1].

Otra característica de los flujos hipersónicos es la así llamada *interacción viscosa*. Este fenómeno consiste básicamente en el aumento del espesor de la capa límite sobre el cuerpo, debido al aumento del coeficiente de viscosidad causado por las altas temperaturas presentes en la capa límite. Este mayor espesor cambia la forma que la región inviscida del flujo “ve” del cuerpo, la cual retroalimenta a su vez el crecimiento de la capa límite. Además, la onda de choque que se forma delante del cuerpo se encuentra más cerca del mismo en flujo hipersónico pudiendo ser la distancia de separación del orden del espesor de la capa límite, provocando por consiguiente una interacción entre la onda de choque y la capa límite que no se encuentra en flujos supersónicos. Es de notar que este fenómeno es de importancia crítica en la predicción correcta de las fuerzas aerodinámicas sobre cuerpos [1].

Otros fenómenos tales como los efectos de radiación térmica o de los efectos de gas rarificado [10] han ido aumentando su relativa importancia a medida que novedosos diseños y desafiantes trayectorias de vuelo son afrontados, tales como lo constituye por ejemplo el caso de la exploración a Marte [17].

Los fenómenos físicos hasta aquí descritos dan cuenta de la complejidad de la aerodinámica hipersónica. Debido a los grandes costos que presenta el diseño basado en pruebas experimentales e incluso la imposibilidad de realizar los mismos es que la disciplina de la dinámica de fluidos computacional ha cumplido y cumple un rol esencial en la predicción de flujos hipersónicos.

Las hipótesis físicas asumidas durante su desarrollo es una condición determinante para la capacidad de predicción y rango de aplicación de un esquema numérico. En una primera instancia, todo esquema de flujo compresible comienza con la resolución del sistema de ecuaciones de flujo invíscido, las ecuaciones de Euler, asumiendo un gas calórico perfecto. En la solución numérica precisa de este sistema se enfoca gran parte de la investigación en el desarrollo y prueba de nuevos algoritmos. Es ampliamente conocido que la capacidad de predecir en forma precisa el flujo invíscido es una condición indispensable para obtener soluciones confiables cuando son incluidos efectos viscosos, es decir cuando se considera el sistema de las ecuaciones de Navier Stokes debido a que generalmente se aplican a este último extensiones directas del esquema aplicado a flujo invíscido [20].

La inclusión de cambios en la composición química presenta a su vez otros desafíos numéricos. En el caso de considerar gas en equilibrio químico, gran parte de las técnicas desarrolladas en flujo invíscido deben ser apropiadamente generalizadas, ya que estas muchas veces asumen en su formulación un gas calórico perfecto [3, 7, 12, 14]. En ciertas regiones de la trayectoria de un vehículo espacial las condiciones son tales que la velocidad de las reacciones químicas es comparable a la velocidad del flujo por lo tanto deben introducirse las hipótesis de reacciones químicas en no equilibrio, o de tasa finita. En este caso deben adicionarse al sistema original ecuaciones correspondientes a la conservación de la masa de cada especie química, además de términos fuentes que tienen en cuenta la tasa de producción de las reacciones. Estos nuevos términos, y al igual que sucede con los términos viscosos, introducen nuevas escalas temporales en el flujo, de varios ordenes de magnitud menores que las escalas temporales del flujo invíscido, lo cual hace ineficientes de aplicar a los métodos de integración temporal explícitos, debiéndose recurrir a métodos implícitos que aumentan los requerimientos de capacidad computacional [16].

Dentro de este contexto, el objetivo principal de esta tesis es la implementación de un esquema numérico con el objetivo de resolver en forma robusta y precisa las ecuaciones de Euler unidimensionales y bidimensionales considerando que el gas se encuentra en equilibrio químico. Esta última hipótesis permite obtener predicciones más realistas del campo de movimiento sobre cuerpos en régimen hipersónico, particularmente en el cálculo de la temperatura sobre la superficie.

A continuación se presenta una breve exposición de los principales métodos utilizados en flujos compresibles invíscidos para luego introducir el esquema numérico que es utilizado en esta tesis.

1.1 Breve reseña de esquemas numéricos aplicados a las ecuaciones de Euler

En sistemas de ecuaciones hiperbólicos como el de Euler, la información física es transportada a través de las denominadas ondas características. Es de interés entonces que un método numérico aplicado a este tipo de sistemas posea algún mecanismo que capte esta dirección de propagación de la información. Este mecanismo es conocido con el nombre de “*upwinding*”. Otra característica deseable es la conservación, ya que asegura que no exista creación o destrucción de masa, momento y energía dentro del dominio considerado, de especial interés en la captura de discontinuidades. Una forma de obtener numéricamente ambas características es mediante la discretización en volúmenes finitos (FV). Esta técnica consiste en subdividir el dominio de interés en celdas que definen un volumen de control euleriano del fluido. En cada celda se plantea la forma integral de las leyes de conservación y la interacción del fluido entre celdas ocurre en los contornos de las mismas, a través del flujo numérico definido en estas interfaces. Es en la definición de este flujo numérico donde son introducidas las condiciones físicas del “*upwinding*”.

Uno de los métodos conservativos seminales cuyos principios sirvieron de inspiración para el desarrollo de una innumerable cantidad de posteriores técnicas, lo constituye el método de Godunov [6]. En éste, se resuelve en forma exacta el problema de Riemann² en la interface entre dos celdas, y luego la solución obtenida sobre la interface es utilizada para evaluar el flujo numérico en la misma y actualizar el estado en cada celda. Debido al alto costo computacional que representa la obtención de la solución exacta del problema de Riemann, han sido propuestas diferentes maneras de linealizar el problema y utilizar luego la solución del problema linealizado, en el conjunto de técnicas conocidas como “*Riemann solvers*” o también agrupados bajo la denominación de “*Flux Difference Splitting*” [4, 15, 18]. Entre los solvers de Riemann, uno de los más exitosos ha sido el solver de Riemann de Roe [18]. Esto se debe a que introduce una mínima cantidad de disipación numérica en la implementación del “*upwinding*” e incluso resuelve en forma exacta discontinuidades aisladas. Una de las desventajas de este solver es que captura expansiones transónicas como choques que violan la condición de entropía, debiendo utilizarse correctores de entropía “*entropy fix*” [9] para forzar la convergencia a la solución física. Otro tipo de técnicas que sólo mencionaremos y que no utilizan un solver de Riemann para obtener el flujo en la interface lo constituyen la familia de esquemas

²El problema de Riemann es el problema de dos estados de fluido separados por una interface, véase sección §2.4

“*Flux Corrected Transport*” [2] y las técnicas de “*Flux Vector Splitting*” [19] entre las más conocidas que han tenido aplicación en el cálculo de flujos hipersónicos [24].

Todos los esquemas hasta aquí mencionados se reducen a esquemas monótonos lineales cuando son aplicados a la ecuación de advección escalar y por lo tanto de acuerdo al teorema de Godunov [6] son a lo sumo de primer orden de precisión. Un problema clásico de los esquemas de segundo orden de precisión tales como la familia de esquemas de Lax-Wendroff [11] es que introducen oscilaciones no físicas en la cercanía de discontinuidades. Uno de los primeros estudios orientados a obtener segundo orden de precisión sin introducir oscilaciones lo constituye la serie de trabajos de van Leer [21, 22]. En este, el segundo orden es obtenido a partir de una reconstrucción lineal de las variables primitivas dentro de cada celda, que permite determinar los estados adyacentes a la interface entre celdas para luego obtener el flujo numérico por alguno de los métodos de primer orden conocidos. En la cercanía de discontinuidades se aplica una limitación a la reconstrucción lineal de forma de evitar la aparición de oscilaciones. Esta familia de esquemas se conoce como esquemas MUSCL [22] y en conjunto con los mencionados flujos de primer orden han sido extensivamente utilizados en el cálculo de flujo hipersónico [28].

En 1983, Harten [8] , introduce una nueva familia de esquemas de segundo orden conocidos como de Variación Total Disminuída (TVD). Este tipo de esquemas imita en forma discreta la propiedad de disminución de la variación total inherente de la ecuación de advección escalar. De esta forma se asegura que el esquema no introduce oscilaciones espurias en la solución. El segundo orden de precisión es obtenido a través de la introducción de un término no lineal de segundo orden que se adiciona al flujo original. Este término no lineal se conoce como función limitadora del flujo. La extensión del esquema a sistemas no lineales hiperbólicos se consigue a través de las mismas técnicas de linealización utilizadas en los solvers de Riemann. En una serie posterior de trabajos Yee [25, 26, 27, 28, 29] extiende y generaliza el esquema de Harten para incluir una familia más amplia de funciones limitadoras, y muestra la robustez y precisión del método en la predicción numérica de flujos en régimen hipersónico.

En la presente tesis se utiliza el esquema TVD de Harten, generalizado por Yee, que denominamos como esquema de Harten-Yee para la obtención de la solución numérica de las ecuaciones de Euler 1D y 2D considerando que el gas se encuentra en equilibrio químico. La linealización del esquema se realiza mediante el estado promedio de Roe [18] generalizado para tratar gases con una ecuación de estado arbitraria por Vinokur [23]. Dentro del contexto del esquema de Harten-Yee es conocido que funciones limitadoras

que introducen mayor viscosidad numérica tal como la llamada función *minmod* [8], si bien proveen robustez y precisión en la captura de ondas de choque, disminuyen la precisión en la captura de discontinuidades de contacto. Por otro lado, funciones altamente compresivas que introducen menor viscosidad numérica, tal como la denominada función *superbee* [18], aumentan la precisión en discontinuidades de contacto, presentando la desventaja de introducir oscilaciones y pérdida de robustez, además de disminuir la tasa de convergencia en soluciones estacionarias. Estas funciones limitadoras pueden ser aplicadas en forma independiente a cada una de las ondas características que resultan de la linealización local del problema de Riemann. En el caso de las ecuaciones de Euler bidimensionales existen un total de cuatro ondas característica. De estas, dos ondas pertenecen a familias de ondas genuinamente no lineales, asociadas a ondas de choque y expansiones y las restantes a ondas linealmente degeneradas asociadas a discontinuidades de contacto. En la técnica de aplicación adaptativa de funciones limitadoras propuesta por investigadores de la UNC [5] se utiliza la función compresiva *superbee* en el campo de ondas linealmente degenerado sólo cuando la intensidad de estas ondas es mayor a las ondas genuinamente no lineales, bajo un criterio de comparación. En caso contrario se utiliza la función *minmod* en todas las ondas. Esta técnica ha mostrado aumentar la precisión de discontinuidades de contacto sin disminuir la robustez del esquema en flujos supersónicos e hipersónicos en el que se han asumido las hipótesis de gas calórico perfecto.

Un objetivo particular de esta tesis extender la mencionada técnica al caso de gas en equilibrio químico. Es de interés además utilizar en esta oportunidad el esquema de Harten Yee en su formulación original sobre mallas estructuradas, en contraposición a la adaptación del esquema de Harten Yee multidimensional en volúmenes finitos sobre mallas no estructuradas propuesta en [5], de manera de que la nueva técnica pueda ser comparada en una forma más consistente.

1.2 Organización de la tesis

En el Capítulo 2 son introducidas las principales propiedades y definiciones pertinentes a sistemas hiperbólicos que son utilizadas extensivamente a lo largo de esta tesis, tales como por ejemplo ondas de choque, discontinuidades de contacto, ondas de expansión, condición de entropía, problema de Riemann, entre otras.

En el Capítulo 3 las propiedades de sistemas hiperbólicos descriptas en el Capítulo 2 son aplicadas al caso particular del sistema de ecuaciones de Euler. Además se busca

introducir la generalización de este sistema cuando la ecuación de estado del gas considerado es arbitraria, presentando las hipótesis que son asumidas sobre la ecuación de estado. Es común que dicha generalización no sea tratada en libros introductorios sobre la materia, en los cuales se asume usualmente un gas calórico perfecto.

En el Capítulo 4 se desarrollan el problema del cálculo de las propiedades termodinámicas en el equilibrio químico. Son tratadas primero las definiciones y la derivación de las ecuaciones, los algoritmos propuestos para su solución, y finalmente las técnicas utilizadas para su implementación computacional en el contexto de códigos de cálculo fluidodinámico.

En el Capítulo 5 se presenta el esquema numérico utilizado en esta tesis. Se introduce la definición de los esquemas TVD, para luego pasar a la derivación original del esquema de Harten. Se introduce posteriormente la generalización de Yee, y su extensión a sistemas hiperbólicos no lineales mediante la linealización local del problema de Riemann. Se brinda una descripción del estado promedio de Roe generalizado al caso de gases con una ecuación de estado arbitraria. Finalmente se explicita la extensión del esquema a multidimensiones en mallas estructuradas, y se discuten tópicos tales como la integración temporal, la implementación de condiciones de contorno y la obtención del paso de tiempo admisible, entre otros.

En el Capítulo 6 se presentan y discuten los resultados obtenidos. Primero se estudia el esquema aplicado a problemas unidimensionales. En particular, se presentan un total de cinco problemas de Riemann especialmente diseñados para observar efectos del gas en equilibrio químico [13], cuya solución numérica es comparada con soluciones exactas. Se compara a su vez la técnica de introducción adaptiva de funciones limitadoras con el esquema de Yee original. En una segunda parte se presentan los resultados obtenidos en casos bidimensionales. Se presentan resultados obtenidos para problemas de Riemann con simetría cilíndrica empleando las mismas condiciones iniciales utilizadas en los problemas unidimensionales. Finalmente se presentan resultados sobre configuraciones de interés aeroespacial. Estos corresponden al flujo estacionario hipersónico sobre “*blunt bodies*” a diferentes números de Mach y altura en la atmósfera terrestre. Se muestran las diferencias obtenidas en el cálculo cuando se considera gas calórico perfecto y cuando es considerado equilibrio químico. Se estudia además la influencia en los resultados de la introducción de las funciones limitadoras en forma adaptiva haciendo especial énfasis en la calidad de la solución obtenida y las propiedades de convergencia.

Finalmente, en el Capítulo 7 se presentan las conclusiones obtenidas a partir del trabajo desarrollado en esta tesis y se discuten las posibles líneas de trabajo futuro.

BIBLIOGRAFIA

- [1] ANDERSON, J. *Hypersonic and high temperature gas dynamics*, first ed. Reprint AIAA, 2000.
- [2] BORIS, B., AND BOOK, D. Flux corrected transport I SHASTA, a fluid transport algorithm that works. *Journal of Computational Physics* 11 (1973), 38–69.
- [3] COX, C., AND CINNELLA, P. General solution procedure for flows in local chemical equilibrium. *AIAA Journal* 32 (1994), 519–527.
- [4] EINFELDT, B. On Godunov-type methods for gas dynamics. *Journal of Computational Physics* 25 (1988), 294–318.
- [5] FALCINELLI, O., ELASKAR, S., AND TAMAGNO, J. Reducing the numerical viscosity in non structured three-dimensional finite volumes computations. *AIAA Journal of Spacecrafts and Rockets* 42, 2 (2008), 406–408.
- [6] GODUNOV, S. K. A difference scheme for numerical solution of discontinuous solution of hydrodynamic equations. *Math. Sbornik* 47 (1959), 271–306.
- [7] GROSSMAN, B., AND WALTERS, R. W. Analysis of flux-split algorithms for Euler’s equations with real gases. *AIAA Journal* (1987), 524–531.
- [8] HARTEN, A. On a class of high resolution total-variation-stable finite-difference schemes. *Journal of Computational Physics* 49 (1983), 357–393.
- [9] HARTEN, A., AND HYMAN, J. M. Self adjusting grid methods for one-dimensional hyperbolic conservation laws. *Journal of Computational Physics* 50 (1983), 235–269.

- [10] IVANOV, M. S., AND GIMELSHEIN, S. F. Computational hypersonic rarefied flows. *Annual Reviews of Fluid Mechanics* 30 (1998), 469–505.
- [11] LAX, P. D., AND WENDROFF, B. Systems of conservation laws. *Communications On Pure And Applied Mathematics* 13 (1960), 217–237.
- [12] LIOU, M.-S., LEER, B. V., AND SHUEN, J.-S. Splitting of inviscid fluxes for real gases. *Journal of Computational Physics* 87 (1990), 1–24.
- [13] MONTAGNÉ, J. L., YEE, H. C., AND VINOKUR, M. Comparative study of high-resolution shock-capturing schemes for a real gas. *AIAA Journal* 27 (1989), 1332–1346.
- [14] MOTTURA, L., VIGEVANO, L., AND ZACCANTI, M. An evaluation of Roe’s scheme generalizations for equilibrium real gas flows. *Journal of Computational Physics* 138 (1997), 354–399.
- [15] OSHER, S. Riemann solvers, the entropy condition, and difference approximations. *SIAM Journal on Numerical Analysis* 21, 2 (1984), 217–235.
- [16] PALMER, G., AND VENKATAPATHY, E. Comparison of nonequilibrium solution algorithms applied to chemically stiff hypersonic flows. *AIAA Journal* 33, 7 (1997), 1211–1219.
- [17] REYNIER, P., SILVA, M. L. D., MARRAFFA, L., AND MAZOUÉ, F. Preliminary study of mars entry: application to the prediction of radiation. *Proceedings of the International Workshop on Radiation of High Temperature Gases in Atmospheric Entry. Part I and II* (2005).
- [18] ROE, P. L. Characteristic-based schemes for the Euler equations. *Annual Review of Fluid Mechanics* 18, 1 (1986), 337–365.
- [19] STEGER, J., AND WARMING, R. Flux vector splitting of the inviscid gas dynamics equations with applications to finite difference methods. *Journal of Computational Physics* 40 (1981), 263–293.
- [20] TORO, E. *Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics - A Practical Introduction*, third ed. Springer-Verlag, 2009.

- [21] VAN LEER, B. Towards the ultimate conservative difference scheme. II. Monotonicity and conservation combined in a second-order scheme. *Journal of Computational Physics* 14 (1974), 361–370.
- [22] VAN LEER, B. Towards the ultimate conservative difference scheme. V. a second order sequel to Godunov’s method. *Journal of Computational Physics* 32 (1979), 101–136.
- [23] VINOKUR, M., AND MONTAGNÉ, J. L. Generalized flux–vector splitting and roe average for an equilibrium real gas. *Journal of Computational Physics* 89 (1990), 276–300.
- [24] YAMAMOTO, S., NAGATOMO, H., AND DAIGUJI, H. An implicit-explicit flux vector splitting scheme for hypersonic thermochemical nonequilibrium flows. *Lecture Notes in Physics* 453 (1995), 314–319.
- [25] YEE, H. C. Numerical experiments with a symmetric high-resolution shock-capturing scheme. *NASA TM-88325* (1986).
- [26] YEE, H. C. Construction of explicit and implicit symmetric TVD schemes and their applications. *Journal of Computational Physics* 68 (1987), 151–179.
- [27] YEE, H. C. Upwind and symmetric shock–capturing schemes. *NASA TM-89464* (1987).
- [28] YEE, H. C., KLOPFER, G. H., AND MONTAGNÉ, J. L. High-resolution shock-capturing schemes for inviscid and viscous hypersonic flows. *Journal of Computational Physics* 88 (1990), 31–61.
- [29] YEE, H. C., WARMING, R. F., AND HARTEN, A. Implicit total variation diminishing (TVD) schemes for steady–state calculations. *NASA TM-84342* (1983).

SISTEMAS DE ECUACIONES HIPERBOLICOS

2.1 Leyes de conservación

Considérese un dominio abierto fijo $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ definido en un espacio d dimensional con contorno $\partial\Omega$. Sea $u(t, \mathbf{x})$ la densidad volumétrica de una magnitud $\hat{u}(t, \mathbf{x})$, que suponemos función del tiempo t y de la posición espacial $\mathbf{x} \in \Omega$. La ley de conservación de la magnitud $\hat{u}(t, \mathbf{x})$ contenida en Ω , expresa la tasa de cambio temporal de esa magnitud dentro del dominio y puede ser escrita como

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} u d\Omega = - \oint_{\partial\Omega} \mathbf{f} \cdot \mathbf{n} dS \quad (2.1)$$

donde $\mathbf{f} = [f_1, \dots, f_d]$ es el *flujo* de \hat{u} por unidad de superficie a través del contorno $\partial\Omega$ en las direcciones espaciales $\mathbf{x} = [x_1, \dots, x_d]$ respectivamente y donde $\mathbf{n} \in \mathbb{R}^d$ es el versor normal al contorno en la dirección saliente del dominio, de allí el signo $(-)$ en el lado derecho de (2.1).

Si las derivadas parciales de u y \mathbf{f} son continuas, la ley de conservación puede ser escrita en la *forma diferencial*

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{f} = 0 \quad (2.2)$$

donde $\nabla = \left[\frac{\partial}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial}{\partial x_d} \right]$ es el operador gradiente espacial.

Considérese ahora un sistema formado por m leyes de conservación, las cuales para cada magnitud \hat{u}_i pueden ser escritas como

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{f}^{(i)}(u_1, \dots, u_m) = 0, \quad i = 1, \dots, m$$

donde $\mathbf{f}^{(i)} = [f_1^{(i)}, \dots, f_d^{(i)}]$.

Este sistema de m leyes de conservación escrito en forma compacta resulta en:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{F}(\mathbf{u}) = \mathbf{0} \quad (2.3a)$$

donde

$$\mathbf{u} = \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_m \end{bmatrix}, \quad \mathbf{F}(\mathbf{u}) = [\mathbf{f}_1 \cdots \mathbf{f}_d], \quad \mathbf{f}_j = \begin{bmatrix} f_j^{(1)} \\ f_j^{(2)} \\ \vdots \\ f_j^{(m)} \end{bmatrix} \quad (2.3b)$$

\mathbf{u} se denomina *vector de variables conservativas* o bien *vector de estado*, y $\mathbf{f}_j = \mathbf{f}_j(\mathbf{u})$ es el *vector de flujo* en la dirección x_j del sistema. Se considera que el operador divergencia $\nabla \cdot$ aplicado a matrices actúa en forma independiente sobre cada una de las filas de la matriz.

Si ahora se utiliza la derivación en cadena de $\mathbf{F}(\mathbf{u})$ en (2.3a) se llega a la que se conoce como *forma cuasi lineal* del sistema de leyes de conservación:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \sum_{j=1}^d \mathbf{A}_j \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x_j} = \mathbf{0} \quad (2.4a)$$

donde $\mathbf{A}_j = \mathbf{A}_j(\mathbf{u}) \in \mathbb{R}^{m \times m}$ es la denominada *matriz jacobiana* correspondiente al vector de flujo \mathbf{f}_j y cuyos elementos se encuentran dados por:

$$\mathbf{A}_j = \frac{\partial \mathbf{f}_j}{\partial \mathbf{u}} = \begin{bmatrix} \partial f_j^{(1)} / \partial u_1 & \cdots & \partial f_j^{(1)} / \partial u_m \\ \partial f_j^{(2)} / \partial u_1 & \cdots & \partial f_j^{(2)} / \partial u_m \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ \partial f_j^{(m)} / \partial u_1 & \cdots & \partial f_j^{(m)} / \partial u_m \end{bmatrix} \quad (2.4b)$$

Definición 2.1. *El sistema de leyes de conservación (2.4) se denomina **hiperbólico** en la dirección de t en un dominio convexo $\mathfrak{F} \subset \mathbb{R}^m$ y en un dominio espacial abierto $\Omega \in \mathbb{R}^d$ si para cualquier $\mathbf{u} \in \mathfrak{F}$, $\mathbf{x} \in \Omega$, $\boldsymbol{\vartheta} = [\vartheta_1, \dots, \vartheta_d] \in \mathbb{R}^d$ fijos se cumple que el problema de valores propios:*

$$[\mathbf{A}_{\boldsymbol{\vartheta}}(\mathbf{u}) - \lambda] \cdot \mathbf{r} = \mathbf{0}, \quad \mathbf{A}_{\boldsymbol{\vartheta}}(\mathbf{u}) = \sum_{j=1}^d \vartheta_j \mathbf{A}_j(\mathbf{u}) \quad (2.5)$$

tiene m valores propios reales $\{\lambda_1(\boldsymbol{\vartheta}, \mathbf{u}) \leq \lambda_2(\boldsymbol{\vartheta}, \mathbf{u}) \leq \dots \leq \lambda_m(\boldsymbol{\vartheta}, \mathbf{u})\}$ llamadas **velocidades características** y un conjunto asociado de m vectores propios derechos linealmente independientes, $(\mathbf{r}_1(\boldsymbol{\vartheta}, \mathbf{u}), \dots, \mathbf{r}_m(\boldsymbol{\vartheta}, \mathbf{u}))$. Si las velocidades características son todas distintas entonces el sistema se denomina **estrictamente hiperbólico**.

Definición 2.2. Considere un sistema hiperbólico de la forma (2.4) con valores propios λ_i y vectores propios derechos asociados \mathbf{r}_i . Se dice que la velocidad característica λ_i define un **campo característico- λ_i** .

Asociadas a esta última definición se introducen las siguientes dos definiciones:

Definición 2.3. Un campo característico- λ_i se dice que es **linealmente degenerado** si se cumple,

$$\nabla_{\mathbf{u}} \lambda_i \cdot \mathbf{r}_i = 0, \quad \forall \mathbf{u} \in \mathfrak{F} \quad (2.6)$$

Definición 2.4. Un campo característico- λ_i se dice que es **genuinamente no lineal**, si existe una normalización de \mathbf{r}_i tal que se cumple

$$\nabla_{\mathbf{u}} \lambda_i \cdot \mathbf{r}_i = 1, \quad \forall \mathbf{u} \in \mathfrak{F} \quad (2.7)$$

donde $\nabla_{\mathbf{u}}$ es el operador gradiente en el *espacio de fases*, $\nabla_{\mathbf{u}} = \left[\frac{\partial}{\partial u_1}, \frac{\partial}{\partial u_2}, \dots, \frac{\partial}{\partial u_m} \right]$

Se comienza ahora la exposición de las propiedades de las soluciones de sistemas hiperbólicos introduciendo las soluciones suaves o clásicas, es decir aquellas soluciones suaves y continuas que satisfacen las formas diferenciales del sistema (2.3) ó (2.4).

2.2 Ondas de expansión

Sea una función suave $\phi(t, \mathbf{x}) : \mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ tal que $\nabla \phi \neq \mathbf{0}$. Sea $I \subset \mathbb{R}$ el rango de valores que toma ϕ en un dominio abierto $\Omega \subset \mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}^d$. Entonces las curvas definidas por

$$L_c \equiv \{\phi(t, \mathbf{x}) = c\}, \quad c \in I \quad (2.8a)$$

forman una familia de curvas que cubren Ω . Una solución suave $\mathbf{u}(t, \mathbf{x})$ de (2.3) puede escribirse entonces en la forma

$$\mathbf{u}(t, \mathbf{x}) = \mathbf{u}(\phi(t, \mathbf{x})) \quad (2.8b)$$

Es sencillo ver que $\mathbf{u}(t, \mathbf{x})$ es constante a lo largo de las curvas $L_c \in I$. Sea entonces la familia de hipersuperficies en Ω normales al vector $[-c, \boldsymbol{\vartheta}] \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^d : \boldsymbol{\vartheta} \neq \mathbf{0}$ y que

pasan por los puntos (t_0, \mathbf{x}_0) . En forma analítica, esta familia L_c de hipersuperficies se encuentran dadas por:

$$L_c = \phi(t, \mathbf{x}) = \frac{(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) \cdot \boldsymbol{\vartheta}}{t - t_0} = c \quad (2.8c)$$

Introducimos entonces la definición de ondas de expansión.

Definición 2.5. Una solución suave $\mathbf{u}(\phi(t, \mathbf{x}))$ que es constante a lo largo de las curvas L_c dadas por (2.8c), se dice que es **autosimilar** en la variable $\varepsilon = \frac{(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) \cdot \boldsymbol{\vartheta}}{t - t_0}$. Tal solución se denomina una **onda de expansión centrada** en (t_0, \mathbf{x}_0) , o simplemente una **onda de expansión o rarefacción**.

Veamos ahora que condiciones debe satisfacer una onda de expansión centrada para ser una solución suave del sistema hiperbólico (2.4). Consideremos por simplicidad y sin perder generalidad que $t_0 = 0$ y $\mathbf{x}_0 = \mathbf{0}$. Sean entonces

$$\nabla \phi = \frac{\boldsymbol{\vartheta}}{t}, \quad \frac{\partial \phi}{\partial t} = -\frac{\mathbf{x} \cdot \boldsymbol{\vartheta}}{t^2}$$

Introduciendo éstas en (2.4) y denotando $\mathbf{u}' = \frac{d\mathbf{u}}{d\phi}$ se tiene

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \sum_{j=1}^d \mathbf{A}_j \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x_j} &= \mathbf{u}' \frac{\partial \phi}{\partial t} + \sum_{j=1}^d \mathbf{A}_j(\mathbf{u}) \mathbf{u}' \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \\ &= -\mathbf{u}' \frac{\mathbf{x} \cdot \boldsymbol{\vartheta}}{t^2} + \sum_{j=1}^d \mathbf{A}_j(\mathbf{u}) \mathbf{u}' \frac{\vartheta_j}{t} = \mathbf{0} \end{aligned}$$

o bien utilizando la definición de la matriz $\mathbf{A}_{\boldsymbol{\vartheta}}$ en (2.5)

$$\mathbf{A}_{\boldsymbol{\vartheta}} \mathbf{u}' = \left(\frac{\mathbf{x} \cdot \boldsymbol{\vartheta}}{t} \right) \mathbf{u}'$$

de donde se extrae que \mathbf{u}' debe ser un vector propio de $\mathbf{A}_{\boldsymbol{\vartheta}}$ y $\frac{\mathbf{x} \cdot \boldsymbol{\vartheta}}{t}$, el valor propio asociado.

Definición 2.6. Sea un estado fijo $\tilde{\mathbf{u}}$. Sea el parámetro $\epsilon = \left(\frac{\mathbf{x} \cdot \boldsymbol{\vartheta}}{t} - \lambda_k(\tilde{\mathbf{u}}) \right)$. Se dice que este estado puede ser conectado en forma suave a un estado $\mathbf{u}(\epsilon)$, a través de una **k-onda de expansión**, si para algún $1 \leq k \leq m$ y para algún $\alpha(\epsilon)$ se satisfacen simultáneamente:

$$\lambda_k(\mathbf{u}(\epsilon)) = \lambda_k(\tilde{\mathbf{u}}) + \epsilon, \quad \frac{d\mathbf{u}}{d\epsilon} = \alpha(\epsilon) \mathbf{r}_k, \quad \mathbf{u}(\epsilon = 0) = \tilde{\mathbf{u}} \quad (2.9)$$

Lema 2.1. Una condición necesaria para la existencia de una k-onda de expansión

centrada es que el k -campo característico sea genuinamente no lineal.

Demostración. De (2.9) se tiene

$$1 = \frac{d\lambda_k}{d\epsilon} = \nabla_{\mathbf{u}}\lambda_k \cdot \frac{d\mathbf{u}}{d\epsilon} = \alpha(\epsilon)\nabla_{\mathbf{u}}\lambda_k \cdot \mathbf{r}_k$$

Esto se cumple si y sólo si $\nabla\lambda_k \cdot \mathbf{r}_k \neq 0$ que es el caso en donde el k -campo característico es genuinamente no lineal. Más aún, introduciendo (2.7) se obtiene que $\alpha(\epsilon) = 1$ y por lo tanto $\mathbf{u}'(\epsilon) = \mathbf{r}_k(\epsilon)$. \square

Asumiendo entonces que el k -campo característico es genuinamente no lineal, existe de acuerdo al teorema de existencia y unicidad de ecuaciones diferenciales ordinarias (ODE) [3], una única solución suave definida por (2.9) para un valor de $|\epsilon|$ suficiente pequeño.

Asociadas a una k -onda de expansión centrada existen ciertas funciones escalares que son constantes a través de la misma. Estas funciones se conocen como invariantes de Riemann.

Definición 2.7. *Se denomina **k-invariante de Riemann** del sistema hiperbólico (2.4) a una función continua $g : \mathfrak{F} \subset \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}$, tal que si $\mathbf{u} \in \mathfrak{F}$ entonces:*

$$\nabla_{\mathbf{u}}g(\mathbf{u}) \cdot \mathbf{r}_k = 0 \tag{2.10}$$

De la definición de invariante de Riemann, vemos que en el espacio de fases el subespacio generado por los gradientes $\nabla_{\mathbf{u}}g$ es perpendicular al vector \mathbf{r}_k . Como este subespacio es de dimensión $m - 1$, se deduce que existen un total de $(m - 1)$ k -invariantes de Riemann, cuyos gradientes en el espacio de fases son linealmente independientes [7].

Lema 2.2. *Sea $\mathbf{u}(t, \mathbf{x}) = \mathbf{u}(\epsilon)$, $\mathbf{u}(\epsilon = 0) = \tilde{\mathbf{u}}$ una solución autosimilar suave del sistema hiperbólico 2.4 a través de una k -onda de expansión centrada. Sea $g(\mathbf{u}(\epsilon))$ un k -invariante de Riemann. Entonces g es constante sobre la k -onda de expansión.*

Demostración. Utilizando 2.9, y la definición de k -invariante de Riemann se tiene:

$$\frac{dg}{d\epsilon} = \nabla_{\mathbf{u}}g \cdot \frac{d\mathbf{u}}{d\epsilon} = \nabla_{\mathbf{u}}g \cdot \mathbf{r}_k = 0$$

\square

Una forma práctica de obtener los $(m - 1)$ k -invariantes de Riemann hace uso del hecho que a través de una k -onda de expansión se satisfacen las $(m - 1)$ ODEs:

$$\frac{du_1}{r_k^1} = \frac{du_2}{r_k^2} = \dots = \frac{du_m}{r_k^m} \quad (2.11a)$$

Resolviendo por ejemplo la primera de estas ODEs a lo largo de una k -onda de expansión se tiene:

$$\int_0^\epsilon \left(\frac{du_1}{r_k^1} - \frac{du_2}{r_k^2} \right) d\epsilon = \text{cte.} \quad (2.11b)$$

por lo que el término a la izquierda de (2.11b) es constante a través de una k -onda de expansión y por lo tanto es un k -invariante de Riemann.

2.3 Soluciones discontinuas

Es de conocimiento general que las soluciones en el sentido clásico de sistemas hiperbólicos no lineales pueden desarrollar discontinuidades en un tiempo finito incluso con datos iniciales suaves y continuos. Por lo tanto es necesario introducir soluciones en el sentido generalizado las cuales satisfacen la forma integral de las leyes de conservación en el sentido de la teoría de distribuciones [5]. Sin embargo, estas soluciones generalizadas o débiles del sistema, usualmente no se encuentran unívocamente determinadas y es necesario por lo tanto establecer un estudio de las restricciones adicionales que éstas deben satisfacer para ser consideradas como soluciones físicamente relevantes, tal como se verá más adelante en esta sección. Antes de continuar, se introduce formalmente el concepto de solución generalizada.

Definición 2.8. *Se denomina una **solución generalizada** $\mathbf{u}(t, \mathbf{x})$ definida en el semiplano $t > 0$ del sistema hiperbólico de leyes de conservación (2.3), con valores iniciales $\mathbf{u}(t = 0, \mathbf{x}) = \phi(\mathbf{x})$, si \mathbf{u} y $\mathbf{F}(\mathbf{u})$ son funciones acotadas e integrables y estas satisfacen la relación integral:*

$$\int_0^\infty \int_{\mathbb{R}^d} w_t \mathbf{u} + \nabla w \cdot \mathbf{F}(\mathbf{u}) d\mathbf{x} dt + \int_{\mathbb{R}^d} w(0, \mathbf{x}) \phi(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \mathbf{0} \quad (2.12)$$

para toda función de prueba $w(t, \mathbf{x}) \in C_0^1$, que se anula para $|\mathbf{x}| + t$ suficientemente grande, i.e., de soporte compacto.

Es sencillo probar que toda solución clásica de (2.3) es una solución generalizada,

y en sentido contrario, toda solución generalizada con derivadas primeras continuas satisface (2.3). El siguiente lema establece una de las condiciones más importantes que debe satisfacer una solución generalizada a través de una discontinuidad, las llamadas condiciones de Rankine–Hugoniot.

Lema 2.3. *Sea un dominio fijo $\Omega \subset \mathbb{R}^d$, el cual se divide en dos subdominios $\Omega_L(t), \Omega_R(t)$ separados por una superficie $\mathcal{D}(t)$. Sean $\mathbf{u}_L(\mathbf{s}) = \lim_{\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{s}} \mathbf{u} : \mathbf{x} \in \Omega_L$ y $\mathbf{u}_R(\mathbf{s}) = \lim_{\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{s}} \mathbf{u} : \mathbf{x} \in \Omega_R$ valores discontinuos del vector de estado $\mathbf{u}(t, \mathbf{x})$ en una coordenada \mathbf{s} definida sobre la superficie \mathcal{D} , i.e. $\mathbf{u}_L(\mathbf{s}) \neq \mathbf{u}_R(\mathbf{s}), \forall \mathbf{s} \in \mathcal{D}$. Sean $\mathbf{F}_L = \mathbf{F}(\mathbf{u}_L), \mathbf{F}_R = \mathbf{F}(\mathbf{u}_R)$ los valores de \mathbf{F} a cada lado de la discontinuidad. Sea \mathbf{y} la velocidad de un punto en la superficie $\mathcal{D}(t)$ y \mathbf{n} el versor normal en $\mathcal{D}(t)$ con respecto a Ω_L , tal como se muestra en la Fig. 2.1 Finalmente, sea $\sigma \equiv \mathbf{n} \cdot \mathbf{y} \geq 0$ la velocidad de la discontinuidad en la dirección del versor normal \mathbf{n} que se asume positiva. Entonces una solución generalizada $\mathbf{u}(t, \mathbf{x})$ del sistema hiperbólico de leyes de conservación (2.3) satisface las llamadas condiciones de Rankine–Hugoniot:*

$$\mathbf{n} \cdot [\mathbf{F}_R - \mathbf{F}_L] = [\mathbf{u}_R - \mathbf{u}_L] \sigma \quad (2.13)$$

□

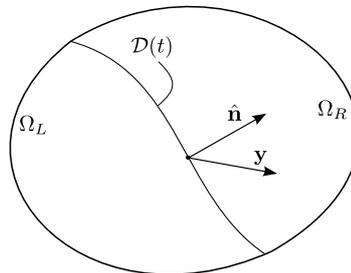


Figura 2.1: Esquema de una superficie de discontinuidad.

Dado un estado derecho \mathbf{u}_R , las condiciones de Rankine–Hugoniot forman un sistema de m ecuaciones con $m + 1$ incógnitas (\mathbf{u}_L, σ). Por lo tanto los estados que pueden ser conectados a través de una discontinuidad a \mathbf{u}_R forman una familia de estados que suponemos función de un parámetro ε , i.e., $\mathbf{u}_L = \mathbf{u}_L(\varepsilon)$. No obstante, este parámetro se encuentra sujeto a ciertas restricciones dado que el estado $\mathbf{u}_L(\varepsilon)$ puede ser una solución generalizada físicamente no admisible del sistema hiperbólico. Uno de los criterios más importantes para establecer la unicidad de las soluciones generalizadas, y de gran utilidad en el análisis de la convergencia de esquemas numéricos aplicados a sistemas hiperbólicos, proviene del trabajo de Oleinik [6], el cual estudia el comportamiento de las denominadas

funciones de entropía asociadas a sistemas hiperbólicos, entendidos estos como el caso límite para $\epsilon \rightarrow 0$ de la ley general de conservación viscosa:

$$\frac{\partial \mathbf{u}_\epsilon}{\partial t} + \sum_{i=1}^d \frac{\partial \mathbf{F}(\mathbf{u}_\epsilon) \mathbf{e}_i}{\partial \mathbf{x}_i} = \epsilon \sum_{i=1}^d \frac{\partial^2 \mathbf{u}_\epsilon}{\partial \mathbf{x}_i^2}, \quad \epsilon > 0 \quad (2.14)$$

Se sabe que los sistemas parabólicos del tipo (2.14) tienen una solución suave que está unívocamente determinada por sus condiciones iniciales y de contorno [2]. Utilizando este resultado se obtiene un criterio de admisibilidad y unicidad de soluciones generalizadas de sistemas hiperbólicos conocido como *desigualdad de entropía* o *condición de entropía de Oleinik* [6]. Introducimos entonces a continuación el concepto de función de entropía, para luego enunciar la condición de entropía de Oleinik.

Definición 2.9. Se denomina **función de entropía** del sistema hiperbólico de leyes de conservación (2.4) a una función escalar $\eta(\mathbf{u}) : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}$, con un vector de flujo asociado $\Psi(\mathbf{u}) : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^d$ que satisface para $\mathbf{u} \in C^1$ la ley de conservación adicional:

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} + \sum_{i=1}^d \frac{\partial \Psi_i}{\partial x_i} = 0 \quad (2.15a)$$

y además, dado un vector fijo $\vartheta \in \mathbb{R}^d$ satisface la igualdad,

$$\frac{\partial \eta}{\partial \mathbf{u}} \frac{\partial \mathbf{F} \cdot \vartheta}{\partial \mathbf{u}} = \frac{\partial \vartheta \cdot \Psi}{\partial \mathbf{u}}, \quad (2.15b)$$

Lema 2.4. Sea $\mathbf{u}(t, \mathbf{x})$, una **solución generalizada** del sistema hiperbólico (2.4) entendida como el límite de la solución $\mathbf{u}_\epsilon(t, \mathbf{x})$ para $\epsilon \rightarrow 0$ de la ley de conservación viscosa (2.14). Asíumase que $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ presenta una discontinuidad en una superficie $\mathcal{D}(t)$ que separa dos dominios $\Omega_L(t)$ y $\Omega_R(t)$ en forma similar a la enunciada en el lema §2.3. Asíumase que existe una función de entropía $\eta(\mathbf{u})$ y un flujo asociado $\Psi(\mathbf{u})$ tales que satisfacen (2.15). Supóngase además que la función de entropía $\eta(\mathbf{u})$ es convexa. Entonces, si $\eta_L = \eta(\mathbf{u}_L)$, $\eta_R = \eta(\mathbf{u}_R)$ y $\Psi_L = \Psi(\mathbf{u}_L)$, $\Psi_R = \Psi(\mathbf{u}_R)$ son los valores de la función de entropía y el flujo de entropía evaluados a ambos lados de la discontinuidad, estos satisfacen la llamada desigualdad de entropía:

$$\mathbf{n} \cdot [\Psi_R - \Psi_L] \leq [\eta_R - \eta_L] \sigma \quad (2.16)$$

La dirección de la desigualdad es revertida si $\eta(\mathbf{u})$ es concáva.

2.3.1 Ondas de choque

Se introduce ahora la definición de un importante concepto en soluciones discontinuas, este es el concepto de *choque* o más familiarmente *onda de choque* según Lax [4].

Definición 2.10. *Sea un sistema de m leyes de conservación hiperbólico en el cuál los campos característicos son genuinamente no lineales o linealmente degenerados. Asíumase que las velocidades características genuinamente no lineales son distintas de cualquier otra. Asíumase además que las velocidades características son ordenadas en la forma:*

$$\lambda_1 < \lambda_2 < \cdots < \lambda_m$$

*Considérese una discontinuidad similar a la enunciada en el lema §2.3 Esta discontinuidad es llamada un **choque** si y solo si satisface las condiciones de Rankine–Hugoniot y existe un índice $1 \leq j \leq m$ asociado a una velocidad característica genuinamente no lineal tal que*

$$\lambda_j(\mathbf{u}_L) > \sigma > \lambda_j(\mathbf{u}_R), \quad \lambda_{j-1}(\mathbf{u}_L) < \sigma < \lambda_{j+1}(\mathbf{u}_R) \quad (2.17)$$

*Estas desigualdades significan que $m - j + 1$ características se cruzan con el choque desde la izquierda, y j características desde la derecha. Se conocen como **condiciones de choque de Lax**.*

En [4] se demuestra que cuando los estados \mathbf{u}_L y \mathbf{u}_R son suficientemente cercanos, la condición de desigualdad de entropía y la condición de choque de Lax son equivalentes. Más aún, como veremos en el capítulo posterior para el caso particular de las ecuaciones de Euler, se demuestra que ambas condiciones son equivalentes para cualquier discontinuidad en el cual el flujo de masa a través de la misma es no nulo.

2.3.2 Discontinuidades de contacto

Finalmente, se presentan ahora las soluciones discontinuas asociadas a los campos característicos linealmente degenerados. Esto se hace a partir de la definición del concepto de discontinuidad de contacto dada por el siguiente lema [4].

Lema 2.5. *Sean dos estados discontinuos \mathbf{u}_L y \mathbf{u}_R según el lema §2.3 que tienen los mismos k -invariantes de Riemann con respecto a un k -campo linealmente degenerado. Entonces las condiciones de Rankine–Hugoniot son satisfechas con una velocidad de propagación de la discontinuidad $\sigma = \lambda_k(\mathbf{u}_L) = \lambda_k(\mathbf{u}_R)$. Tal discontinuidad es denominada*

una *discontinuidad de contacto*.

Las discontinuidades de contacto son entonces discontinuidades que satisfacen las condiciones de Rankine–Hugoniot pero no así las condiciones de desigualdad de entropía de Oleinik o las condiciones de choque de Lax.

Para finalizar este capítulo presentamos uno de los problemas de valores iniciales que juega un rol fundamental en el estudio de las soluciones exactas de sistemas hiperbólicos, y más aún en la construcción de métodos de resolución numérica de los mismos, este es el problema de Riemann.

2.4 El problema de Riemann

El problema de Riemann para el sistema de m leyes de conservación hiperbólico unidimensional es el problema de valores iniciales (IVP):

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial x} = \mathbf{0} \quad \{-\infty < x < \infty, t > 0\} \quad (2.18a)$$

$$\mathbf{u}(t = 0, x) = \begin{cases} \mathbf{u}_L & \text{si } x < 0 \\ \mathbf{u}_R & \text{si } x > 0 \end{cases} \quad (2.18b)$$

donde $\mathbf{u}_L, \mathbf{u}_R$ son estados constantes, y donde arbitrariamente la posición de la discontinuidad inicial se ubica en $x = 0$.

El problema de Riemann es autosimilar, es decir dada una solución $\mathbf{u}(t, x)$ del IVP (2.18), para cualquier constante $\lambda > 0$ la función $\mathbf{u}_\lambda(t, x) = \mathbf{u}(\lambda t, \lambda x)$ es también una solución de (2.18). Asumáse ahora que el sistema es estrictamente hiperbólico y que todas las familias características son o bien genuinamente no lineales o bien linealmente degeneradas. Entonces puede ser enunciado el siguiente lema [7].

Lema 2.6. *Sea \mathbf{u}_R un vector de estado dado. Entonces existe un entorno $C_{\mathbf{u}_R}$ de \mathbf{u}_R que tiene las siguientes propiedades. Para cada estado $\mathbf{v} \in C_{\mathbf{u}_R}$ el problema de Riemann (2.18), con datos iniciales $\mathbf{u}_R, \mathbf{u}_L = \mathbf{v}$ tiene una solución única $\mathbf{u}(x, t) = \mathbf{u}(\xi) : \xi = \frac{x}{t}$. Esta solución consiste en una secuencia única $\{\mathbf{u}_{m+1} = \mathbf{u}_R, \mathbf{u}_m, \dots, \mathbf{u}_1 = \mathbf{u}_L\}$ tal que \mathbf{u}_k es un estado que puede ser conectado al estado \mathbf{u}_{k+1} a través de alguna de las siguientes ondas elementales:*

1. *k-ondas de expansión centradas. Es decir puede existir un k-campo característico genuinamente no lineal $1 \leq k \leq m$ para el cual existe una solución continua $\mathbf{u}_k(\xi)$*

solución de la ecuación diferencial:

$$\frac{d\mathbf{u}_k(\xi)}{d\xi} = \mathbf{r}_k(\mathbf{u}_k(\xi)), \quad \lambda_k(\mathbf{u}_k(\xi)) = \lambda_k(\mathbf{u}_{k+1}) + \xi, \quad \mathbf{u}_k(\xi = 0) = \mathbf{u}_{k+1}$$

2. *k-ondas de choque de velocidad σ_k , es decir puede existir un $1 \leq k \leq m$ perteneciente a un campo genuinamente no lineal para el cual la solución es de la forma:*

$$\mathbf{u}(\xi) = \begin{cases} \mathbf{u}_k, & \text{si } \xi < \sigma_k \\ \mathbf{u}_{k+1}, & \text{si } \xi > \sigma_k \end{cases}$$

donde las condiciones a la izquierda y derecha del choque son tales que se cumplen las condiciones de Rankine–Hugoniot:

$$\mathbf{f}(\mathbf{u}_{k+1}) - \mathbf{f}(\mathbf{u}_k) = \sigma_k(\mathbf{u}_{k+1} - \mathbf{u}_k)$$

y las condiciones de admisibilidad de Lax:

$$\lambda_k(\mathbf{u}_k) > \sigma_k > \lambda_k(\mathbf{u}_{k+1}), \quad \lambda_{k-1}(\mathbf{u}_k) < \sigma_k < \lambda_{k+1}(\mathbf{u}_{k+1})$$

3. *k-discontinuidades de contacto de velocidad σ_k , es decir puede existir un $1 \leq k \leq m$ perteneciente a un campo linealmente degenerado para el cual los invariantes de Riemann son constantes para los estados discontinuos \mathbf{u}_k y \mathbf{u}_{k+1} y donde $\sigma = \lambda_k(\mathbf{u}_k) = \lambda_k(\mathbf{u}_{k+1})$ de forma tal que se satisfacen las condiciones de Rankine–Hugoniot.*

Se puede demostrar [1] utilizando si es necesario las condiciones de choque de Lax, que si Γ_k, Γ_{k+1} , ($1 \leq k \leq m-1$) representan las velocidad de dos ondas correspondientes a campos característicos consecutivos, estas no interactúan entre sí, es decir $\Gamma_{k+1} > \Gamma_k$.

A modo de resumen de los resultados expuestos en este capítulo se muestra en la Fig. 2.2 el esquema de ondas para un problema de Riemann de un sistema estrictamente hiperbólico de 3 ecuaciones, donde se tiene una 1-onda de rarefacción, una 2-onda de contacto y una 3-onda de choque y donde se han utilizado las condiciones de choque de Lax para mostrar la no interacción entre las ondas.

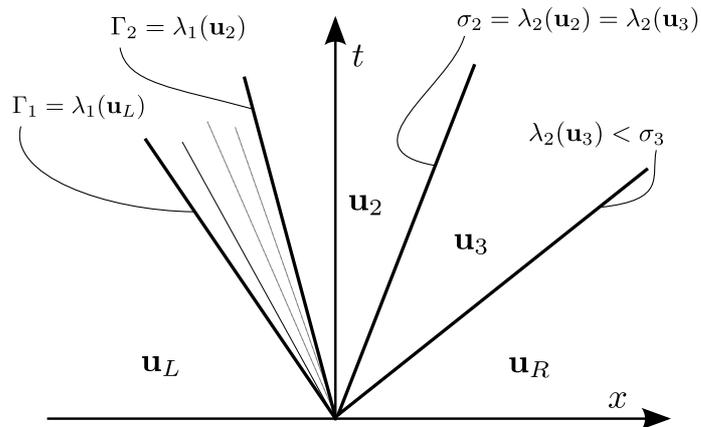


Figura 2.2: Esquema de ondas del problema de Riemann de un sistema hiperbólico de 3 leyes de conservación.

BIBLIOGRAFIA

- [1] ARTZI, M. B., AND FALCOVITZ, J. *Generalized Riemann Problems in Computational Fluid Dynamics*. Cambridge Monographs on Applied and Computational Mathematics, 2003.
- [2] EVANS, L. C. *Partial Differential Equations, 2nd Ed.* American Mathematical Society, 2010.
- [3] HARTMAN, P. *Ordinary Differential Equations*, second ed. Society for Industrial and Applied Mathematics, 2002.
- [4] LAX, P. D. Hyperbolic systems of conservation laws. *Communications On Pure And Applied Mathematics* (1957), 233–262.
- [5] LAX, P. D. Hyperbolic systems of conservation laws and the mathematical theory of shock waves. *SIAM Regional Conference Series In Applied Mathematics 11* (1972).
- [6] OLEINIK, O. A. Discontinuous solutions of nonlinear differential equations. *American Mathematical Society Translations 26* (1963), 95–172.
- [7] SMOLLER, J. *Shock Waves and Reaction-Diffusion Equations*. Springer-Verlag, 1994.

3.1 Sistema de ecuaciones

La dinámica de un fluido compresible puede ser descrita a través de la formulación de tres leyes de conservación. Estas son la ley de conservación de la masa, la ley de conservación de cantidad de movimiento lineal, y la ley de conservación de la energía. Cuando son consideradas en forma simultánea la ausencia de campos externos, fuerzas de tipo viscoso y transferencia de calor por conducción y radiación, estas tres leyes de conservación forman un sistema conocido como las ecuaciones de Euler. El sistema de ecuaciones de Euler es un sistema hiperbólico de ecuaciones y por lo tanto son aplicables todas las propiedades que se han descrito en el capítulo anterior.

En un sistema de coordenadas euleriano $\{(t, \mathbf{x}) : t > 0, \mathbf{x} \in \Omega \subset \mathbb{R}^d\}$, sea la velocidad del fluido escrita como $\mathbf{v}(t, \mathbf{x}) := [v_{x_1}, \dots, v_{x_d}]$ en las direcciones $\mathbf{x} = [x_1, \dots, x_d]$ respectivamente y sea $\rho(t, \mathbf{x})$ la densidad del fluido. Luego la ley de conservación de la masa es escrita en forma diferencial como:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \mathbf{v} = 0 \quad (3.1a)$$

Asímismo la ley de conservación de la cantidad de movimiento lineal se encuentra dada por:

$$\frac{\partial \rho \mathbf{v}^T}{\partial t} + \left[\nabla \cdot (\rho \mathbf{v}^T \otimes \mathbf{v} + \mathbf{I}p) \right]^T = \mathbf{0} \quad (3.1b)$$

donde $p(t, \mathbf{x})$ es la presión del fluido.

Finalmente la ley de conservación de la energía total del fluido se escribe en forma

diferencial como:

$$\frac{\partial \rho \left(e + \frac{1}{2} \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} \right)}{\partial t} + \nabla \cdot \left[\left\{ \rho \left(e + \frac{1}{2} \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} + p \right) \right\} \mathbf{v} \right] = 0 \quad (3.1c)$$

donde $e(t, \mathbf{x})$ es la energía interna por unidad de masa. Las tres leyes de conservación (3.1) forman el sistema de las ecuaciones de Euler. Introduciendo la definición de energía total $E(t, \mathbf{x})$ como la suma de la energía interna y energía cinética por unidad de volumen:

$$E = \rho \left(e + \frac{1}{2} \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} \right) \quad (3.2)$$

el problema de valores iniciales para el sistema de ecuaciones de Euler puede ser escrito en la forma compacta:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\nabla \cdot \mathbf{F}) &= \mathbf{0} \quad \text{en} \quad \mathbf{x} \in \Omega, t > 0 \\ \mathbf{u}(t = 0, \mathbf{x}) &= \phi(\mathbf{x}) \end{aligned} \quad (3.3a)$$

donde

$$\mathbf{u} = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho \mathbf{v}^T \\ E \end{bmatrix}, \quad \mathbf{F} = \begin{bmatrix} \rho \mathbf{v} \\ \rho \mathbf{v}^T \otimes \mathbf{v} + \mathbf{I} p \\ (E + p) \mathbf{v} \end{bmatrix} \quad (3.3b)$$

El sistema de ecuaciones de Euler como puede notarse, es un sistema formado por $d + 2$ ecuaciones, y $d + 3$ incógnitas (ρ, \mathbf{v}, E, p) . La ecuación adicional para la clausura del sistema la provee una ecuación de estado (EOS) dada por relaciones termodinámicas. Es por ello que antes de proseguir con la descripción de las propiedades de las ecuaciones de Euler haremos un paréntesis para enunciar las propiedades termodinámicas que son consideradas para el fluido. Una discusión más detallada de la obtención de las propiedades del fluido cuando se considera equilibrio químico se presentará en el Capítulo 3.

3.1.1 Consideraciones termodinámicas

Se considera un fluido en equilibrio termodinámico para el cual su energía interna específica se encuentra unívocamente determinada (y es una función suave) por su volumen específico $v = \rho^{-1}$ y por su entropía específica s . Es decir, se asume que el fluido tiene asociada una *ecuación de estado completa* $e = e(v, s)$. De la primer y segunda ley

de la termodinámica, se deduce la conocida *relación fundamental de la termodinámica*

$$de = -pdv + Tds \quad (3.4)$$

donde T es la temperatura termodinámica¹ Se considera en todos los casos que el fluido es una mezcla de gases térmicamente perfectos, es decir que satisface la ecuación de estado de los gases ideales:

$$pv = nRT \quad (3.5)$$

donde n es el número de moles por unidad de masa y R es la constante universal de los gases ideales. Debe entenderse que al permitir cambios en la composición química n es una función de las variables de estado termodinámicas. Mas aún, es útil aclarar que la ecuación de estado (3.5) no implica la deducción directa de la EOS $e(v, s)$ la cual continúa siendo arbitraria.

Se definen a continuación las siguientes funciones adimensionales [6] :

$$\gamma \equiv \frac{v}{p} \left(\frac{\partial^2 e}{\partial v^2} \right)_s = -\frac{v}{p} \left(\frac{\partial p}{\partial v} \right)_s \quad (3.6a)$$

$$\Gamma \equiv -\frac{v}{T} \frac{\partial^2 e}{\partial s \partial v} = \frac{v}{T} \left(\frac{\partial p}{\partial s} \right)_v \quad (3.6b)$$

$$\varrho \equiv \frac{pv}{T^2} \left(\frac{\partial^2 e}{\partial s^2} \right)_v \quad (3.6c)$$

$$\mathcal{G} \equiv -\frac{1}{2}v \frac{\left(\frac{\partial^3 e}{\partial v^3} \right)_s}{\left(\frac{\partial^2 e}{\partial v^2} \right)_s} = \frac{1}{2} \frac{v^2}{\gamma p} \left(\frac{\partial^2 p}{\partial v^2} \right)_s \quad (3.6d)$$

donde γ es llamado el exponente politrópico, Γ el coeficiente de Grüneisen, ϱ es el calor específico adimensional y donde \mathcal{G} es un coeficiente de alto orden que puede ser reescrito utilizando (3.6a) como:

$$\mathcal{G} = \frac{1}{2} \left[\gamma + 1 - \frac{v}{\gamma} \left(\frac{\partial \gamma}{\partial v} \right)_s \right] = 1 + \frac{1}{2} \frac{1}{\gamma p v^2} \left(\frac{\partial^2 p}{\partial \rho^2} \right)_s \quad (3.6e)$$

Las condiciones de estabilidad de un sistema termodinámico requieren que e sea una

¹El significado físico preciso de cualquiera de las variables de origen termodinámico introducidas en este capítulo puede encontrarse en libros de texto sobre la materia, e.g. [3].

función convexa de (v, s) [9]. Es decir se requiere que

$$\left(\frac{\partial^2 e}{\partial s^2}\right)_v \geq 0, \quad \left(\frac{\partial^2 e}{\partial v^2}\right)_s \geq 0, \quad \left(\frac{\partial^2 e}{\partial s^2}\right)_v \left(\frac{\partial^2 e}{\partial v^2}\right)_s \geq \left(\frac{\partial^2 e}{\partial s \partial v}\right)^2$$

Esto se traduce en las desigualdades

$$\varrho \geq 0, \quad \gamma \geq 0, \quad \gamma\varrho - \Gamma^2 \geq 0$$

Se asume entonces que los coeficientes asociados γ, Γ, ϱ y \mathcal{G} definidos en (3.6) satisfacen

$$\gamma > 0, \quad \gamma\varrho - \Gamma^2 > 0, \quad \Gamma > 0, \quad \mathcal{G} > 0 \quad (3.7)$$

Las primeras dos condiciones como ya vimos provienen de la estabilidad termodinámica y equivalen a la condición de convexidad estricta de la energía interna. La condición adicional $\Gamma > 0$ si bien no es impuesta por la estabilidad termodinámica, es válida para la mayoría de los materiales los cuales se expanden al calentarse a presión constante. Esto sólo no es cierto en muy pocos casos, tales como el de la contracción del agua cuando es calentada a 0°C y 1 bar [2]. Esta condición asegura que las curvas isoentrópicas no se cruzan en el plano (p, v) . La condición adicional $\mathcal{G} > 0$ asegura la convexidad estricta de estas curvas isoentrópicas. Esta condición es válida para la mayoría de los materiales en estados lejos de las transiciones de fase, en donde se cumple que $\left(\frac{\partial\gamma}{\partial v}\right)_s \ll 1$.

3.1.2 Hiperbolicidad

Se ahora el sistema de ecuaciones de Euler (3.3) escrito en la forma cuasilínea

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \sum_{j=1}^d \frac{\partial \mathbf{f}_j}{\partial \mathbf{u}} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x_j} = \mathbf{0} \quad (3.8)$$

donde \mathbf{f}_j es el j vector columna de \mathbf{F} en (3.3b). Dada una dirección espacial $\mathbf{n} \in \mathbb{R}^d$ la matriz jacobiana $\mathbf{A}_{\mathbf{n}} \equiv \sum_{j=1}^d \frac{\partial \mathbf{f}_j}{\partial \mathbf{u}} n_j$ se puede escribir como

$$\mathbf{A}_{\mathbf{n}}(\mathbf{u}) = \begin{bmatrix} 0 & \mathbf{n} & 0 \\ -(\mathbf{v} \cdot \mathbf{n})\mathbf{v}^T + (c^2 + \Gamma(-H + \mathbf{v} \cdot \mathbf{v}))\mathbf{n}^T & \mathbf{I}(\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) + \mathbf{v} \otimes \mathbf{n} - \Gamma\mathbf{n} \otimes \mathbf{v} & \Gamma\mathbf{n} \\ -(\mathbf{v} \cdot \mathbf{n})(H(1 + \Gamma) - c^2 - \Gamma(\mathbf{v} \cdot \mathbf{v})) & H\mathbf{n} - (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n})\Gamma\mathbf{v} & (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n})(1 + \Gamma) \end{bmatrix} \quad (3.9)$$

donde se ha aplicado la regla de la cadena para la diferenciación de la presión $p(v(\mathbf{u}), s(v(\mathbf{u}), e(\mathbf{u})))$ y donde se introdujo la definición de entalpía total del flujo

$$H \equiv e + pv + \frac{1}{2} \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} \quad (3.10)$$

y la definición de la velocidad del sonido c

$$c \equiv \sqrt{\left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)_s} = \sqrt{\gamma \frac{p}{\rho}} \quad (3.11)$$

la cual es un valor real debido a que $\gamma > 0$

Se puede demostrar mediante manipulación algebraica que la matriz $\mathbf{A}_{\mathbf{n}}$ tiene $d + 2$ valores propios reales ordenados en la forma creciente:

$$\begin{cases} \lambda_1(\mathbf{u}) = \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} - c \\ \lambda_2(\mathbf{u}) = \dots = \lambda_{d+1}(\mathbf{u}, \mathbf{n}) = \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \\ \lambda_{d+2}(\mathbf{u}) = \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} + c \end{cases} \quad (3.12a)$$

Los vectores propios derechos asociados son:

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_1(\mathbf{u}) &= \begin{bmatrix} 1 \\ (\mathbf{v} - c\mathbf{n})^T \\ H - (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n})c \end{bmatrix}, & \mathbf{r}_2(\mathbf{u}) &= \begin{bmatrix} 1 \\ \mathbf{v}^T \\ H - \frac{c^2}{\Gamma} \end{bmatrix} \\ \mathbf{r}_j(\mathbf{u}) &= \begin{bmatrix} 0 \\ \boldsymbol{\Omega}_j^T \\ \mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\Omega}_j \end{bmatrix} & \mathbf{r}_{d+2}(\mathbf{u}) &= \begin{bmatrix} 1 \\ (\mathbf{v} + c\mathbf{n})^T \\ H + (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n})c \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (3.12b)$$

con $j = (3, \dots, d + 1)$ donde $(\boldsymbol{\Omega}_1, \dots, \boldsymbol{\Omega}_{nd-1})$ es una base ortonormal del hiperplano ortogonal a \mathbf{n} . Entonces decimos que el sistema de ecuaciones de Euler es hiperbólico y estrictamente hiperbólico para $d = 1$

Lema 3.1. *En un fluido en el cual se satisfacen las restricciones termodinámicas (3.7) los campos característicos 1 y $d + 2$ asociados a las velocidades características λ_1 y λ_{d+2} de las ecuaciones de Euler son genuinamente no lineales. Asimismo, los j -campos característicos para $2 \leq j \leq d + 1$ son linealmente degenerados.*

Demostración. Como la velocidad del sonido puede escribirse en forma general como

$c(v, s)$ y a su vez $s(v, e)$, entonces aplicando la derivación en cadena de $c(v(\mathbf{u}), s(v(\mathbf{u}), e(\mathbf{u})))$ se obtiene,

$$\begin{aligned}\nabla_{\mathbf{u}}c &= \left(\frac{\partial c}{\partial v}\right)_s \nabla_{\mathbf{u}}v + \left(\frac{\partial c}{\partial s}\right)_v \left[\left(\frac{\partial s}{\partial v}\right)_e \nabla_{\mathbf{u}}v + \left(\frac{\partial s}{\partial e}\right)_v \nabla_{\mathbf{u}}e \right] \\ \nabla_{\mathbf{u}}c &= \begin{bmatrix} -\frac{1}{\rho^2} \left(\frac{\partial c}{\partial v}\right)_s + \frac{1}{\rho T} \left(\frac{\partial c}{\partial s}\right)_v (-H + \mathbf{v} \cdot \mathbf{v}) \\ -\frac{1}{\rho T} \left(\frac{\partial c}{\partial s}\right)_v \mathbf{v} \\ \frac{1}{\rho T} \left(\frac{\partial c}{\partial s}\right)_v \end{bmatrix}\end{aligned}$$

Luego para los campos característicos 1 y $d+2$ se tiene

$$\begin{aligned}\nabla_{\mathbf{u}}\lambda_{1,d+2} \cdot \mathbf{r}_{1,d+2} &= \left(\begin{bmatrix} -\frac{\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}}{\rho} \\ \frac{\mathbf{n}}{\rho} \\ 0 \end{bmatrix} \mp \nabla_{\mathbf{u}}c \right) \cdot \begin{bmatrix} 1 \\ (\mathbf{v} \mp c\mathbf{n})^T \\ H \mp (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n})c \end{bmatrix} \\ &= \mp \frac{c}{\rho} \pm \frac{1}{\rho^2} \left(\frac{\partial c}{\partial v}\right)_s\end{aligned}$$

Pero,

$$\begin{aligned}\left(\frac{\partial c}{\partial v}\right)_s &= \frac{1}{2c} \left[\left(\frac{\partial \gamma}{\partial v}\right)_s pv + \gamma v \left(\frac{\partial p}{\partial v}\right)_s + \gamma p \right] \\ &= \frac{1}{2c} \left[\left(\frac{\partial \gamma}{\partial v}\right)_s pv + \gamma p(1 - \gamma) \right] \\ &= \frac{\gamma p}{c} (1 - \mathcal{G})\end{aligned}$$

donde se ha introducido (3.6e). Reemplazando esta última en la anterior se obtiene finalmente

$$\nabla_{\mathbf{u}}\lambda_{1,d+2} \cdot \mathbf{r}_{1,d+2} = \mp \frac{\mathcal{G}}{c}$$

Como por hipótesis $\mathcal{G} > 0$ entonces $\nabla_{\mathbf{u}}\lambda_{1,d+2} \cdot \mathbf{r}_{1,d+2} \neq 0$ para cualquier estado \mathbf{u} admisible, y por lo tanto el las los campos característicos 1 y $d+2$ son genuinamente no lineales. La demostración de que los k -campos característicos para $2 \leq k \leq d+1$ son linealmente degenerados es casi directa y no requiere de ningún tipo de restricción termodinámica. \square

3.2 Ondas de expansión

De acuerdo a lo expuesto en la sección §2.2 se tiene que asociadas a los k -campos genuinamente no lineales $k = 1$ y $k = d + 2$ existen soluciones clásicas de (3.3) que satisfacen las condiciones de una k -onda de expansión centrada. Es decir dado un estado $\tilde{\mathbf{u}}$ es posible encontrar una familia de estados $\mathbf{u}(\epsilon)$ con $\left\{ \epsilon = \left(\frac{(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) \cdot \mathbf{n}}{t - t_0} - \tilde{\mathbf{v}} \cdot \mathbf{n} \mp \tilde{c} \right), t > t_0 \right\}$ que satisfacen la ecuación diferencial para $k = (1, d + 2)$:

$$\mathbf{v}(\epsilon) \cdot \mathbf{n} \mp c(\epsilon) = \tilde{\mathbf{v}} \cdot \mathbf{n} \mp \tilde{c} + \epsilon, \quad \frac{d\mathbf{u}}{d\epsilon} = \begin{bmatrix} 1 \\ \mathbf{v}^T(\epsilon) \cdot \mathbf{n} \mp c(\epsilon) \\ H(\epsilon) \mp (\mathbf{v}(\epsilon) \cdot \mathbf{n})c \end{bmatrix}, \quad \mathbf{u}(\epsilon = 0) = \tilde{\mathbf{u}} \quad (3.13)$$

siendo $|\epsilon|$ suficientemente pequeño y donde debe entenderse que el signo superior corresponde a $k = 1$ y el inferior a $k = d + 2$ en \mp ó \pm en las ecuaciones (3.13) y (3.14). Se dice además que el estado $\tilde{\mathbf{u}}$ se conecta *por la derecha* con el estado $\mathbf{u}(\epsilon)$ cuando $\epsilon > 0$ y viceversa se conecta *por la izquierda* cuando $\epsilon < 0$.

Resolviendo ahora cada una de las ODEs (2.11a) es posible mostrar que los k -invariantes de Riemann de las ecuaciones de Euler a través de las k -ondas de expansión para $k = (1, d + 2)$ son:

$$\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \pm \int \frac{c}{\rho} d\rho = \text{cte}, \quad s = \text{cte} \quad (3.14)$$

Para finalizar con la caracterización de las ondas de rarefacción se introduce el siguiente lema.

Lema 3.2. *Dado un estado $\tilde{\mathbf{u}}$ conectado por la derecha con el estado $\mathbf{u}(\epsilon)$, $\epsilon > 0$ a través de una onda de rarefacción, entonces se satisfacen simultáneamente:*

$$\rho(\epsilon) > \tilde{\rho}, \quad \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} - c(\epsilon) > \tilde{\mathbf{v}} \cdot \mathbf{n} - \tilde{c}, \quad p(\epsilon) > \tilde{p} \quad (3.15)$$

donde las desigualdades son revertidas para $\epsilon < 0$

Demostración. Las primeras dos desigualdades se demuestran en forma directa utilizando los resultados $\frac{d(\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} - c(\epsilon))}{d\epsilon} = 1$ y $\frac{d\rho(\epsilon)}{d\epsilon} = 1$ que se obtienen a partir de (3.13). Además, como a través de una onda de rarefacción s es constante entonces

$$\frac{dp}{d\epsilon} = \left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_s \frac{d\rho(\epsilon)}{d\epsilon} = \gamma \frac{p}{\rho} = c^2 > 0$$

3.3 Soluciones discontinuas

3.3.1 Condiciones de Rankine–Hugoniot

Considérese ahora una solución débil de las ecuaciones de Euler discontinua en una superficie $\mathcal{D}(t)$ que se propaga con una velocidad normal a la superficie σ ambas definidas en forma similar al Lema §2.3. Entonces los estados discontinuos \mathbf{u}_L y \mathbf{u}_R satisfacen las condiciones de Rankine–Hugoniot:

$$[\rho\hat{v}] = 0 \quad (3.16a)$$

$$[\rho\hat{v}\mathbf{v} + p\mathbf{n}^T] = 0 \quad (3.16b)$$

$$[E\hat{v} + p\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}] = 0 \quad (3.16c)$$

donde los corchetes en esta sección denotan el salto a ambos lados de la discontinuidad, $[(\cdot)] = (\cdot)_R - (\cdot)_L$, y donde \hat{v} es la velocidad del flujo en la dirección normal a la discontinuidad en el sistema de referencia fijo a esta:

$$\hat{v} \equiv \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} - \sigma \quad (3.17)$$

Sea W el flujo de masa neto desde el estado L al estado R , es decir

$$W \equiv \rho_L \hat{v}_L = \rho_R \hat{v}_R \quad (3.18)$$

Se asume en esta subsección que $W \neq 0$. Multiplicando la condición (3.16b) por un versor tangencial a la superficie de discontinuidad se obtiene que únicamente son admisibles discontinuidades para las cuales la velocidad en las direcciones tangenciales a la superficie se mantiene constante.

Restando ahora de (3.16c), (3.16b) multiplicada por $\cdot \mathbf{n} \sigma$ y sumando (3.16a) multiplicada por $\sigma^2/2$ se obtiene

$$W \left[\left(\frac{1}{2}(\mathbf{v} \cdot \mathbf{v}) - \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \sigma + \frac{\sigma^2}{2} \right) + e + \frac{p}{\rho} \right] = 0$$

Pero al ser la velocidad tangencial igual a ambos lados de la discontinuidad entonces es válida

$$[\mathbf{v} \cdot \mathbf{v}] = [(\mathbf{v} \cdot \mathbf{n})^2]$$

Reemplazando esta en la anterior

$$\left[\frac{1}{2} \hat{v}^2 + e + \frac{p}{\rho} \right] = 0$$

Multiplicando (3.16b) por \mathbf{n} y restando a esta (3.16a) multiplicada por σ se obtiene

$$\begin{aligned} [\hat{v}^2] &= \frac{-[p] + \rho_l \hat{v}_l^2}{\rho_r} - \frac{[p] + \rho_r \hat{v}_r^2}{\rho_l} \\ &= \frac{-[p] + \rho_r^2 \hat{v}_r^2 / \rho_l}{\rho_r} - \frac{[p] + \rho_r \hat{v}_r^2}{\rho_l} \\ &= -[p] \frac{(\rho_l + \rho_r)}{\rho_l \rho_r} \end{aligned}$$

Introduciendo esta en la anterior se obtiene finalmente

$$[e] + \langle p \rangle [v] = 0 \quad (3.19)$$

donde $\langle (\cdot) \rangle = \frac{(\cdot)_R + (\cdot)_L}{2}$ denota el promedio aritmético.

Nótese que (3.19) involucra sólo términos de origen termodinámico. Es decir expresa el conjunto de estados termodinámicos que pueden ser conectados a un estado de referencia, mediante una discontinuidad donde existe un flujo no nulo de masa normal a la misma $W \neq 0$. Introducimos entonces la definición de las llamadas *curvas de Hugoniot*.

Definición 3.1. *Considérense una densidad de referencia ρ_0 , el correspondiente volumen específico $v_0 = 1/\rho_0$, una energía interna de referencia e_0 y una presión de referencia $p_0 \equiv p(v_0, e_0)$. El conjunto de estados termodinámicos $v, e, p(v, e)$ que pueden conectarse a través de una discontinuidad de flujo másico no nulo $W = \rho_l \hat{v}_l = \rho_r \hat{v}_r \neq 0$ que satisfacen las condiciones de Rankine–Hugoniot, son los estados definidos por la superficie de nivel nula de la llamada curva de Hugoniot $\mathcal{H}_0(v, e)$*

$$\mathcal{H}_0(v, e) := e - e_0 + \frac{p(v, e) + p_0}{2} (v - v_0) = 0 \quad (3.20)$$

3.3.2 Ondas de choque

Los siguientes dos lemas permiten establecer bajo que condiciones dos estados termodinámicos conectados por la curva de Hugoniot satisfacen también la condición de entropía (2.16), para una dada función de entropía en el sentido de la Definición §2.9, y por lo tanto corresponden a una discontinuidad físicamente posible.

Lema 3.3. *La entropía termodinámica por unidad de volumen ρs es una función matemática de entropía de las ecuaciones de Euler que para \mathbf{u} continua y suave satisface la ecuación de conservación adicional*

$$\frac{\partial \rho s}{\partial t} + \nabla \cdot \rho s \mathbf{v} = 0 \quad (3.21)$$

Además, la condición de estabilidad termodinámica $\gamma \varrho - \Gamma^2 > 0$ implica que ρs es una función cóncava con respecto al vector de estado \mathbf{u} .

Demostración. La prueba de que la entropía volumétrica satisface la ecuación de conservación adicional (3.21) y es una entropía en el sentido de la definición (2.9) se realiza en [5]. En este trabajo se demuestra que la función de entropía es cóncava con respecto al vector de estado \mathbf{u} si y solo si se satisfacen las desigualdades termodinámicas

$$\frac{\partial^2 s}{\partial \rho^2} + \frac{2}{\rho} \left(\frac{\partial s}{\partial \rho} \right)_e < 0, \quad \left(\frac{\partial^2 s}{\partial \rho^2} + \frac{2}{\rho} \left(\frac{\partial s}{\partial \rho} \right)_e \right) \frac{\partial^2 s}{\partial e^2} - \left(\frac{\partial^2 s}{\partial \rho \partial e} \right)^2 > 0$$

Es sencillo probar diferenciando la expresión $s(\rho, e(\rho, s))$ [6] que estas desigualdades se satisfacen si y solo si se satisface la restricción $\gamma \varrho - \Gamma^2 > 0$ impuesta por la estabilidad termodinámica. \square

Lema 3.4. *Una discontinuidad físicamente admisible de las ecuaciones de Euler para la cual $W \neq 0$ satisface*

$$W[s] > 0 \quad (3.22)$$

Demostración. Aplíquese el lema §2.4 a la función de entropía ρs con flujo $\boldsymbol{\psi} = \rho s \mathbf{v}$ \square

El siguiente lema [11] establece que el criterio de desigualdad de la entropía (3.22), es equivalente al aumento de la presión (compresividad) y densidad, para una partícula de fluido que atraviesa la discontinuidad.

Lema 3.5. *Para un fluido en el cual se satisfacen las restricciones termodinámicas (3.7) entonces,*

$$\text{sign}[p] = \text{sign}[\rho] = \text{sign}[s] \quad (3.23)$$

a lo largo de la curva de Hugoniot $\mathcal{H}_0(e, v)$, donde sign denota la función escalar signo. Más aún, definiendo el Mach relativo con respecto a la onda como $M_{L,R} = \frac{|\mathbf{v}_{L,R} \cdot \mathbf{n} - \sigma|}{c_{L,R}}$ y asumiendo $W > 0$ se satisface

$$|M_R| < 1 < |M_L| \quad (3.24)$$

donde la desigualdad es revertida para $W < 0$. Es decir en el sistema de coordenadas fijo a la discontinuidad el flujo al atravesarla pasa de un estado supersónico a uno subsónico.

Las desigualdades anteriores pueden escribirse para $W > 0$ como

$$\mathbf{v}_R \cdot \mathbf{n} - c_R < \sigma < \mathbf{v}_L \cdot \mathbf{n} - c_L, \quad (3.25a)$$

y para $W < 0$

$$\mathbf{v}_R \cdot \mathbf{n} + c_R < \sigma < \mathbf{v}_L \cdot \mathbf{n} + c_L, \quad (3.25b)$$

que son equivalentes a las condiciones de choque de Lax de las ecuaciones de Euler para los campos genuinamente no lineales 1 y $(d+2)$ respectivamente. Por lo tanto se resume que las discontinuidades físicamente admisibles con un flujo de masa no nulo que la atraviesa son ondas de choque en los campos genuinamente no lineales utilizando de aquí en adelante esta última denominación.

3.3.3 Discontinuidades de contacto

Aplicando lo visto en la sección a los campos característicos linealmente degenerados de las ecuaciones de Euler, se obtiene la posibilidad de la existencia de soluciones débiles de tipo discontinuo que satisfacen las condiciones de Rankine–Hugoniot, pero no así las condiciones de choque de Lax. Estas discontinuidades se presentan cuando $W = 0$, es decir cuando la velocidad de las características a ambos lados de la discontinuidad coincide con la velocidad de la misma. En las ecuaciones de Euler esto equivale a la invariancia de la velocidad normal pudiendo ser discontinua la velocidad tangencial. Además, las condiciones de Rankine–Hugoniot se reducen a la condición $[p] = 0$, es decir la presión es invariante a través de una discontinuidad de contacto. Esta es la única restricción termodinámica presente, pudiendo ser discontinuos cualesquiera de las restantes variables que describen el estado termodinámico del fluido.

3.4 Problema de Riemann

Finalizamos este capítulo introduciendo el problema de Riemann de las ecuaciones de Euler 1D, es decir el problema de valores iniciales

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial x} = \mathbf{0} \quad (3.26a)$$

$$\mathbf{u}_0(x) = \mathbf{u}_L \ (x < 0), \quad \mathbf{u}_0(x) = \mathbf{u}_R \ (x > 0) \quad (3.26b)$$

donde

$$\mathbf{u} = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho \mathbf{v} \\ E \end{bmatrix}, \quad \mathbf{f} = \begin{bmatrix} \rho \mathbf{v} \\ \rho \mathbf{v}^2 + p \\ (E + p)\mathbf{v} \end{bmatrix} \quad (3.27)$$

donde \mathbf{v} denota la velocidad unidimensional del flujo.

De acuerdo a lo expuesto en la Sección §2.4, la solución del problema de Riemann para las ecuaciones de Euler 1D consiste en cuatro estados adyacentes $\{\mathbf{u}_L, \mathbf{u}_L^*, \mathbf{u}_R^*, \mathbf{u}_R\}$ ordenados de acuerdo a la convención utilizada en el el Lema §2.6. Los estados adyacentes $(\mathbf{u}_L, \mathbf{u}_L^*)$ y $(\mathbf{u}_R^*, \mathbf{u}_R)$ pueden ser conectados bien a través de una onda de rarefacción o bien a través de una onda de choque que satisfacen las propiedades ya vistas. Los estados $(\mathbf{u}_L^*, \mathbf{u}_R^*)$ separados por el campo linealmente degenerado sólo pueden ser conectados a través de una discontinuidad de contacto. Debido a que a través de la discontinuidad de contacto se satisfacen $\mathbf{v}_L^* = \mathbf{v}_R^* = \mathbf{v}^*$ y $p_L^* = p_R^* = p^*$ el problema de encontrar los estados intermedios \mathbf{u}_L^* y \mathbf{u}_R^* dados los estados iniciales $\mathbf{u}_L, \mathbf{u}_R$ se puede reducir a encontrar la intersección (\mathbf{v}^*, p^*) de las dos ondas que pasan por los estados \mathbf{u}_L y \mathbf{u}_R en el plano (\mathbf{v}, p) tal como se muestra en la Fig. 3.1.

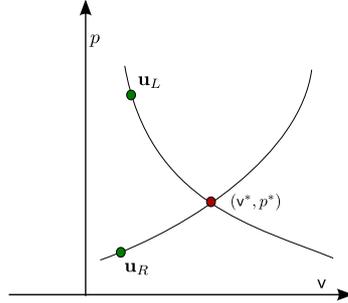


Figura 3.1: Intersección de ondas en la solución del problema de Riemann en el plano presión-velocidad.

Este problema ha sido extensivamente estudiado en el caso particular en que el fluido se considera un gas calórico perfecto, veáse por ejemplo [10]. En el caso de una ecuación de estado arbitraria [8] demuestra la unicidad y existencia de la solución del problema de Riemann para una ecuación de estado que satisface la condición:

$$\left(\frac{\partial p}{\partial v} \right)_e \geq \frac{p^2}{2e}$$

Es sencillo mostrar que esta condición se satisface para un gas térmicamente perfecto de composición química constante. Asumimos que esta propiedad no es afectada por el

cambio en la composición química del gas. Diversas técnicas de solución iterativa del problema de Riemann han sido propuestas [1, 4, 7]. A continuación exponemos una adaptación de la técnica presente en [4] que asume a priori un método independiente de cálculo de las propiedades termodinámicas del fluido en forma similar al método propuesto en [1].

El método consiste básicamente en resolver la ecuación

$$\mathbf{v}_L^*(p^*) - \mathbf{v}_R^*(p^*) = 0 \quad (3.28)$$

Comenzando por un valor tentativo de p^* se verifica (3.28). Si no se satisface entonces se corrige la presión por un nuevo valor. En [4] se propone entre otros métodos iterativos el método de la secante para corregir la presión

$$p^{*\nu+1} = p^{*\nu} - (\mathbf{v}_R^{*\nu} - \mathbf{v}_L^{*\nu}) \left[\frac{|p^{*\nu} - p^{*\nu-1}|}{|\mathbf{v}_L^{*\nu} - \mathbf{v}_L^{*\nu-1}| + |\mathbf{v}_R^{*\nu} - \mathbf{v}_R^{*\nu-1}|} \right] \quad (3.29)$$

donde ν indica el paso en la iteración.

Dado un valor de p^* el procedimiento para obtener el valor de \mathbf{v}_i para $i = \{L, R\}$ dependerá de si $p^* > p_i$ que es el caso donde se tiene una onda de choque o bien si $p^* < p_i$ en cuyo caso los estados \mathbf{u}_i y \mathbf{u}_i^* se encuentran conectados por una onda de rarefacción. Sea entonces el caso donde $p^* > p_i$. La función de entalpía $h_{\mathcal{H}}$ a lo largo de la curva de Hugoniot que pasa por los estados $\mathbf{u}_i : i = \{L, R\}$ se puede escribir como

$$h_{\mathcal{H}}(\rho_i^*, p^*) = h(\rho_i, p_i) + (p^* - p_i) \frac{\rho_i^* + \rho_i}{\rho_i^* \rho_i} \quad (3.30)$$

Asumáse que se dispone de un método independiente para obtener $h(\rho, p)$. Sea $p^* > p_i$ dado. Entonces la intersección de las curvas $h_{\mathcal{H}}(\rho_i^*, p^*)$ y de la curva isóbara $h(\rho_i^*, p^*)$ representa el único estado termodinámico que satisface las condiciones de Rankine–Hugoniot y de choque simultáneamente. Esta intersección puede encontrarse resolviendo, por ejemplo, mediante el método iterativo de la secante la raíz de la función

$$u(\rho_i^*) = h_{\mathcal{H}}(\rho_i^*, p^*) - h(\rho_i^*, p^*) \quad (3.31)$$

Una vez encontrado el valor de ρ_i^* y manipulando las condiciones de Rankine–Hugoniot

(3.16a) y (3.16b) se obtiene la velocidad de la onda de choque σ_i mediante

$$\sigma_i = \mathbf{v}_i \mp \sqrt{\frac{\rho_i^*}{\rho_i} \left(\frac{p_i - p^*}{\rho_i - \rho_i^*} \right)} \quad (3.32)$$

donde $i = L \rightarrow -, i = R \rightarrow +$ Entonces de (3.16a) se obtiene la velocidad buscada

$$\mathbf{v}_i^* = \frac{\rho_i}{\rho_i^*} (\mathbf{v}_i - \sigma_i) + \sigma_i \quad (3.33)$$

Supongamos ahora el caso $p^* < p_i$. Entonces la onda que conecta los estados \mathbf{u}_i y \mathbf{u}_i^* es una onda de rarefacción. Como s es constante a través de la onda, si asumimos nuevamente que tenemos un método independiente para obtener $\rho_i^*(p^*, s_i)$ entonces la velocidad \mathbf{v}^* puede ser obtenida integrando el invariante de Riemann a entropía constante

$$\mathbf{v}^* = \mathbf{v}_i \mp \int_{\rho_i}^{\rho_i^*} \rho^{-1} c(\rho, s_i) d\rho \quad (3.34)$$

donde ($i = L \rightarrow -, i = R \rightarrow +$)

Esta integración puede ser realizada en forma numérica si asumimos que $c(\rho, s_i)$ puede ser obtenido mediante un método independiente o bien mediante una expresión analítica aproximada o exacta.

BIBLIOGRAFIA

- [1] ANDERSON, J. D. *Hypersonic and High Temperature Gas Dynamics*. McGraw–Hill Book Co., 1989.
- [2] BETHE, H. The theory of shock waves for an arbitrary equation of state. *Clearinghouse for Federal Scientific and Technical Information*, Report No. B-32189 (1942).
- [3] CALLEN, H. B. *Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics*, second ed. Wiley, New York, 1985.
- [4] COLELLA, P., AND GLAZ, H. M. Efficient solution algorithms for the Riemann problem for real gases. *JCP* 59 (1985), 264–289.
- [5] HARTEN, A., LAX, P. D., LEVERMORE, C. D., AND MOROKOFF, W. J. Convex entropies and hyperbolicity for general Euler equations. *SIAM Journal on Numerical Analysis* 35 (1998), 2117 – 2127.
- [6] MENIKOFF, R., AND PLOHR, J. B. The Riemann problem for fluid flow of real materials. *Reviews of Modern Physics* 61 (1989), 75–130.
- [7] SAUREL, R., LARINI, M., AND LORAUD, J. C. Exact and approximate Riemann solvers. *Journal of Computational Physics* 112 (1994), 126–137.
- [8] SMITH, R. G. The Riemann problem in gas dynamics. *Transactions of the American Mathematical Society* 249, 1 (1979), 1–50.
- [9] TER HORST, H. Fundamental functions in equilibrium thermodynamics. *Annals of Physics* 176, 2 (1987), 183 – 217.

- [10] TORO, E. *Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics - A Practical Introduction*, third ed. Springer-Verlag, 2009.
- [11] WEYL, H. Shock waves in arbitrary fluids. *Communications on Pure and Applied Mathematics II*, 2-3 (1949), 103–122.

4.1 Condiciones de equilibrio termodinámico

El cálculo del equilibrio químico es esencialmente un problema que se reduce a la solución de ecuaciones que son derivadas a partir de principios de la termodinámica clásica. En esta sección se expone un resumen de la derivación de estas ecuaciones, las técnicas de solución numérica aplicadas y finalmente su implementación computacional adaptada a códigos de cálculo fluidodinámico.

Se dice que un sistema cerrado, es decir, aquel sistema que no intercambia masa con el exterior pero permiten el intercambio de energía y trabajo, se encuentra en **equilibrio termodinámico** cuando sus parámetros termodinámicos no se modifican con el transcurso del tiempo. Este concepto general de equilibrio termodinámico implica la coexistencia de tres equilibrios particulares a saber: equilibrio mecánico, equilibrio térmico y equilibrio químico. Se dice que un sistema cerrado está en **equilibrio mecánico** cuando la presión tiene el mismo valor en todas partes del sistema, o bien una distribución suave constante en el tiempo. En forma análoga se dice que un sistema se encuentra en **equilibrio térmico** cuando la temperatura es única en todo el sistema y constante en el tiempo. Finalmente, se dice que un sistema está en **equilibrio químico** cuando su composición química no se modifica, es decir que considerado macroscópicamente no existen reacciones químicas entre las sustancias que lo componen.

Sea entonces un sistema cerrado que se encuentra a una presión p y una temperatura T únicas, de energía interna total E , volumen \mathcal{V} y entropía total S . El primer y segundo principio de la termodinámica aplicado a este sistema se expresan a través de la forma

general de la *ecuación fundamental de la termodinámica*

$$-dE - pd\mathcal{V} + TdS \geq 0 \quad (4.1)$$

La igualdad en (4.1) es válida sólo cuando el sistema se encuentra en estado de equilibrio termodinámico. Por otro lado la desigualdad indica la condición de espontaneidad de una dada transformación termodinámica, es decir la posibilidad física de que dicha transformación ocurra. Se introduce la definición de dos funciones de estado termodinámicas:

La **energía libre de Gibbs**,

$$G \equiv H - TS = E + p\mathcal{V} - TS \quad (4.2)$$

y la **energía libre de Helmholtz**,

$$A \equiv E - TS \quad (4.3)$$

Consideremos ahora una transformación a volumen y temperatura constante. Diferenciando A e introduciendo (4.1) y las condiciones $dT = d\mathcal{V} = 0$ se obtiene

$$dA \leq 0$$

Es decir, la energía libre de Helmholtz siempre disminuye en un proceso a temperatura y volumen constante, alcanzando un valor mínimo en el estado de equilibrio. Si en cambio consideramos un proceso a volumen y energía interna constante, lo que equivale a considerar un sistema aislado, entonces (4.1) se reduce a

$$TdS \geq 0$$

De donde se extrae que para un sistema aislado que sufre una transformación fuera del equilibrio la entropía del sistema siempre aumenta hasta alcanzar un valor máximo en el estado de equilibrio termodinámico. Igualmente, en transformaciones donde se considera \mathcal{V} y S constantes (4.1) se reduce a

$$dE \leq 0$$

En forma análoga se pueden establecer criterios de espontaneidad y equilibrio para transformaciones a presión y temperatura o entalpía o entropía constantes. Los resultados que

así se obtienen se pueden resumir en la siguiente tabla.

Tipo de transformación	Condición de espontaneidad	Condición de equilibrio
$(\mathcal{V}, T)_{\text{cte}}$	$dA \leq 0$	$dA = 0$
$(\mathcal{V}, E)_{\text{cte}}$	$dS \geq 0$	$dS = 0$
$(\mathcal{V}, S)_{\text{cte}}$	$dE \leq 0$	$dE = 0$
$(p, T)_{\text{cte}}$	$dG \leq 0$	$dG = 0$
$(p, H)_{\text{cte}}$	$dS \geq 0$	$dS = 0$
$(p, S)_{\text{cte}}$	$dH \leq 0$	$dH = 0$

Tabla 4.1: Condiciones de espontaneidad y equilibrio para diferentes tipos de transformaciones.

Hasta aquí se han discutido sistemas de composición fija. Levantemos esta restricción y supongamos que nuestro sistema se encuentra formado por ns especies cuya cantidad de masa o número de moles es variable debido a la presencia de reacciones químicas entre las especies, manteniéndose constante la masa total del sistema. En este caso la energía interna total puede ser expresada como

$$E = E(\mathcal{V}, S, \mathcal{N}_1, \dots, \mathcal{N}_{ns})$$

donde \mathcal{N}_i es el número de moles de la especie i y \mathcal{V} es el volumen total del sistema. Diferenciando E y utilizando (4.1) se obtiene

$$dE = TdS - pd\mathcal{V} + \sum_{i=1}^{ns} \mu_i d\mathcal{N}_i$$

donde se ha introducido el **potencial químico molar** μ_i de la especie i dado por

$$\mu_i \equiv \left(\frac{\partial E}{\partial \mathcal{N}_i} \right)_{\mathcal{V}, S, \mathcal{N}_j, j \neq i} \quad (4.4a)$$

El subíndice $j, j \neq i$ en (4.4a) denota que la masa de todas las especies excepto la especie i permanece constante al calcular la derivada, es decir el potencial químico μ_i indica la tasa de cambio de la energía interna con respecto al número de moles de la especie i . Nótese que debido a que μ_i es la derivada de una variable extensiva respecto a otra es una propiedad intensiva del sistema.

Utilizando las transformaciones que relacionan las funciones de estado (E, H, F, G, S)

es posible demostrar sencillamente las igualdades,

$$\begin{aligned}\mu_i &= \left(\frac{\partial A}{\partial \mathcal{N}_i} \right)_{\mathcal{V}, T, \mathcal{N}_{j, j \neq i}} = \left(\frac{\partial G}{\partial \mathcal{N}_i} \right)_{p, T, \mathcal{N}_{j, j \neq i}} = \left(\frac{\partial H}{\partial \mathcal{N}_i} \right)_{p, S, \mathcal{N}_{j, j \neq i}} \\ &= -T \left(\frac{\partial S}{\partial \mathcal{N}_i} \right)_{\mathcal{V}, E, \mathcal{N}_{j, j \neq i}} = -T \left(\frac{\partial S}{\partial \mathcal{N}_i} \right)_{p, H, \mathcal{N}_{j, j \neq i}}\end{aligned}\quad (4.4b)$$

De cada una de estas igualdades se deduce que para cualquiera de los tipos de transformación mencionados en la Tabla 4.1 la condición de equilibrio termodinámico para sistemas de composición química variable se reducen a:

$$\sum_{i=1}^{ns} \mu_i d\mathcal{N}_i = 0 \quad (4.5)$$

Es sencillo demostrar ahora que en un sistema en equilibrio termodinámico, el potencial químico tiene el mismo valor en todas partes del sistema. En efecto considérese un sistema para el cual μ_i tiene valores distintos μ_i^A y μ_i^B en dos regiones separadas A y B , siendo $\mu_i^A > \mu_i^B$. Supóngase que se intercambian $d\mathcal{N}_i$ moles de la especie i de la región A a la región B manteniendo T y p constantes. Entonces el cambio total en la energía de Gibbs del sistema es la suma de los cambios en las regiones A y B , es decir

$$\begin{aligned}dG &= dG^A + dG^B = \mu_i^A (-d\mathcal{N}_i) + \mu_i^B d\mathcal{N}_i \\ &= (\mu_i^B - \mu_i^A) d\mathcal{N}_i\end{aligned}$$

Como $\mu_i^A > \mu_i^B$ esta transformación disminuye la energía de Gibbs del sistema y por lo tanto ocurre de forma espontánea. Este flujo de masa de la región de mayor potencial químico a la de menor continua hasta que el valor de μ_i es uniforme en todo el sistema.

Entonces, debido a que μ_i es uniforme en un sistema en equilibrio termodinámico es posible introducir el funcional

$$\mathcal{T}_{(\mathcal{W}, \mathcal{Z})} \equiv \sum_{i=1}^{ns} \int_0^{\mathcal{N}_i} \mu_i d\mathcal{N}_i = \sum_{i=1}^{ns} \mu_i \mathcal{N}_i \quad (4.6)$$

donde los subíndices $(\mathcal{W}, \mathcal{Z})$ indica que la integración se realiza manteniendo las variables de estado $(\mathcal{W}, \mathcal{Z})$ constantes. Por ejemplo, $\mathcal{T}_{(\mathcal{V}, T)}$ es equivalente a la expresión de la energía de Gibbs a (\mathcal{V}, T) constantes.

Por lo tanto el criterio de equilibrio cuando $(\mathcal{W}, \mathcal{Z})$ equivale a cualquiera de los

procesos de la Tabla 4.1, consiste en encontrar los valores de \mathcal{N}_i que minimicen $\mathcal{T}_{(\mathcal{W}, \mathcal{Z})}$.

4.2 Cálculo de las condiciones de equilibrio químico

El problema de minimización de $\mathcal{T}_{(\mathcal{W}, \mathcal{Z})}$ se resuelve utilizando principalmente dos familias de técnicas: *la formulación estequiométrica* y *la formulación no estequiométrica* [12]. La primera de estas hace uso de la forma diferencial (4.5) y de las relaciones estequiométricas de las reacciones químicas presentes. La segunda busca el mínimo del funcional $\mathcal{T}_{(\mathcal{W}, \mathcal{Z})}$ sujeto a la restricción de conservación de masa del sistema, sin recurrir a la introducción de relaciones estequiométricas. Esta formulación es de uso conveniente cuando el número de especies es mayor a dos veces el número de elementos presentes en el sistema [12]. Se asume que la composición química de los gases que son el objetivo del esquema numérico desarrollado satisfacen esta restricción y por lo tanto se utiliza la formulación no estequiométrica para el cálculo del equilibrio químico.

4.2.1 Formulación no estequiométrica

La formulación no estequiométrica para calcular las condiciones de equilibrio químico en sistemas que sufren una transformación manteniendo las variables de estado $(\mathcal{W}, \mathcal{Z})$ constantes consiste en minimizar el funcional $\mathcal{T}(\mathcal{W}, \mathcal{Z})$ definido en (4.6) por unidad de masa del sistema, sujeto a la ecuación de conservación de masa

$$\sum_{j=1}^{ns} a_{ij} n_j - b_i^\circ = 0, \quad (i = 1, \dots, \ell) \quad (4.7)$$

donde a_{ij} son los números de kilogramos del elemento i por mol de la especie j , n_j es el número de moles de la especie j por kilogramo de la mezcla, b_i° es el total de kilogramos del elemento i por kilogramo de la mezcla, y ℓ es el número de elementos químicos presentes.

La técnica consiste básicamente en utilizar el método de los multiplicadores de Lagrange para resolver este problema de optimización con restricciones [14]. Primero se escribe el lagrangiano

$$\mathcal{L}(\mathbf{n}, \boldsymbol{\lambda}) = \sum_{i=1}^{ns} \mu_i n_i + \sum_{k=1}^{\ell} \lambda_k \left(\sum_{i=1}^{ns} a_{ki} n_i - b_k^\circ \right) \quad (4.8)$$

donde $\boldsymbol{\lambda}$ es un vector de ℓ desconocidos multiplicadores de Lagrange $\boldsymbol{\lambda} = (\lambda_1, \dots, \lambda_\ell)$ y \mathbf{n}

es en este caso el vector cuya i -ésima componente es el número de moles por kilogramo de la especie i . El problema de optimización con restricciones se reduce entonces a resolver el sistema de $(ns + \ell)$ ecuaciones con $(ns + \ell)$ incógnitas $(\mathbf{n}, \boldsymbol{\lambda})$

$$\left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial n_i}\right)_{\boldsymbol{\lambda}, n_{j,j \neq i}} = \mu_i - \sum_{k=1}^{\ell} a_{ki} \lambda_k = 0 \quad (4.9a)$$

$$\left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \lambda_k}\right)_{\mathbf{n}, \lambda_{j,j \neq k}} = b_k^\circ - \sum_{i=1}^{\ell} a_{ki} n_i = 0 \quad (4.9b)$$

La solución del sistema (4.9) requiere la introducción de una expresión apropiada del potencial químico. A continuación se deriva la expresión que se obtiene para μ_i cuando se considera que el sistema es una mezcla de gases térmicamente perfectos.

4.2.2 Expresión para el potencial químico

De acuerdo a lo expuesto en la Sección §3.1.1, en esta tesis se asume que el sistema en estudio es una mezcla de gases térmicamente perfectos, es decir que satisfacen la ecuación de estado de los gases ideales

$$pv = nRT \quad (4.10)$$

Siguiendo ahora la convención de la literatura utilizamos la segunda de las igualdades presentes en 4.4b

$$\mu_i = \left(\frac{\partial G}{\partial \mathcal{N}_i}\right)_{p,T, \mathcal{N}_{j,j \neq i}} = \left(\frac{\partial g}{\partial n_i}\right)_{p,T, n_{j,j \neq i}}$$

donde g es la energía libre específica (por unidad de masa) de Gibbs. Diferenciando la definición de $g = h - Ts$, e introduciendo 4.1 se obtiene la siguiente relación de Maxwell

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial \mu_i}{\partial p}\right)_{T, \mathbf{n}} &= \left(\frac{\partial}{\partial n_i} \left(\frac{\partial g}{\partial p}\right)_{T, \mathbf{n}}\right)_{p,T, n_{j,j \neq i}} \\ &= \left(\frac{\partial v}{\partial n_i}\right)_{p,T, n_{j,j \neq i}} = \bar{v}_i \end{aligned} \quad (4.11)$$

donde \bar{v}_i es el volumen específico molar parcial de la especie i en el sistema.

Considerando una sustancia pura podemos integrar (4.11) a temperatura constante

e introduciendo (4.10) se obtiene

$$\mu(T, p) = \mu(T, p^\circ) + RT \ln p \quad (4.12)$$

donde p° es un valor de presión estándar.

$\mu^\circ(T) \equiv \mu(T, p^\circ)$ es el denominado *potencial químico estándar*. Para transformaciones a (p, T) constantes puede escribirse en términos de energía molar como

$$\mu^\circ(T) = \frac{g(T, p^\circ)}{n} = h(T, p^\circ) - Ts_{T, p^\circ} \equiv h^\circ(T) - Ts^\circ(T) \quad (4.13)$$

donde $h^\circ(T)$ es la *entalpía específica molar estándar* y $s^\circ(T)$ la *entropía específica molar estándar* a la presión p° .

En un sistema formado por una mezcla de gases térmicamente perfectos la ecuación (4.12) sugiere una expresión de la forma

$$\mu_i = \mu_i^\circ(T) + RT \ln p_i \quad (4.14)$$

$\mu_i^\circ(T)$ es nuevamente el potencial químico estándar de la especie i y p_i es la presión parcial de la especie i en la mezcla dada por,

$$p_i = \frac{n_i}{n} p \quad (4.15)$$

Es sencillo demostrar que la expresión (4.14) es consistente con la ecuación de gases ideales de la mezcla. De esta manera se obtiene la expresión del potencial químico de una mezcla de gases térmicamente perfectos, adecuada para ser utilizada en la solución del sistema no lineal (4.9) cuando se consideran (p, T) o (v, T) constantes.

$$\mu_i = \mu_i^\circ(T) + RT \left(\ln \frac{n_i}{n} + \ln p \right) = \mu_i^\circ(T) + RT \left(\ln n_i + \ln \frac{RT}{v} \right) \quad (4.16)$$

Para las restantes transformaciones presentes en la Tabla 4.1 la temperatura es una incógnita del sistema (4.9). Por lo tanto se adiciona al lagrangiano (4.8) y por ende al sistema (4.9) la ecuación de restricción que brinda el valor asignado de energía interna, entropía o entalpía de la mezcla.

4.3 Solución numérica del equilibrio químico. El programa CEA2

Se han desarrollado varios algoritmos basados en la formulación no estequiométrica descrita anteriormente. Una exposición exhaustiva de estos se presenta en [12]. En esta tesis se utiliza la modificación de la formulación no estequiométrica presentada en [5]. Esta, resuelve el sistema de ecuaciones no lineales de la formulación no estequiométrica considerando una mezcla de gases térmicamente perfectos y aplicando el método de Newton-Raphson para la solución del sistema (4.9). Se realiza un proceso de sustitución de variables que permite reducir el sistema de ecuaciones a un tamaño de $(\ell+1) \times (\ell+1)$.

Este algoritmo ha sido implementado en el programa CEA2 (*Chemical Equilibrium with Applications*) [3, 4] desarrollado por NASA–Glenn Research Center. En general dicho programa considera además de mezcla de gases ideales, fases condensadas puras, si bien estas no son de aplicación en este trabajo.

Los datos de entrada de CEA2 son la definición de la composición química del gas y la definición de dos variables de estado termodinámico que pueden ser cualquiera de las combinaciones presentes en la Tabla 4.1. Una vez obtenida la composición en el equilibrio químico, el programa brinda el valor de las funciones termodinámicas energía interna, entalpía, energía libre de Gibbs y entropía de los productos. Además de estas se obtienen el exponente isoentrópico, la velocidad del sonido, el calor específico a presión constante, la viscosidad, número de Prandtl y la conductividad térmica de la mezcla. El procedimiento general de cálculo de estas propiedades se describe en detalle en [1].

La base de datos termodinámicos que utiliza CEA2 para definir las propiedades termodinámicas de los reactivos y productos proviene de diferentes fuentes, [2, 6, 8, 10]. Esta base de datos incluye los datos termodinámicos de 52 elementos de referencia, obtenida usando el programa PAC91 descrito en [9]. En esta base de datos para cada especie la función termodinámica calor específico $C_P^\circ = \left(\frac{\partial H}{\partial T}\right)_{p^\circ}$ a la presión de referencia $p^\circ = 1\text{atm}$, es expresada como una expansión polinómica de mínimos cuadrados en la forma

$$\frac{C_P^\circ}{R} = \sum_{j=1}^4 a_j T^{j-3}$$

Los polinomios para las funciones de entalpía y entropía a la presión de referencia a partir de

$$\frac{H^\circ}{RT} = \frac{\int C_P^\circ dT}{RT}, \quad \frac{S^\circ}{R} = \int \frac{C_P^\circ}{RT} dT$$

Las coeficientes de las expansiones polinómicas de C_P° , H° y S° son obtenidos en forma simultánea. El ajuste es realizado de tal forma de brindar el valor exacto a la temperatura

de referencia $T = 298.15K$. Estas expansiones polinómicas son consideradas aplicables en un rango de 200 K a 20000 K.

4.3.1 Implementación computacional

Con el objetivo de implementar computacionalmente el programa CEA2 en códigos de cálculo fluidodinámico, Scarpin [11] desarrolló una subrutina en lenguaje FORTRAN, denominada *Subrutina de Equilibrio Termoquímico* (SET), la cual permite el llamado al programa CEA2 y la obtención de sus resultados en forma sistemática y durante el tiempo de cálculo.

Como se ha visto, el cálculo del equilibrio químico mediante CEA2 (SET) requiere la resolución iterativa de un sistema de ecuaciones y la llamada a librerías de datos termodinámicos externos. Este procedimiento puede considerarse de tiempo despreciable si se necesitan unas pocas llamadas a esta subrutina. No obstante, en el contexto particular de un esquema de cálculo fluidodinámico, y anticipándonos al capítulo siguiente, las propiedades del equilibrio químico del fluido deben ser obtenidas en cada celda computacional para cada paso de tiempo de cálculo lo cuál aumenta significativamente el tiempo computacional requerido. Con el fin de reducir este costo computacional, se utilizan generalmente curvas de interpolación tales como las curvas de Tannehill [13] o métodos de reducción del número de ecuaciones para resolver el equilibrio químico[7] siendo ambas únicamente de aplicación cuando el gas considerado es aire. Con el fin de extender las capacidades del código desarrollado al flujo de gases con composición arbitraria sin recurrir al cálculo del equilibrio químico en forma directa con CEA2, se ha optado por obtener una base de datos de valores de las propiedades termodinámicas necesarias para calcular el flujo numérico, y luego aplicar un procedimiento de interpolación de las mismas durante el tiempo de cálculo. Como se mostrará más adelante, los resultados obtenidos mediante esta metodología permiten obtener una mayor precisión en comparación con las curvas de Tannehill a un costo computacional comparable.

4.3.1.1 Obtención de la base de datos

La base de datos se encuentra almacenada en una matriz que denominaremos \mathcal{C}^{SET} cuyos elementos son una estructura de datos con cuatro componentes: presión, energía interna y las derivadas termodinámicas γ y κ que, tal como se mostrará en el próximo capítulo, son todas las propiedades termodinámicas obtenidas del equilibrio químico necesarias en el esquema de cálculo fluidodinámico. Las variables de entrada con la cual

se obtienen los elementos de la matriz son la densidad y la temperatura. Sea entonces $c_{i,j}^{SET}$ un elemento de la matriz \mathcal{C}^{SET} . Las propiedades termodinámicas de este elemento son obtenidas a partir de valores de densidad y temperatura dados por la siguiente regla de asignación:

$$\begin{aligned} T_i &= T_{min} + (i - 1)\Delta T \\ \rho_j &= [1 + (m - 1)\Delta\rho] 10^n \\ j &= m + (n - n_0)N_\rho \\ m &= (1, 2, \dots, N_\rho) \quad ; \quad n = (n_0, n_0 + 1, \dots, n_{m\acute{a}x}) \\ i &= (1, 2, \dots, N_T) \quad ; \quad j = (1, 2, \dots, N_\rho(1 + n_{m\acute{a}x} - n_0)) \end{aligned}$$

donde

$$\Delta\rho = \frac{9}{N_\rho}, \quad \Delta T = \frac{T_{m\acute{a}x} - T_{m\acute{i}n}}{N_T - 1} \quad (4.18)$$

Nótese que la densidad presenta una discretización lineal en una escala logarítmica. Esto se debe a que las funciones termodinámicas poseen generalmente una dependencia aproximadamente lineal entre sí cuando son expresadas en esta escala [13]. En consecuencia los elementos de \mathcal{C} también son almacenados en forma logarítmica.

4.3.1.2 Interpolación

En el caso de las ecuaciones de Euler interesa obtener particularmente las propiedades termodinámicas dadas como variables dato la densidad y la energía interna debido a que estas son las que pueden explicitarse a partir del vector de variables conservativas. Dados entonces como datos de entrada los valores de densidad y energía interna, las propiedades termodinámicas del equilibrio químico correspondientes a este estado son obtenidas mediante un proceso de interpolación lineal de los valores almacenados en \mathcal{C}^{SET} . Este proceso de interpolación utiliza la propiedad de que la energía interna del fluido es una función monótonamente creciente con respecto a la temperatura a densidad constante y consiste básicamente en la aplicación del siguiente procedimiento.

Dado un valor ρ de densidad de entrada se ubica j tal que se satisface

$$\log(\rho_j) \leq \log(\rho) \leq \log(\rho_{j+1})$$

Se mapea el intervalo $[\log(\rho_j), \log(\rho_{j+1})]$ en el intervalo $[0, 1]$. Se encuentra la ubicación

de $\log(\rho)$ en este intervalo a través de una variable auxiliar ξ definida mediante

$$\xi(\rho) = \frac{\log(\rho) - \log(\rho_j)}{\log(\rho_{j+1}) - \log(\rho_j)}$$

Sea entonces e el valor de la energía interna dada como dato. Se buscan entonces los valores de i_L e i_R que satisfagan las siguientes condiciones respectivamente

$$\begin{aligned} \log(e_{i_L,j}) &\leq \log(e) \leq \log(e_{i_L+1,j}) \\ \log(e_{i_R,j+1}) &\leq \log(e) \leq \log(e_{i_R+1,j+1}) \end{aligned}$$

donde $e_{i,j}$ son los valores de energía interna almacenados en el elemento $c_{i,j}$ de \mathcal{C}^{SET} . Se mapean los intervalos $[\log(e_{i_L,j}), \log(e_{i_L+1,j})]$ y $[\log(e_{i_R,j}), \log(e_{i_R+1,j})]$ en los intervalos $[0, 1]_L$ y $[0, 1]_R$ respectivamente. Se definen dos variables auxiliares η_L y η_R para encontrar la ubicación de $\log(e)$ en los intervalos $[0, 1]_L$ y $[0, 1]_R$ respectivamente mediante,

$$\begin{aligned} \eta_L(e) &= \frac{\log(e) - \log(e_{i_L,j})}{\log(e)_{i_L+1,j} - \log(e_{i_L,j})} \\ \eta_R(e) &= \frac{\log(e) - \log(e_{i_R,j})}{\log(e)_{i_R+1,j} - \log(e_{i_R,j})} \end{aligned}$$

Finalmente para encontrar el valor de una variable termodinámica β siendo β una de las variables almacenadas en \mathcal{C}^{SET} (en forma logarítmica) se procede a interpolar linealmente los valores en dos etapas. Primero a lo largo de las direcciones η_L y η_R

$$\begin{aligned} \beta_L &= \beta_{i_L,j}(1 - \eta_L) + \beta_{i_L+1,j}\eta_L \\ \beta_R &= \beta_{i_R,j+1}(1 - \eta_R) + \beta_{i_R+1,j+1}\eta_R \end{aligned}$$

Y por último a lo largo de la dirección ξ

$$\beta = \beta_L(1 - \xi) + \beta_R\xi$$

4.3.1.3 Resultados

Con el fin de validar el procedimiento de interpolación descrito, se ha realizado una comparación de los resultados obtenidos mediante este, las curvas de Tannehill y el cálculo directo con SET, considerando a estos últimos como los valores exactos de las propiedades del equilibrio químico.

El procedimiento de validación comprende como datos de entrada valores de densida-

des y temperaturas aleatorios que cubren todo el rango de la matriz \mathcal{C}^{SET} . La cantidad total de resultados muestreados es igual a 10000.

Se comparan los resultados obtenidos mediante la interpolación a partir de tres bases de datos \mathcal{C}^{SET} cuyos parámetros se presentan en la Tabla 4.2.

	N_T	N_ρ	n_0	$n_{\text{máx}}$	$\rho_{\text{mín}}$	$\rho_{\text{máx}}$	$T_{\text{mín}}$	$T_{\text{máx}}$	ΔT	Tamaño
\mathcal{C}_I^{SET}	100	1	-7	4	$10^{-7} \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$	$10^4 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$	200 K	20000 K	200 K	100×12
\mathcal{C}_{II}^{SET}	199	2	-7	4	$10^{-7} \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$	$10^4 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$	200 K	20000 K	100 K	199×24
\mathcal{C}_{III}^{SET}	397	4	-7	4	$10^{-7} \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$	$10^4 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$	200 K	20000 K	50 K	397×48

Tabla 4.2: Validación del procedimiento de interpolación.
Parámetros de las bases de datos utilizadas.

En las Figs. 4.1 y 4.2 se presenta la distribución de los errores porcentuales obtenidos con las tres bases de datos, y las curvas de Tannehill para la presión y el coeficiente politrópico γ , donde el error porcentual se define mediante,

$$\text{error}(\theta) = \frac{\theta - \theta_{SET}}{\theta_{SET}} 100$$

siendo θ_{SET} el valor obtenido aplicando en forma directa la subrutina SET.

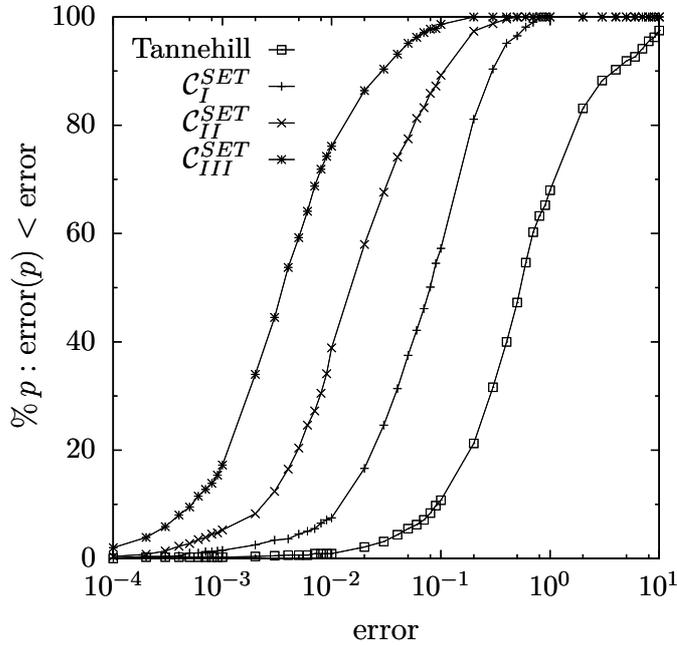


Figura 4.1: Validación del procedimiento de interpolación.
Distribución acumulada del error de la presión.

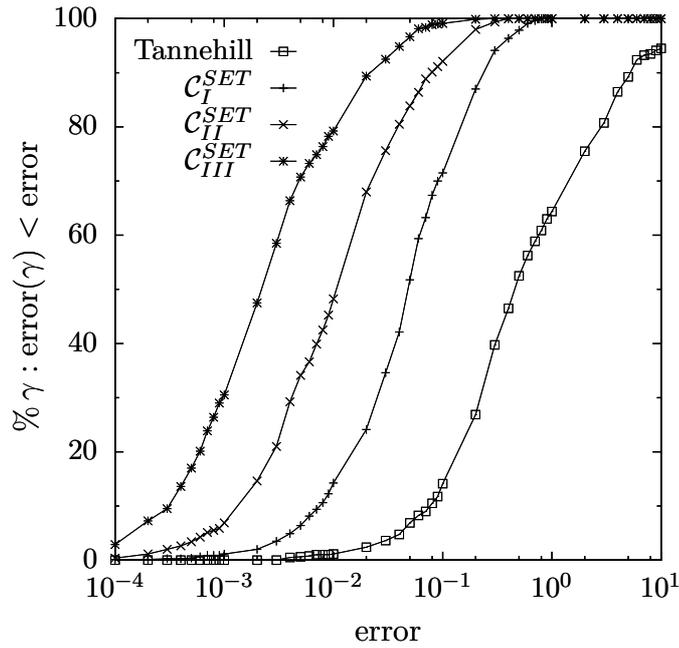


Figura 4.2: Validación del procedimiento de interpolación. Distribución acumulada del error del coeficiente politrópico γ .

Los resultados obtenidos muestran como el proceso de interpolación propuesto posee aproximadamente un orden mayor de precisión que las curvas de Tannehill utilizando la base de datos con menor número de elementos C_I^{SET} . Asimismo se observa que al aumentar cuatro veces los números de valores de las bases de datos se logra una reducción del error aproximadamente igual a un orden de magnitud.

Para finalizar este apartado se analiza la eficiencia del proceso de interpolación comparando a esta tanto con las curvas de Tannehill como con el cálculo directo mediante SET. Con este fin se realiza la comparación del tiempo computacional requerido para calcular un total de 100000 estados de equilibrio químico dentro de un ciclo loop, tomando como referencia el tiempo utilizado por las curvas de Tannehill. Los experimentos numéricos se realizaron en un procesador Intel Core 2 Duo T6500 2.1 GHz con 3GB RAM.

	C_I^{SET}	C_{II}^{SET}	C_{III}^{SET}	SET
$\frac{t}{t_{ref}}$	1.3	1.8	2.0	85.1

Tabla 4.3: Tiempo computacional requerido por el procedimiento de interpolación y la subrutina SET en comparación con las curvas de Tannehill.

Los resultados que se presentan en la Tabla 4.3 permiten mostrar que el procedi-

miento de interpolación disminuye en aproximadamente un orden de magnitud el tiempo computacional requerido en comparación al cálculo directo con SET. En comparación con la subrutina de Tannehill el tiempo computacional aumenta aproximadamente desde un 30 % a un 100 % en todos los casos.

Se puede concluir entonces que la metodología de interpolación propuesta a partir de los valores almacenados en una base de datos, aumenta la precisión de las propiedades del equilibrio químico en uno o más ordenes de magnitud, a un costo computacional comparable en todos los casos presentados. Presenta además la ventaja que este procedimiento puede ser extendido a gases con composición química arbitraria. Como desventaja se aumentan los requerimientos de memoria, el cual no obstante disminuye su importancia relativa al aumentar el tamaño computacional del problema fluidodinámico considerado.

BIBLIOGRAFIA

- [1] ANDERSON, J. D. *Hypersonic and High Temperature Gas Dynamics*. McGraw–Hill Book Co., 1989.
- [2] COX, J. D. Notation of states and processes, significance of the word "standard" in chemical thermodynamics, and remarks on commonly tabulated forms of thermodynamic functions. *Pure and Applied Chemistry* 54 (1982), 1239–1250.
- [3] GORDON, S., AND MCBRIDE, J. B. Computer program for calculation of complex equilibrium compositions and applications. Part I : Analysis. *NASA RP : 1311* (1994).
- [4] GORDON, S., AND MCBRIDE, J. B. Computer program for calculation of complex equilibrium compositions and applications. Part II : Users manual and program description. *NASA RP : 1311* (1996).
- [5] GORDON, S., ZELEZNIK, F. J., AND HUFF, V. S. A general method for automatic computation of equilibrium compositions and theoretical rocket performance of propellants. *NASA TN D-132* (1959).
- [6] GURVICH, L. V., VEYTS, I. V., AND ALCOCK, C. B. *Thermodynamic properties of individual substances. Pts. 1-2*, fourth ed., vol. 1. 1989.
- [7] IANNELLI, J. Direct computation of thermodynamic properties of chemically reacting air with consideration to CFD. *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 43 (2003), 369–406.
- [8] MARSH, K. N., DAS, A., FRENKEL, M., GADALLA, N. M., AND WILHOIT, R. C. TRC thermodynamic tables non-hydrocarbons, vols. I-VIII; and hydrocarbons, vols. I-XII. *Thermodynamics Research Center, Texas A&M University* (1998).

- [9] McBRIDE, B. J., AND GORDON, S. Computer program for calculating and fitting thermodynamic functions. *NASA RP-1271* (1992).
- [10] McBRIDE, B. J., GORDON, S., AND RENO, M. A. Thermodynamic data for fifty reference elements. *NASA TP-3287* (1993).
- [11] SCARPÍN, G. *Cálculo de las propiedades de mezclas de gases en equilibrio termodinámico. Aplicación a flujos no viscosos*. Tesis de Maestría, Univ Nac de Córdoba-Inst Univ Aeronáutico, 2006.
- [12] SMITH, W. R., AND MISSEN, R. W. *Chemical Reaction Equilibrium Analysis: Theory and Algorithms*. Krieger Publishing, 1991.
- [13] TANNEHILL, J. C., AND MUGGE, P. H. Improved curve fits for the thermodynamic properties of equilibrium air suitable for numerical computation using time dependent or shock-capturing methods.
- [14] WALSH, G. R. *Methods of Optimization*. John Wiley and Sons, 1975.

De acuerdo a lo expuesto en los capítulos anteriores, un esquema numérico aplicado a la solución de sistemas hiperbólicos debe contemplar la capacidad de converger a soluciones generalizadas que presenten discontinuidades tales como choques o discontinuidades de contacto. Dicha capacidad debe tener en consideración entre otras, la satisfacción en forma discreta de las propiedades de conservación de las ecuaciones originales, la captación precisa de discontinuidades en discretizaciones de tamaño computacionalmente adecuado, la ausencia de oscilaciones espurias en la cercanía de discontinuidades y la convergencia a las soluciones generalizadas físicamente admisibles. Dentro de los métodos que buscan satisfacer estas propiedades se encuentran los métodos que satisfacen la propiedad conocida como variación total disminuida (TVD). Este capítulo se enfoca en describir el método de volúmenes finitos conservativo TVD utilizado en esta tesis desarrollado por Harten [8] y luego generalizado por Yee [33].

5.1 Consideraciones preliminares

Considérese el problema de valores iniciales (IVP) para la ley de conservación escalar unidimensional en un dominio no acotado:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial f(u)}{\partial x} = 0, \quad -\infty < x < \infty, t > 0 \quad (5.1a)$$

$$u(0, x) = \phi(x), \quad (5.1b)$$

Se asume que la ley de conservación posee una función de entropía convexa $\eta(u)$ y un flujo de entropía $\Psi(u)$ en el sentido de la Definición §2.9

Sea una discretización del dominio espacial en celdas Ω_j de longitud Δx_j identificadas

mediante la regla de asignación

$$\Omega_j := [x_{j-\frac{1}{2}}, x_{j+\frac{1}{2}}], \quad \Delta x_j := x_{j+\frac{1}{2}} - x_{j-\frac{1}{2}}, \quad j \in \mathbb{Z} \quad (5.2)$$

Sea $\bar{u}(t, x)$ una *función constante a trozos*, o *función discreta*, que se define como

$$\bar{u}(t, x) = \bar{u}_j(t) \quad \text{si} \quad x_{j-\frac{1}{2}} < x < x_{j+\frac{1}{2}} \quad (5.3a)$$

$$\bar{u}_j(t) \equiv \int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}} u(x, t) dx \quad (5.3b)$$

Un esquema explícito en forma conservativa que aproxima (5.1) se escribe como

$$\bar{u}_j^{n+1} = \bar{u}_j^n - \frac{\Delta x_j}{\Delta t^{n+\frac{1}{2}}} (\bar{f}_{j+\frac{1}{2}} - \bar{f}_{j-\frac{1}{2}}) \quad (5.4a)$$

donde

$$\bar{f}_{j+\frac{1}{2}} = \bar{f}(\bar{u}_{j-k}^n, \dots, \bar{u}_{j+k}^n) \quad (5.4b)$$

es el denominado *flujo numérico* y donde

$$\bar{u}_j^n \equiv \bar{u}_j(t^n), \quad \Delta t^{n+\frac{1}{2}} \equiv t^{n+1} - t^n > 0, \quad t^0 = 0$$

Introducimos a continuación una serie de definiciones que nos permiten enunciar luego el teorema de convergencia de Lax-Wendroff.

Definición 5.1. Una *función de flujo numérico* $\bar{f}(v_1, \dots, v_{2k})$ se dice que es físicamente consistente con el *flujo físico* $f(u)$, si y solo si para todo u satisface la igualdad

$$\bar{f}(u, \dots, u) = f(u)$$

Definición 5.2. Se dice que la *función constante a trozos* \bar{u}_i^n converge a $u(x, t)$ en \mathcal{L}^1 (espacio de las funciones integrables de Lebesgue) si para cualquier $\epsilon > 0$, existe $h > 0$ y $\delta > 0$, tal que si para todo j y n se satisface $\Delta x_j \leq h$, $\Delta t^{n+\frac{1}{2}} \leq \delta$ entonces

$$\sum_{n=0}^{\infty} \sum_{j=-\infty}^{\infty} \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}} \|\bar{u}_j^n - u(t, x)\| dx dt < \epsilon$$

Teorema 5.1. (Lax - Wendroff) [12] Considérese el esquema conservativo (5.4) que

aproxima la ley de conservación (5.1). Asumáse que el flujo numérico \bar{f} es físicamente consistente y que tanto éste como el flujo físico $f(u)$ son funciones Lipschitz continuas. Suponga que para cualquier ϵ se puede elegir una discretización espacial y un dato inicial discreto \bar{u}_i^0 tal que se satisface

$$\sum_{j=-\infty}^{\infty} \int_{x_j-\frac{1}{2}}^{x_j+\frac{1}{2}} \|\bar{u}_j^0 - u(0, x)\| dx dt < \epsilon$$

Entonces, si \bar{u}_j^n converge a una función $u(x, t)$, esta es una solución generalizada de la ley de conservación (5.1)

El teorema de Lax Wendroff no indica ninguna condición para la convergencia. Más aún, no podemos recurrir al teorema de equivalencia de Lax [23] para probar la convergencia de un método basándonos en la consistencia y estabilidad del mismo ya que éste depende de la linealidad del sistema. Un concepto matemático muy útil para probar la convergencia en el caso no lineal es el concepto de *conjunto compacto* [11]. Un conjunto compacto garantiza la convergencia de cualquier secuencia infinita de elementos que lo componen. Por lo tanto si se pueden probar las propiedades de compacidad de una secuencia de aproximaciones numéricas, esto equivale junto al teorema de Lax Wendroff, a probar la convergencia de esta aproximación a una solución generalizada. Uno de los conjuntos que satisfacen estas propiedades de compacidad son los que satisfacen la condición de *variación total estable* definida a continuación.

Definición 5.3. La variación total $TV(w)$ de una función $w(x)$ se encuentra definida por

$$TV(w) \equiv \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon} \int_{-\infty}^{\infty} |w(x + \epsilon) - w(x)| dx$$

y la variación total $TV_T(w)$ de una función $w(t, x)$ como

$$TV_T(w) \equiv \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon} \int_0^T \int_{-\infty}^{\infty} [|w(t, x + \epsilon) - w(t, x)| + |w(t + \epsilon, x) - w(t, x)|] dx dt$$

Si aplicamos la definición de variación total al caso de una función constante a trozos

\tilde{w}_i^n se obtiene,

$$TV(\tilde{w}^n) = \sum_{j=-\infty}^{\infty} |\Delta_{j+\frac{1}{2}} \tilde{w}^n|$$

$$TV_T(\tilde{w}) = \sum_{n=0}^{N-1} \left[TV(\tilde{w}^n) + \sum_{j=-\infty}^{\infty} |\tilde{w}_j^{n+1} - \tilde{w}_j^n| \Delta t^{n+\frac{1}{2}} \right]$$

donde $\sum_{n=0}^{N-1} \Delta t^{n+\frac{1}{2}} = T$ y donde se introduce la notación $\Delta_{j+\frac{1}{2}}(\cdot) = (\cdot)_{j+1} - (\cdot)_j$

Definición 5.4. Se dice que una función constante a trozos $\tilde{u} \in \mathcal{L}^1$, aproximación numérica de la ley de conservación escalar (5.1) con dato inicial $u(0, x)$ acotado y de soporte compacto es de variación total estable ó TV-estable en un intervalo $[0, T]$, si existe un $R > 0, M > 0$ tal que $TV_T(\bar{u}) \leq R$ y $|x_j| > M \Rightarrow \tilde{u}_j^n = 0$. El esquema numérico que genera dicha aproximación se dice que es TV-estable.

Es decir, en esta última definición hemos introducido el conjunto

$$\{\bar{u} \in \mathcal{L}^1 : TV(\bar{u}) \leq R, \quad \text{Supp}(\bar{u}) \subset [-M, M]\}$$

Es posible demostrar que este conjunto es compacto, y por lo tanto posee una secuencia convergente a alguna función $u \in \mathcal{L}^1$. Por lo tanto utilizando el teorema de Lax Wendroff es posible demostrar el siguiente teorema [13]

Teorema 5.2. *Considérese el esquema conservativo (5.4) que aproxima la ley de conservación (5.1). Asumáse que se satisfacen las condiciones del teorema de Lax-Wendroff. Entonces si el esquema es TV-estable converge a una solución generalizada de la ley de conservación escalar.*

Una forma de satisfacer la propiedad TV-estable de un método es requerir que la variación total no se incremente en el tiempo. De esta forma la variación total en cualquier momento se encuentra uniformemente acotada por la variación total de los datos iniciales. Este requerimiento da lugar a el conjunto de los *esquemas TVD*.

Definición 5.5. *Se dice que un esquema explícito de la forma 5.4 es de variación total disminuída (TVD), tal que para cualquier dato inicial \bar{u}^0 de variación total acotada genera una aproximación numérica \bar{u}_j^n que satisface,*

$$TV(\bar{u}^m) \leq TV(\bar{u}^n), \quad \forall m > n \geq 0$$

Esta propiedad TVD es intrínseca de las soluciones generalizadas de (5.1). Es decir se puede probar que cualquier solución generalizada $u(t, x)$ satisface,

$$TV(u(t_2, \cdot)) \leq TV(u(t_1, \cdot)), \quad \forall t_2 \geq t_1$$

Por lo tanto se puede decir que los esquemas TVD se basan en reproducir en forma discreta esta propiedad.

Dentro del conjunto de esquemas TVD, se ha probado que un subconjunto de estos, los denominados esquemas monótonos lineales convergen a una solución generalizada que satisface la condición de entropía de Oleinek, y por lo tanto convergen a la única solución físicamente posible. No obstante de acuerdo al teorema de Godunov [5] los esquemas monótonos lineales son a lo sumo de primer orden de precisión. Por lo tanto para obtener segundo o mayor orden de precisión, se recurre a esquemas TVD no lineales. Sin embargo en este tipo de esquemas, no se puede asegurar a priori la convergencia a la solución única que satisface la desigualdad de entropía, debiéndose recurrir a otro tipo de artificios numéricos para asegurar esta última condición.

5.2 Esquema TVD de Harten

Considérese un esquema conservativo explícito de $2k + 1$ puntos escrito en la forma (5.4). Utilizando el teorema del valor medio siempre es posible encontrar funciones C^+ y C^- tal que este esquema puede ser reescrito en la forma

$$\bar{u}_j^{n+1} = (L \cdot \bar{u}^n)_j \tag{5.5a}$$

$$(L \cdot \bar{u})_j = \bar{u}_j + C_{j+\frac{1}{2}}^+ \Delta_{j+\frac{1}{2}} \bar{u} - C_{j-\frac{1}{2}}^- \Delta_{j-\frac{1}{2}} \bar{u}, \tag{5.5b}$$

donde

$$C_{j+\frac{1}{2}}^+ = C^+(\bar{u}_{j-k+1}, \dots, \bar{u}_{j+k}), \quad C_{j-\frac{1}{2}}^+ = C^+(\bar{u}_{j-k}, \dots, \bar{u}_{j+k-1}) \tag{5.5c}$$

El siguiente lema [8] establece las condiciones que deben satisfacer los coeficientes C^+ y C^- que son suficientes para asegurar que el esquema (5.5) sea TVD.

Lema 5.1. *Si los coeficientes C^\pm son tales que satisfacen las condiciones,*

$$C_{j+\frac{1}{2}}^- \geq 0, \quad C_{j+\frac{1}{2}}^+ \geq 0,$$

$$C_{j+\frac{1}{2}}^- + C_{j+\frac{1}{2}}^+ \leq 1$$

entonces el esquema (5.5) que resulta de reescribir el esquema conservativo (5.4) es TVD.

Considérese el esquema explícito conservativo (5.4) con la función flujo numérico \bar{f} dada por

$$\bar{f}_{j+\frac{1}{2}} = \bar{f}(\bar{u}_j, \bar{u}_{j+1}) = \frac{1}{2} [f(\bar{u}_j) + f(\bar{u}_{j+1}) - (1/\bar{\lambda})Q(\bar{\lambda}\bar{a}_{j+\frac{1}{2}})\Delta_{j+\frac{1}{2}}\bar{u}] \quad (5.7a)$$

donde

$$\bar{a}_{j+\frac{1}{2}} = \begin{cases} [f(\bar{u}_{j+1}) - f(\bar{u}_j)] / \Delta_{j+\frac{1}{2}}\bar{u} & \text{si } \Delta_{j+\frac{1}{2}}\bar{u} \neq 0 \\ a(v_j) & \text{si } \Delta_{j+\frac{1}{2}}\bar{u} = 0 \end{cases} \quad (5.7b)$$

y donde se ha asumido una discretización espacial $\Delta_j x$ constante e igual a un valor Δx de manera que se define $\bar{\lambda} = \frac{\Delta x}{\Delta t}$

Entonces reescribiendo el esquema en la forma (5.5) y utilizando el lema §5.1, es posible demostrar el siguiente lema [8].

Lema 5.2. *El esquema conservativo (5.4), con el flujo numérico dado por (5.7a), donde $Q(x)$ es una función escalar sujeta a la restricción*

$$|x| \leq Q(x) \leq 1 \quad \text{para} \quad 0 \leq |x| \leq \mu \leq 1 \quad (5.8)$$

es TVD bajo la condición tipo CFL ¹

$$\bar{\lambda} \max_j |\bar{a}_{j+\frac{1}{2}}| \leq \mu \quad (5.9)$$

Se puede demostrar que este esquema es monótono lineal y por lo tanto a lo sumo de primer orden de precisión. La técnica introducida por Harten para obtener segundo orden de precisión se basa en el hecho de que los esquemas monótonos aproximan la solución de la ley de conservación viscosa

$$\begin{aligned} u_t + f_x &= \frac{g_x}{\lambda} \\ g &= \Delta x \beta(u, \bar{\lambda}) u_x \end{aligned}$$

a segundo orden de precisión.

¹Se denominan generalmente en la literatura "CFL-like" a las condiciones análogas a la condición de estabilidad de Courant-Friedrich-Lewis [2]

Por lo tanto si se aplica el esquema anterior a la ecuación modificada

$$u_t + \left(f - \frac{g}{\lambda} \right)_x = 0 \quad (5.10)$$

y como $g = \mathcal{O}(\Delta x)$, entonces se obtiene una aproximación TVD de segundo orden de la ecuación original $u_t + f_x = 0$.

Lema 5.3. *Sea un esquema conservativo explícito de la forma (5.4) cuyo flujo numérico resulta de aplicar el flujo (5.7a) a la ecuación modificada (5.10), es decir*

$$\bar{f}_{j+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} \left[f_j + f_{j+1} + \frac{1}{\lambda} (g_j + g_{j+1}) - \frac{1}{\lambda} Q(\bar{v}_{j+\frac{1}{2}} + \gamma_{j+\frac{1}{2}}) \Delta_{j+\frac{1}{2}} \bar{u} \right] \quad (5.11a)$$

donde $\bar{v}_{j+\frac{1}{2}} = \bar{\lambda} \bar{a}_{j+\frac{1}{2}}$ y donde

$$\gamma_{j+\frac{1}{2}} = \begin{cases} (g_{j+1} - g_j) / \Delta_{j+\frac{1}{2}} \bar{u} & \text{si } \Delta_{j+\frac{1}{2}} \bar{u} \neq 0 \\ 0 & \text{si } \Delta_{j+\frac{1}{2}} \bar{u} = 0 \end{cases} \quad (5.11b)$$

Asúmase que $Q(x)$ es Lipschitz continua y g_j es tal que satisface,

$$g_j + g_{j+1} = \left[Q(\bar{v}_{j+\frac{1}{2}}) - (\bar{v}_{j+\frac{1}{2}})^2 \right] \Delta_{j+\frac{1}{2}} \bar{u} + \mathcal{O}(\Delta x^2) \quad (5.11c)$$

$$\gamma_{j+\frac{1}{2}} \Delta_{j+\frac{1}{2}} \bar{u} = g_{j+1} - g_j = \mathcal{O}(\Delta x^2) \quad (5.11d)$$

Entonces el esquema (5.11) es una aproximación numérica de segundo orden de (5.1) y es TVD bajo la restricción tipo CFL (5.9).

En el trabajo original de Harten la denominada *función limitadora* (porque limita la cantidad de viscosidad numérica introducida en el esquema) g_j que satisface (5.11c) se define como

$$g_j = S_{j+\frac{1}{2}} \max \left[0, \min \left(\left| \sigma(\bar{v}_{j+\frac{1}{2}}) \Delta_{j+\frac{1}{2}} \bar{u} \right|, S_{j+\frac{1}{2}} \sigma(\bar{v}_{j-\frac{1}{2}}) \Delta_{j-\frac{1}{2}} \bar{u} \right) \right] \quad (5.12a)$$

donde

$$\sigma(z) = \frac{1}{2} (Q(z) - z^2) > 0 \quad (5.12b)$$

$$S_{j+\frac{1}{2}} = \text{sgn}(\sigma(\bar{v}_{j+\frac{1}{2}}) \Delta_{j+\frac{1}{2}} \bar{u}) \quad (5.12c)$$

Yee [34] introduce una modificación del flujo original de Harten menos difusiva, la cual

puede ser escrita como

$$\bar{f}_{j+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}(f_j + f_{j+1}) + \frac{1}{2} \left[\sigma(\bar{a}_{j+\frac{1}{2}})(g_j + g_{j+1}) - Q(\bar{a}_{j+\frac{1}{2}} + \gamma_{j+\frac{1}{2}})\Delta_{j+\frac{1}{2}}\bar{u} \right] \quad (5.13a)$$

donde

$$g_j = S_{j+\frac{1}{2}} \max \left[0, \min \left(\left| \Delta_{j+\frac{1}{2}}\bar{u} \right|, S_{j+\frac{1}{2}}\Delta_{j-\frac{1}{2}}\bar{u} \right) \right]; \quad S_{j+\frac{1}{2}} = \text{sign} \left(\Delta_{j+\frac{1}{2}}\bar{u} \right) \quad (5.13b)$$

$$\gamma_{j+\frac{1}{2}} = \sigma(\bar{a}_{j+\frac{1}{2}}) \begin{cases} (g_{j+1} - g_j) / \Delta_{j+\frac{1}{2}}\bar{u} & \text{si } \Delta_{j+\frac{1}{2}}\bar{u} \neq 0 \\ 0 & \text{si } \Delta_{j+\frac{1}{2}}\bar{u} = 0 \end{cases} \quad (5.13c)$$

$$\sigma(z) = \frac{1}{2} \left(Q(z) - \bar{\lambda}z^2 \right) \quad (5.13d)$$

Nótese que esta modificación extrae la función $\sigma(z)$ de (5.11) y la incorpora como un factor de $(g_j + g_{j+1})$. A partir de la modificación de Yee se puede generalizar este método incluyendo otras funciones limitadoras, las cuales pueden ser categorizadas de acuerdo a la difusión numérica que introducen, en una secuencia que va desde la más difusiva a la más compresiva como:

1. Limitador de Harten [8]:

$$g_j = \text{minmod} \left(\Delta_{j-\frac{1}{2}}\bar{u}, \Delta_{j+\frac{1}{2}}\bar{u} \right) \quad (5.14a)$$

2. Limitador de Van Leer [27]:

$$g_j = \left(\Delta_{j+\frac{1}{2}}\bar{u}\Delta_{j-\frac{1}{2}}\bar{u} + \left| \Delta_{j+\frac{1}{2}}\bar{u}\Delta_{j-\frac{1}{2}}\bar{u} \right| \right) / \left(\Delta_{j+\frac{1}{2}}\bar{u} + \Delta_{j-\frac{1}{2}}\bar{u} \right) \quad (5.14b)$$

3. Limitador de Van Albada [26]

$$g_j = \left(\Delta_{j+\frac{1}{2}}\bar{u} \left[(\Delta_{j-\frac{1}{2}}\bar{u})^2 + \delta \right] + \Delta_{j-\frac{1}{2}}\bar{u} \left[(\Delta_{j+\frac{1}{2}}\bar{u})^2 + \delta \right] \right) / \left((\Delta_{j+\frac{1}{2}}\bar{u})^2 + (\Delta_{j-\frac{1}{2}}\bar{u})^2 + 2\delta \right) \quad (5.14c)$$

4. Limitador de Woodward y Collela [30]:

$$g_j = \text{minmod} \left(2\Delta_{j-\frac{1}{2}}\bar{u}, 2\Delta_{j+\frac{1}{2}}\bar{u}, \frac{1}{2} \left(\Delta_{j+\frac{1}{2}}\bar{u} + \Delta_{j-\frac{1}{2}}\bar{u} \right) \right) \quad (5.14d)$$

5. Limitador *superbee*[21]:

$$g_j = S \cdot \max \left[0, \min \left(2 \left| \Delta_{j+\frac{1}{2}} \bar{u} \right|, S \cdot \Delta_{j-\frac{1}{2}} \bar{u} \right), \min \left(\left| \Delta_{j+\frac{1}{2}} \bar{u} \right|, 2S \cdot \Delta_{j-\frac{1}{2}} \bar{u} \right) \right] \quad (5.14e)$$

donde $S = \text{sign}(\Delta_{j+\frac{1}{2}} \bar{u})$ y δ es un parámetro pequeño que previene la división por cero. La función minmod es igual al menor valor absoluto de sus argumentos si estos son del mismo signo, o igual a cero si cualquiera de sus argumentos es de signo opuesto. De acuerdo a Yee [36], los limitadores según el orden de la secuencia anterior incrementan la resolución de discontinuidades y disminuyen la estabilidad numérica y la tasa de convergencia.

5.2.1 Condición de entropía

Como dijimos anteriormente si bien los esquemas TVD no lineales convergen a una solución generalizada esto no asegura que esta sea la solución físicamente posible del sistema que satisface la desigualdad de entropía. Considérese entonces la función $Q(x) = |x|$ que es la que introduce la menor cantidad de disipación numérica en el esquema. Supóngase ahora que se tiene un problema de Riemann, cuyas condiciones iniciales son tales que corresponden a una discontinuidad donde una de las velocidades características es nula. En este caso, la función $Q(x)$ también es nula y por lo tanto el esquema numérico propaga en forma exacta esta discontinuidad inicial. Si esta discontinuidad se encuentra asociada a un campo no linealmente degenerado que no satisface la condición de desigualdad de entropía, entonces el esquema no es capaz de captar la onda de expansión física que realmente toma lugar en la evolución del flujo. Existen variadas propuestas para introducir viscosidad numérica en este caso de manera de forzar la convergencia a la solución física [9, 18, 24], mediante los artificios conocidos como “entropy fix” o corrector de entropía. La forma propuesta en [9] y utilizada en este trabajo para forzar la satisfacción de la condición de entropía a través de la introducción de viscosidad numérica es mediante la modificación

$$Q(x) = \begin{cases} |x| & \text{si } |x| \geq \epsilon \\ (x^2 + \epsilon^2)/2\epsilon & \text{si } |x| < \epsilon \end{cases} \quad (5.15)$$

donde ϵ es o bien un parámetro pequeño o bien una función de u .

5.3 Extensión a sistemas

En esta sección se describirá la técnica utilizada para aplicar el esquema escalar visto en la sección anterior al caso de sistemas hiperbólicos no lineales. Sea un sistema hiperbólico de m leyes de conservación en un espacio unidimensional,

$$\mathbf{u}_t + \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{u}} \mathbf{u}_x = \mathbf{0} \quad (5.16)$$

Sea $\mathbf{A}(\mathbf{u}) \in \mathbb{R}^{m \times m}$ la matriz jacobiana del flujo y sea $\mathbf{R}(\mathbf{u}) \in \mathbb{R}^{m \times m}$ la matriz cuyas columnas son los vectores propios derechos \mathbf{r} de \mathbf{A} . Entonces podemos escribir

$$\mathbf{R}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{R} = \mathbf{\Lambda}, \quad \Lambda_{ij} = \lambda_i \delta_{ij} \quad (5.17)$$

donde λ_i es el valor propio asociado al vector propio \mathbf{r} que ocupa la columna i de \mathbf{R} . Definimos ahora las *variables características* \mathbf{w} como

$$\mathbf{w} \equiv \mathbf{R}^{-1} \mathbf{u} \quad (5.18)$$

Asumáse ahora que la matriz jacobiana es constante. Entonces utilizando la definición de variables características el sistema (5.16) puede ser escrito como un conjunto de m ecuaciones escalares desacopladas,

$$\mathbf{w}_t + \mathbf{\Lambda} \mathbf{w}_x = 0 \quad (5.19)$$

Haciendo uso de la forma desacoplada del sistema podemos aplicar en forma directa a cada una de las ecuaciones escalares el esquema TVD escalar de Harten. En el caso de sistemas no lineales donde la matriz \mathbf{A} no es constante, se utiliza una linealización local del problema de Riemann en cada interface entre celdas, mediante la definición de un estado promedio simétrico $\tilde{\mathbf{u}}_{j+\frac{1}{2}} = \mathcal{V}(\bar{\mathbf{u}}_j, \bar{\mathbf{u}}_{j+1})$, donde $\mathcal{V}(v, w)$ satisface

$$\mathcal{V}(v, w) = \mathcal{V}(w, v), \quad \mathcal{V}(v, v) = v \quad (5.20)$$

Sean entonces $\tilde{\lambda}_{j+\frac{1}{2}}^k, \tilde{\mathbf{r}}_{j+\frac{1}{2}}^k$ los k -valores propios y k -vectores propios derechos de la matriz jacobiana $\mathbf{A}(\tilde{\mathbf{u}}_{j+\frac{1}{2}})$ evaluada en el estado promedio $\tilde{\mathbf{u}}_{j+\frac{1}{2}}$. Sea $\boldsymbol{\alpha}_{j+\frac{1}{2}} \in \mathbb{R}^m$ definida por la relación:

$$\boldsymbol{\alpha}_{j+\frac{1}{2}} = \tilde{\mathbf{R}}_{j+\frac{1}{2}}^{-1} \Delta_{j+\frac{1}{2}} \bar{\mathbf{u}} \quad (5.21)$$

Es decir la componente $\alpha_{j+\frac{1}{2}}^k$ es exactamente el salto del vector de estado a través de la k -onda característica del problema de Riemann

$$\mathbf{u}_t + \mathbf{A}(\tilde{\mathbf{u}}_{j+\frac{1}{2}})\mathbf{u}_x = \mathbf{0}, \quad \mathbf{u}(0, x) = \begin{cases} \mathbf{u}_j, & x < 0 \\ \mathbf{u}_{j+1}, & x > 0 \end{cases} \quad (5.22)$$

Como este sistema de coeficientes constantes puede ser escrito como un sistema de ecuaciones escalares desacopladas en las variables $\alpha_{j+\frac{1}{2}}$ entonces podemos aplicar el esquema escalar (5.13) a cada una de estas. Escribiendo nuevamente el esquema en las variables originales se obtiene

$$\mathbf{u}_j^{n+1} = \mathbf{u}_j^n - \frac{\Delta x}{\Delta^{n+\frac{1}{2}}t} (\bar{\mathbf{f}}_{j+\frac{1}{2}} - \bar{\mathbf{f}}_{j-\frac{1}{2}}) \quad (5.23a)$$

$$\bar{\mathbf{f}}_{j+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} (\mathbf{f}_j + \mathbf{f}_{j+1}) + \frac{1}{2} \tilde{\mathbf{R}}_{j+\frac{1}{2}} \Phi_{j+\frac{1}{2}} \quad (5.23b)$$

$$\Phi_{j+\frac{1}{2}}^k = \sigma^k(\lambda_{j+\frac{1}{2}}^k) (g_j^k + g_{j+1}^k) - Q^k(\lambda_{j+\frac{1}{2}}^k + \gamma_{j+\frac{1}{2}}^k) \alpha_{j+\frac{1}{2}}^k \quad (5.23c)$$

$$\gamma_{j+\frac{1}{2}}^k = \sigma(\lambda_{j+\frac{1}{2}}^k) \begin{cases} (g_{j+1}^k - g_j^k) / \alpha_{j+\frac{1}{2}}^k & \text{si } \alpha_{j+\frac{1}{2}}^k \neq 0 \\ 0 & \text{si } \Delta_{j+\frac{1}{2}} \alpha_{j+\frac{1}{2}}^k = 0 \end{cases} \quad (5.23d)$$

donde $\sigma^k(z)$ se define igual que en (5.13d) y $Q^k(x)$ se define como (5.15) en los campos genuinamente no lineales. En los campos linealmente degenerados $Q^k(x) = |x|$. Las funciones limitadoras definidas en la secuencia (5.14) se escriben para el caso de sistemas como:

1. Limitador de Harten:

$$g_j^k = \text{minmod}(\alpha_{j-\frac{1}{2}}^k, \alpha_{j+\frac{1}{2}}^k) \quad (5.24)$$

2. Limitador de Van Leer:

$$g_j^k = \left(\alpha_{j+\frac{1}{2}}^k \alpha_{j-\frac{1}{2}}^k + \left| \alpha_{j+\frac{1}{2}}^k \alpha_{j-\frac{1}{2}}^k \right| \right) / \left(\alpha_{j+\frac{1}{2}}^k \alpha_j^k - \frac{1}{2} \right) \quad (5.25)$$

3. Limitador de Van Albada

$$g_j^k = \left(\alpha_{j+\frac{1}{2}}^k \left[(\alpha_{j-\frac{1}{2}}^k)^2 + \delta \right] + \alpha_{j-\frac{1}{2}}^k \left[(\alpha_{j+\frac{1}{2}}^k)^2 + \delta \right] \right) / \left((\alpha_{j+\frac{1}{2}}^k)^2 + (\alpha_{j-\frac{1}{2}}^k)^2 + 2\delta \right) \quad (5.26)$$

4. Limitador de Woodward y Collela:

$$g_j^k = \text{minmod} \left(2\alpha_{j-\frac{1}{2}}^k, 2\alpha_{j+\frac{1}{2}}^k, \frac{1}{2} (\alpha_{j+\frac{1}{2}}^k + \alpha_{j-\frac{1}{2}}^k) \right) \quad (5.27)$$

5. Limitador *superbee*:

$$g_j^k = S \cdot \max \left[0, \min \left(2 \left| \alpha_{j+\frac{1}{2}}^k \right|, S \cdot \alpha_{j-\frac{1}{2}}^k \right), \min \left(\left| \alpha_{j+\frac{1}{2}}^k \right|, 2S \cdot \alpha_{j-\frac{1}{2}}^k \right) \right] \quad (5.28)$$

Debido a que la técnica descrita hace uso de esquemas escalares en cada campo característico, la función limitadora utilizada no necesita ser la misma para cada campo. Por ejemplo, pueden utilizarse limitadores más compresivos para los campos linealmente degenerados y utilizar un limitador más difusivo en los campos genuinamente no lineales [32, 33], e incluso se pueden utilizar diferentes esquemas para cada campo. No obstante debe ser tenido en cuenta que a menudo las funciones limitadoras diseñadas para los campos linealmente degenerados pueden dar lugar a oscilaciones espurias o soluciones no físicas en el campo genuinamente no lineal.

5.3.1 Estado promedio de Roe generalizado

Definimos a continuación el estado promedio que linealiza localmente el problema de Riemann. Si uno requiere que el esquema aplicado a sistemas se reduzca al esquema escalar para $m = 1$, una forma de obtener esta condición es que los valores y vectores propios $\tilde{\lambda}_{j+\frac{1}{2}}^k, \tilde{\mathbf{r}}_{j+\frac{1}{2}}^k$ sean aquellos correspondientes a la matriz jacobiana de Roe $\tilde{\mathbf{A}}(\bar{\mathbf{u}}_j, \bar{\mathbf{u}}_{j+1})$ donde $\tilde{\mathbf{A}}(v, w)$ satisface las siguientes propiedades [20] :

1. Hiperbolicidad: $\tilde{\mathbf{A}}(v, w) \in \mathbb{R}^{m \times m}$ tiene m valores propios reales y una base de m vectores propios derechos linealmente independientes
2. Consistencia con el jacobiano exacto

$$\tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{v}, \mathbf{v}) = \mathbf{A}(\mathbf{v}) \quad (5.29a)$$

3. Cumplimiento de las condiciones de Rankine Hugoniot

$$\mathbf{F}(\mathbf{w}) - \mathbf{F}(\mathbf{v}) = \tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{v}, \mathbf{w})(\mathbf{w} - \mathbf{v}) \quad (5.29b)$$

En el caso particular de gas calórico perfecto la matriz jacobiana de Roe asociada al sistema de las ecuaciones de Euler se encuentra definida en forma exacta [20]. No obstante, la generalización del estado promedio de Roe para gases con una ecuación de estado arbitraria no se encuentra unívocamente definida. Diversas extensiones del estado promedio de Roe han sido propuestas [3, 7, 14, 29], dependiendo éstas de la elección de las variables utilizadas en la ecuación de estado que define la presión. En esta tesis se utiliza la metodología propuesta por [29], que además de haber sido ampliamente reportado su uso en esquemas TVD [15, 16, 34], presenta un menor costo computacional en comparación con las otras técnicas [17].

En la metodología propuesta por [29] la presión p se expresa como función de la densidad y la energía interna por unidad de volumen $\varepsilon = \rho e$ a través de la EOS $p = p(\rho, \varepsilon)$.

Se definen las derivadas termodinámicas de la ecuación de estado como

$$\kappa = \left(\frac{\partial p}{\partial \varepsilon} \right)_\rho, \quad \chi = \left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_\varepsilon \quad (5.30)$$

Utilizando estas últimas definiciones se demuestra que la matriz de Roe $\tilde{\mathbf{A}}$ para las ecuaciones de Euler unidimensionales se encuentra dada por

$$\tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{u}_L, \mathbf{u}_R) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ \tilde{\chi} - (2 - \kappa)\frac{1}{2}\tilde{v}^2 & \tilde{v}(2 - \tilde{\kappa}) & \tilde{\kappa} \\ \tilde{v}(-\tilde{H} + \frac{1}{2}\tilde{v}^2 + \tilde{\chi}) & \tilde{H} - \tilde{v}^2\tilde{\kappa} & \tilde{v}(1 + \tilde{\kappa}) \end{bmatrix} \quad (5.31)$$

donde

$$\tilde{v} = \text{Ro}(\mathbf{v}) \quad \tilde{H} = \text{Ro}(H) \quad (5.32)$$

en la cuál se introdujo el operador promedio de Roe, $\text{Ro}()$ definido por

$$\text{Ro}() = \frac{\sqrt{\rho_L}()_L + \sqrt{\rho_R}()_R}{\sqrt{\rho_L} + \sqrt{\rho_R}} \quad (5.33)$$

y donde \mathbf{v} es la velocidad unidimensional del flujo.

La matriz jacobiana de Ro (5.31) tiene tres valores propios ordenados en la forma creciente

$$\tilde{\lambda}^1 = \tilde{v} - \tilde{c}, \quad \tilde{\lambda}^2 = \tilde{v}, \quad \tilde{\lambda}^3 = \tilde{v} + \tilde{c} \quad (5.34)$$

y cuya matriz de vectores propios derechos asociados es

$$\tilde{\mathbf{R}} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ \tilde{v} - \tilde{c} & \tilde{v} & \tilde{v} + \tilde{c} \\ \tilde{H} - \tilde{v}\tilde{c} & \tilde{H} - \frac{\tilde{c}^2}{\tilde{\kappa}} & \tilde{H} + \tilde{v}\tilde{c} \end{bmatrix} \quad (5.35)$$

donde \tilde{c} es la velocidad del sonido promedio de Roe dada por,

$$\tilde{c} = \sqrt{\left[\tilde{\chi} + \left(\tilde{H} - \frac{1}{2}\tilde{v}^2 \right) \tilde{\kappa} \right]} \quad (5.36)$$

Para que la matriz jacobiana satisfaga la propiedad (5.29b) los valores de $\tilde{\chi}$ y $\tilde{\kappa}$ deben satisfacer la siguiente condición:

$$\Delta p = \tilde{\chi}\Delta\rho + \tilde{\kappa}\Delta\varepsilon \quad (5.37)$$

donde $\Delta() = ()_R - ()_L$.

Con el fin de determinar unívocamente los valores de $\tilde{\chi}$ y $\tilde{\kappa}$, en [29] se propone utilizar la información que brindan los estados termodinámicos a la izquierda (L) y derecha (R) de la interface. Integrando la expresión

$$dP = \chi d\rho + \kappa d\varepsilon$$

a lo largo de un camino recto entre los estados L y R y usando la (5.37) se obtienen las relaciones generales

$$\tilde{\chi} = \int_0^1 \chi[\varepsilon(\tau), \rho(\tau)] d\tau \quad , \quad \tilde{\kappa} = \int_0^1 \kappa[\varepsilon(\tau), \rho(\tau)] d\tau \quad (5.38)$$

donde el parámetro τ es normalizado de tal forma que $\tau_L = 0$ y $\tau_R = 1$. Es de destacar que la definición anterior no elimina la no unicidad del estado promedio de Roe, debido a que existe una dependendencia directa del camino elegido entre los estados L y R. Es decir, diferentes caminos de integración brindan diferentes matrices jacobianas de Roe,

tal como se demuestra en [25]. Debido al costo que implicaría la evaluación exacta de las Ecs. (5.38), en [29] se propone encontrar primero una aproximación $\hat{\chi}$, $\hat{\kappa}$ para $\tilde{\chi}$ y $\tilde{\kappa}$, mediante una regla de integración numérica de bajo costo, tal como la regla del punto medio o la regla trapezoidal.

Luego, se realiza una proyección de estos valores en el plano $\chi - \kappa$ sobre la línea recta definida por la Ec. (5.37). Finalmente se obtienen las relaciones [17],

$$\tilde{\chi} = \frac{D\hat{\chi} + \hat{s}^2\Delta\rho\delta p}{D - \Delta p\delta p} \quad (5.39a)$$

$$\tilde{\kappa} = \frac{D\hat{\kappa}}{D - \Delta p\delta p} \quad (5.39b)$$

donde,

$$\delta p = \Delta p - \hat{\chi}\Delta\rho - \hat{\kappa}\Delta\varepsilon \quad (5.39c)$$

$$D = (\hat{s}\Delta\rho)^2 + (\Delta p)^2 \quad (5.39d)$$

$$\hat{s} = \hat{\chi} + \overline{\kappa h} \quad (5.39e)$$

y donde $\overline{\kappa h}$ es evaluado aplicando al producto κh la misma fórmula de integración utilizada para $\hat{\chi}$ y $\hat{\kappa}$, siendo $h = e + p/\rho$, la entalpía específica.

5.4 Extensión a las ecuaciones de Euler bidimensionales

En esta sección se discute la extensión del esquema de Harten-Yee a las ecuaciones de Euler bidimensionales. La formulación aquí descrita es válida tanto para el caso bidimensional como el tridimensional si bien sólo la primera será discutida y es la que finalmente es implementada en esta tesis.

Comenzamos la exposición considerando un sistema hiperbólico de m leyes de conservación definido en un sistema de coordenadas espaciales cartesiano (x, y) el cual es escrito en la forma conservativa

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{u})}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{g}(\mathbf{u})}{\partial y} = \mathbf{0} \quad (5.40)$$

Considérese una transformación de coordenadas desde el dominio físico (x, y) a un dominio cartesiano *computacional* mediante las funciones de mapeado $\xi = \xi(x, y)$ y $\eta = \eta(x, y)$, tal como se muestra en la Fig. 5.1.

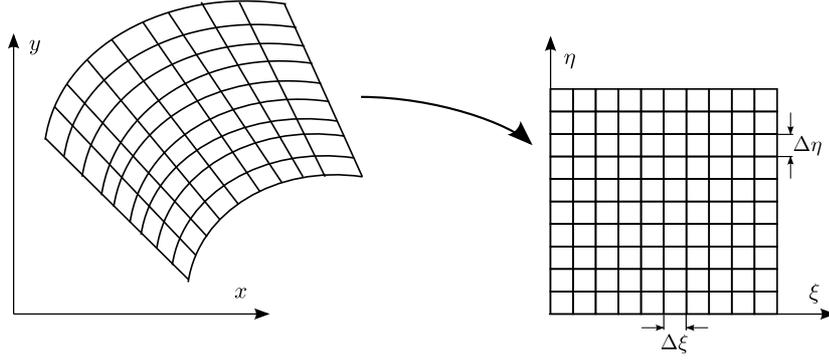


Figura 5.1: Transformación de coordenadas del dominio físico al computacional.

El sistema (5.40) puede escribirse en forma conservativa con respecto a este sistema de coordenadas como

$$\frac{\partial \hat{\mathbf{u}}}{\partial t} + \frac{\partial \hat{\mathbf{f}}(\hat{\mathbf{u}})}{\partial \xi} + \frac{\partial \hat{\mathbf{g}}(\hat{\mathbf{u}})}{\partial \eta} = \mathbf{0} \quad (5.41a)$$

donde

$$\hat{\mathbf{u}} = \mathbf{u}/J \quad (5.41b)$$

$$\hat{\mathbf{f}} = (\xi_x \mathbf{f} + \xi_y \mathbf{g})/J \quad (5.41c)$$

$$\hat{\mathbf{g}} = (\eta_x \mathbf{f} + \eta_y \mathbf{g})/J \quad (5.41d)$$

siendo J el jacobiano de la transformación de coordenadas dado por

$$J = \xi_x \eta_y - \xi_y \eta_x \quad (5.41e)$$

Sean $\mathbf{A} = \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{u}}$ y $\mathbf{B} = \frac{\partial \mathbf{g}}{\partial \mathbf{u}}$. Entonces las matrices jacobianas del sistema transformado $\hat{\mathbf{A}} = \frac{\partial \hat{\mathbf{f}}}{\partial \hat{\mathbf{u}}}$ y $\hat{\mathbf{B}} = \frac{\partial \hat{\mathbf{g}}}{\partial \hat{\mathbf{u}}}$ se escriben como

$$\hat{\mathbf{A}} = \xi_x \mathbf{A} + \xi_y \mathbf{B} \quad (5.42a)$$

$$\hat{\mathbf{B}} = \eta_x \mathbf{A} + \eta_y \mathbf{B} \quad (5.42b)$$

Sean $(\lambda_\xi^1, \lambda_\xi^2, \dots, \lambda_\xi^m)$ los valores propios de $\hat{\mathbf{A}}$ y $(\lambda_\eta^1, \lambda_\eta^2, \dots, \lambda_\eta^m)$ los valores propios de $\hat{\mathbf{B}}$. Sean además \mathbf{R}_ξ y \mathbf{R}_η las matrices cuyas columnas son los vectores propios derechos de $\hat{\mathbf{A}}$ y $\hat{\mathbf{B}}$ respectivamente. Aplicando las expresiones de los valores y vectores propios del sistema de ecuaciones de Euler 3.12 de la Sección §3.1.2 se obtiene que los valores propios de $\hat{\mathbf{A}}$ se encuentran dados por

$$(\lambda_\xi^1, \lambda_\xi^2, \lambda_\xi^3, \lambda_\xi^4) = (\mathbf{v}_\xi - k_\xi c, \mathbf{v}_\xi, \mathbf{v}_\xi, \mathbf{v}_\xi + k_\xi c) \quad (5.43a)$$

donde $\mathbf{v}_\xi = \xi_x \mathbf{v}_x + \xi_y \mathbf{v}_y$ y $k_\xi = \sqrt{\xi_x^2 + \xi_y^2}$.

Asímismo la matriz de vectores propios derechos de $\hat{\mathbf{A}}$ se encuentra dada por

$$\mathbf{R}_\xi = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 & 1 \\ \mathbf{v}_x - k_1 c & \mathbf{v}_x & -k_2 & \mathbf{v}_x + k_1 c \\ \mathbf{v}_y - k_2 c & \mathbf{v}_y & k_1 & \mathbf{v}_y + k_2 c \\ H - \mathbf{v}_\xi c / k_\xi & H - \frac{c^2}{\kappa} & k_1 \mathbf{v}_y - k_2 \mathbf{v}_x & H + \mathbf{v}_\xi c / k_\xi \end{bmatrix} \quad (5.44a)$$

donde

$$k_1 = \frac{\xi_x}{k_\xi}, \quad k_2 = \frac{\xi_y}{k_\xi} \quad (5.44b)$$

En forma análoga los valores propios de $\hat{\mathbf{B}}$ se obtienen reemplazando \mathbf{v}_ξ por $\mathbf{v}_\eta = \eta_x \mathbf{v}_x + \eta_y \mathbf{v}_y$ y k_ξ por $k_\eta = \sqrt{\eta_x^2 + \eta_y^2}$ en (5.43a) y la matriz de vectores propios \mathbf{R}_η se obtiene haciendo $k_1 = \frac{\eta_x}{k_\eta}$ y $k_2 = \frac{\eta_y}{k_\eta}$ en (5.44a).

Sean entonces el dominio (ξ, η) discretizado en la forma $(\xi_i, \eta_j) = (i\Delta\xi, j\Delta\eta)$, $i = 0, 1, \dots, \text{NI}$, $j = 0, 1, \dots, \text{NJ}$ donde $\Delta\xi$ y $\Delta\eta$ denota el espaciado de la grilla computacional tal como se muestra en la Figura 5.1. Sea $\mathbf{u}_{i,j} = \mathbf{u}(\xi_i, \eta_j)$ el vector de estado definido en cada nodo de la grilla computacional. Entonces un esquema de diferencias finitas de (5.41a) puede escribirse en la forma general,

$$\frac{\partial \hat{\mathbf{u}}_{i,j}}{\partial t} = -\frac{1}{\Delta\xi} (\tilde{\mathbf{f}}_{i+\frac{1}{2},j} - \tilde{\mathbf{f}}_{i-\frac{1}{2},j}) - \frac{1}{\Delta\eta} (\tilde{\mathbf{g}}_{i,j+\frac{1}{2}} - \tilde{\mathbf{g}}_{i,j-\frac{1}{2}}) \quad (5.45)$$

La extensión del esquema TVD a dos dimensiones es llevada a cabo a través de la formulación de los flujos numéricos $\tilde{\mathbf{f}}_{i+\frac{1}{2},j}$ y $\tilde{\mathbf{g}}_{i+\frac{1}{2},j}$ en las direcciones ξ y η en una forma análoga al flujo derivado en el caso unidimensional. No obstante debe tenerse en cuenta que en este caso se encuentran presentes en la formulación los términos de las métricas de la transformación de coordenadas. La discretización numérica de estos términos presenta influencia en la conservación de las condiciones de la corriente libre, y en el tratamiento de las condiciones de contorno [28]. Yee propone la siguiente formulación que es equivalente a una formulación conservativa en volúmenes finitos en dos dimensiones [28, 35] y que preserva en forma exacta la corriente libre:

$$\tilde{\mathbf{f}}_{i+\frac{1}{2},j} = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\xi_x}{J} \right)_{i+\frac{1}{2},j} (\mathbf{f}_{i,j} + \mathbf{f}_{i+1,j}) + \left(\frac{\xi_y}{J} \right)_{i+\frac{1}{2},j} (\mathbf{g}_{i,j} + \mathbf{g}_{i+1,j}) + (\mathbf{R}_\xi)_{i+\frac{1}{2},j} \Phi_{i+\frac{1}{2},j} / J_{i+\frac{1}{2},j} \right] \quad (5.46)$$

donde

$$\left(\frac{\xi_x}{J}\right)_{i+\frac{1}{2},j} = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\xi_x}{J}\right)_{i,j} + \left(\frac{\xi_x}{J}\right)_{i+1,j} \right], \quad \frac{1}{J_{i+\frac{1}{2},j}} = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{J_{i,j}} + \frac{1}{J_{i+1,j}} \right) \quad (5.47)$$

La matriz de vectores propios $(\mathbf{R}_\xi)_{i+\frac{1}{2},j}$ es evaluada en el estado promedio de Roe entre los estados $\mathbf{u}_{i,j}$ y $\mathbf{u}_{i+1,j}$. Los términos geométricos k_1 y k_2 son evaluados de acuerdo a

$$(k_1)_{i+\frac{1}{2},j} = \frac{\left(\frac{\xi_x}{J}\right)_{i+\frac{1}{2},j}}{\sqrt{\left(\frac{\xi_x}{J}\right)_{i+\frac{1}{2},j}^2 + \left(\frac{\xi_y}{J}\right)_{i+\frac{1}{2},j}^2}} \quad (5.48)$$

con una definición análoga para $(k_2)_{i+\frac{1}{2},j}$. Las componentes del vector $\Phi_{i+\frac{1}{2},j}$ se expresan de la misma manera que en el caso unidimensional, debiendo reemplazarse los valores propios por los dados en (5.43a), y donde las variables características $\alpha_{i+\frac{1}{2},j}$ se encuentran dadas por

$$\alpha_{i+\frac{1}{2},j} = (\mathbf{R}_\xi^{-1})_{i+\frac{1}{2},j} (\mathbf{u}_{i+1,j} - \mathbf{u}_{i,j}) = \begin{bmatrix} \frac{1}{2}(aa + bb + \Delta_{i+\frac{1}{2},j}\rho) \\ -aa \\ cc \\ \frac{1}{2}(aa - bb + \Delta_{i+\frac{1}{2},j}\rho) \end{bmatrix} \quad (5.49a)$$

$$aa = \frac{\tilde{\kappa}}{\tilde{c}^2} \left[\Delta_{i+\frac{1}{2},j} E - (\hat{H} - \tilde{v}_x^2 - \tilde{v}_y^2) \Delta_{i+\frac{1}{2},j} \rho - \tilde{v}_x \Delta_{i+\frac{1}{2},j} \rho v_x - \tilde{v}_y \Delta_{i+\frac{1}{2},j} \rho v_y \right] \quad (5.49b)$$

$$bb = \frac{1}{\tilde{c}} \left[-(k_1)_{i+\frac{1}{2},j} \Delta_{i+\frac{1}{2},j} \rho v_x - (k_2)_{i+\frac{1}{2},j} \Delta_{i+\frac{1}{2},j} \rho v_y + \left((k_1)_{i+\frac{1}{2},j} \tilde{v}_x + (k_2)_{i+\frac{1}{2},j} \tilde{v}_y \right) \Delta_{i+\frac{1}{2},j} \rho \right] \quad (5.49c)$$

$$cc = (k_1)_{i+\frac{1}{2},j} \Delta_{i+\frac{1}{2},j} \rho v_y - (k_2)_{i+\frac{1}{2},j} \Delta_{i+\frac{1}{2},j} \rho v_x + \left((k_2)_{i+\frac{1}{2},j} \tilde{v}_x - (k_1)_{i+\frac{1}{2},j} \tilde{v}_y \right) \Delta_{i+\frac{1}{2},j} \rho \quad (5.49d)$$

donde $\Delta()_{i+\frac{1}{2},j} = ()_{i+1,j} - ()_{i,j}$ y donde la tilde ($\tilde{}$) denota el estado promedio de Roe entre los estados $\mathbf{u}_{i+1,j}$ y $\mathbf{u}_{i,j}$.

Los valores de las métricas ξ_x , ξ_y , η_x , η_y y el jacobiano J son obtenidos a partir de

$$\xi_x = J y_\eta, \quad \xi_y = -J x_\eta, \quad \eta_x = -J y_\xi, \quad \eta_y = J x_\xi \quad (5.50)$$

$$J = \frac{1}{x_\xi y_\eta - y_\xi x_\eta} \quad (5.51)$$

donde x_ξ , y_ξ , x_η y y_η son evaluadas mediante diferencias centradas de segundo orden en el interior del dominio y mediante diferencias laterales de primer o segundo orden en el contorno. De forma análoga a lo expuesto se define el flujo numérico $\tilde{\mathbf{g}}_{i,j+\frac{1}{2}}$ en la dirección η .

5.4.1 Integración temporal

Los métodos de integración temporal utilizados usualmente en conjunto con discretizaciones espaciales TVD multidimensionales pueden clasificarse generalmente en dos categorías: métodos explícitos y métodos implícitos. Entre los métodos explícitos más utilizados se encuentran los métodos de tipo “dimensional splitting” [22] que aplican operadores espaciales unidimensionales en forma alternada, los métodos tipo “predictor - corrector” de Lax Wendroff y McCormack modificados para satisfacer las propiedades TVD [35], y los métodos de Runge Kutta. Por otro lado, entre los métodos implícitos más utilizados en conjunto con esquemas TVD estructurados se encuentra el método “Alternate Direction Implicit” [35]. Al ser incondicionalmente estables y por lo tanto permitir mayores pasos de tiempo y mejores tasas de convergencia, los métodos implícitos tienen particular aplicación cuando son de interés soluciones estacionarias, o cuando el sistema de ecuaciones posee términos fuentes que reducen drásticamente el paso de tiempo de estabilidad asociado a los métodos explícitos, tal como sucede por ejemplo cuando son incluidos efectos viscosos o de no equilibrio químico. No obstante, los métodos implícitos presentan un alto costo tanto de implementación como de cálculo, ya que requieren de la solución de un sistema de ecuaciones en cada paso de tiempo. En contraposición, los métodos explícitos presentan la ventaja de un reducido costo de cálculo por iteración, permitiendo un alto nivel de eficiencia y vectorización en el código.

Entre los métodos explícitos, los métodos de Runge Kutta han probado ser altamente eficientes en el cómputo de las ecuaciones de Euler [1, 10]. En este trabajo se emplea un esquema de Runge Kutta de segundo orden propuesto por [6]. Este, pertenece a una familia de métodos de Runge Kutta diseñados especialmente para conservar la propiedad TVD de la discretización espacial. Presenta además la propiedad de poseer buenas propiedades de amortiguamiento de las oscilaciones numéricas de alta frecuencia (oscilaciones del orden de discretización de la malla), lo cual lo hace atractivo para el cómputo de soluciones estacionarias.

Si designamos con $L(\mathbf{u})$ al operador discreto del lado derecho de (5.45), entonces el método de integración temporal de Runge Kutta de 2do orden de [6] queda definido a

partir de

$$\hat{\mathbf{u}}_{i,j}^{(1)} = \hat{\mathbf{u}}_{i,j}^n + \Delta t L(\hat{\mathbf{u}}^n) \quad (5.52a)$$

$$\hat{\mathbf{u}}_{i,j}^{n+1} = \frac{1}{2}\hat{\mathbf{u}}_{i,j}^n + \frac{1}{2}\hat{\mathbf{u}}_{i,j}^{(1)} + \frac{1}{2}\Delta t L(\hat{\mathbf{u}}^{(1)}) \quad (5.52b)$$

donde la condición CFL para la región de estabilidad del paso de tiempo se encuentra dada por

$$\Delta t \leq \min_{i,j} \left\{ \min \left(\frac{\Delta \xi}{|\mathbf{v}_\xi| + c}, \frac{\Delta \eta}{|\mathbf{v}_\eta| + c} \right)_{i,j} \right\} \quad (5.53)$$

5.4.2 Condiciones de contorno

Hasta aquí se ha tratado únicamente el problema de la definición del esquema numérico *en el interior* del dominio computacional. Es el objetivo de esta sección entonces definir el tratamiento de las denominadas *condiciones de contorno o borde*, haciendo especial énfasis en el caso bidimensional. Serán tratadas tres tipos de condiciones de contorno: contorno sólido, contorno abierto y contorno de simetría.

5.4.2.1 Contorno sólido

En un contorno sólido la restricción que debe satisfacer el campo de movimiento es que el flujo no penetre en el sólido. Esta es la llamada *condición de no penetración* y equivale a establecer que la velocidad normal al borde sólido es nula sobre el mismo. Es decir, si Γ_b denota la curva que define el borde sólido, entonces

$$\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = 0, \quad \text{en} \quad \Gamma_b$$

donde \mathbf{n} es el versor normal a Γ_b .

Supongamos ahora que el borde sólido del dominio físico corresponden a los puntos de la grilla definidos por una línea donde $\eta = 0$ en el dominio computacional. En este caso, es sencillo mostrar que el versor normal se encuentra dado por

$$\mathbf{n} = \frac{1}{\sqrt{\eta_x^2 + \eta_y^2}} [\eta_x, \eta_y]$$

Por lo tanto la condición de no penetración se encuentra dada por

$$\mathbf{v}_n = \frac{\eta_x \mathbf{v}_x + \eta_y \mathbf{v}_y}{\sqrt{\eta_x^2 + \eta_y^2}} = 0 \quad (5.54)$$

Asimismo la velocidad tangencial al contorno se encuentra dada por,

$$\mathbf{v}_t = \frac{\eta_y \mathbf{v}_x - \eta_x \mathbf{v}_y}{\sqrt{\eta_x^2 + \eta_y^2}} \quad (5.55)$$

En el método de imposición de la condición de no penetración propuesto por [19], la velocidad tangencial es obtenida por extrapolación lineal de primer orden. Luego, se obtienen los valores de la velocidad sobre el borde sólido a partir de la relación inversa a las anteriores,

$$\begin{bmatrix} \mathbf{v}_x \\ \mathbf{v}_y \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{\eta_x^2 + \eta_y^2}} \begin{bmatrix} \eta_y & \eta_x \\ -\eta_x & \eta_y \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{v}_t \\ \mathbf{v}_n = 0 \end{bmatrix} \quad (5.56)$$

Por extrapolación lineal se entiende cuando los valores de una variable son obtenidos a partir de los valores en el interior del dominio. Por ejemplo si $\Phi_{i,0}$ es el valor de una variable en el contorno $\eta = 0$, entonces una extrapolación de primer orden corresponde a

$$\Phi_{i,0} = \Phi_{i,1}$$

mientras que una extrapolación de segundo orden a

$$\Phi_{i,0} = (4\Phi_{i,1} - \Phi_{i,2})/3$$

La presión sobre el borde es obtenida resolviendo la ecuación de momento a lo largo de la línea de corriente situada sobre el borde sólido. Esta ecuación se obtiene al multiplicar la ecuación de momento en la dirección x e y por η_x y η_y respectivamente, sumarlas e introducir la condición de no penetración $\mathbf{v}_n = 0$. Luego de aplicar este procedimiento se obtiene la expresión [19],

$$-\rho \mathbf{v}_\xi \left(\eta_x \frac{\partial \mathbf{v}_x}{\partial \xi} + \eta_y \frac{\partial \mathbf{v}_y}{\partial \xi} \right) = (\eta_x \xi_x + \eta_y \xi_y) p_\xi + (\eta_x^2 + \eta_y^2) p_\eta \quad (5.57)$$

donde la densidad es obtenida por extrapolación desde el dominio. La ecuación de momento (5.57) es resuelta utilizando derivadas centrales de segundo orden en la dirección ξ y derivadas laterales de primer orden en la dirección η . Se obtiene de esta manera un sis-

tema tridiagonal de ecuaciones, cuyas incógnitas son los valores de la presión, quedando de esta manera completamente definido el vector de estado en el borde sólido.

5.4.2.2 Contorno abierto

El contorno abierto se refiere a aquel contorno en el cual el fluido o bien ingresa o bien abandona el dominio computacional. En un problema de flujo externo sobre cuerpos, el contorno abierto del dominio computacional idealmente debería ubicarse lo más lejos posible de la región perturbada por el cuerpo de forma tal que las propiedades del flujo sobre el contorno sean conocidas y similares o aproximadamente similares a la de la corriente libre. En la práctica, el dominio computacional debe ser acotado debiendo aplicarse condiciones de borde apropiadas sobre el contorno abierto. Es importante notar que las condiciones impuestas en contornos libres pueden causar la pérdida de estabilidad del sistema de ecuaciones [31], la reducción de la tasa de convergencia en soluciones estacionarias por reflexión de ondas en el borde [4] (de especial importancia en flujos transónicos) entre otros efectos de difícil predicción, de allí la importancia de su implementación adecuada.

En sistemas hiperbólicos el número y tipo de condiciones que deben ser impuestas en un contorno abierto resulta del análisis del signo de las ondas características del sistema. La Fig. 5.2 muestra el esquema de ondas unidimensional para las cuatro condiciones de contorno abierto que se presentan en las ecuaciones de Euler: entradas y salidas subsónicas y supersónicas respectivamente.

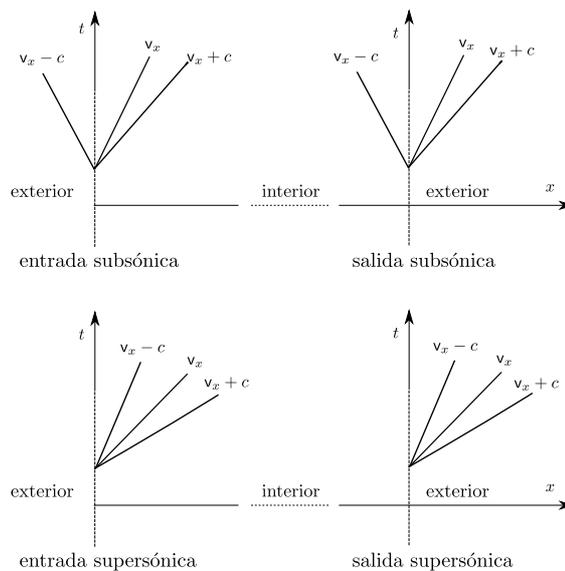


Figura 5.2: Tipos de contornos abiertos.

Por motivos de estabilidad del sistema de ecuaciones, el número de condiciones de contorno que deben imponerse en un contorno abierto se encuentra dado por el número de características *entrantes* al dominio computacional. Por ejemplo, en el caso de una entrada supersónica todas las características son entrantes por lo tanto deben imponerse un total de condiciones de contorno igual al número de características del sistema. Debido a que la información que transporta una onda característica es, precisamente una variable característica, rigurosamente las condiciones deberían ser aplicadas sobre estas últimas. No obstante las variables características son expresiones diferenciales que no pueden medirse en forma directa. Por lo tanto, en la práctica se recurre a la imposición de las condiciones de contorno sobre las variables primitivas usuales, e.g., densidad, velocidad, presión, temperatura. La Tabla 5.1 muestra cuales son las variables que se imponen y cuales son las que se extrapolan desde el interior del dominio para cada uno de los tipos de contorno abierto.

Variable	Entrada subsónica	Entrada supersónica	Salida subsónica	Salida supersónica
Densidad	(I)	(I)	(E)	(E)
Velocidad	(I)	(I)	(E)	(E)
Presión	(E)	(I)	(I)	(E)

Tabla 5.1: Tratamiento de las variables primitivas en contornos abiertos.
(I): Impuesta. (E): Extrapolada.

5.4.2.3 Condición de simetría

Las condiciones de simetría son utilizadas para reducir el costo de cálculo en campos de movimiento que presentan simetría con respecto a un plano (una recta en dos dimensiones). Su implementación es la más sencilla entre las hasta aquí vistas. Si por ejemplo, en el dominio computacional $\eta = 2\Delta\eta$ y $\eta = 0$ son dos rectas que presentan simetría con respecto a la recta $\eta = \Delta\eta$ en el plano físico, entonces la densidad, velocidad tangencial a la línea de simetría y la presión en $\eta = 0$ se obtiene por extrapolación de primer orden a partir de los valores en $\eta = 2\Delta\eta$, mientras que la velocidad normal se invierte en signo. Luego los valores en la línea de simetría $\eta = \Delta\eta$ son obtenidos a partir del promedio entre los valores adyacentes a ambos lados, de forma tal que sobre la línea de simetría la velocidad normal se anula, formando esta entonces una línea de corriente del flujo. Finalmente, como el esquema TVD de Harten Yee es un esquema de 5 puntos son necesarios además los valores de las funciones limitadoras g en el contorno. Estas,

son obtenidas tal como es recomendado en [37] por extrapolación de primer orden desde los valores del dominio en cada uno de los tipos de contorno considerados.

BIBLIOGRAFIA

- [1] A. JAMESON, W. S., AND TURKELL, E. Numerical solutions of euler equations by finite volume methods using runge–kutta time-stepping schemes. *AIAA Paper 81-1259* (1981).
- [2] COURANT, R., FRIEDRICHS, K., AND LEWY, H. On the partial differential equations of mathematical physics. *IBM J. 11* (1967), 215–234.
- [3] COX, C., AND CINNELLA, P. General solution procedure for flows in local chemical equilibrium. *AIAA Journal 32* (1994), 519–527.
- [4] GIVOLI, D. Non-reflecting boundary conditions. *Journal of Computational Physics 94* (1991), 1–29.
- [5] GODUNOV, S. K. A difference scheme for numerical solution of discontinuous solution of hydrodynamic equations. *Math. Sbornik 47* (1959), 271–306.
- [6] GOTTLIEB, S., AND SHU, C. W. Total variation diminishing runge-kutta schemes. *Mathematics of Computation 67*, 221 (1998).
- [7] GROSSMAN, B., AND WALTERS, R. W. Analysis of flux–split algorithms for Euler’s equations with real gases. *AIAA Journal* (1987), 524–531.
- [8] HARTEN, A. On a class of high resolution total–variation–stable finite–difference schemes. *Journal of Computational Physics 49* (1983), 357–393.
- [9] HARTEN, A., AND HYMAN, J. M. Self adjusting grid methods for one–dimensional hyperbolic conservation laws. *Journal of Computational Physics 50* (1983), 235–269.

- [10] JORGENSON, P., AND TURKEL, E. Central difference tvd schemes for time dependent and steady state problems. *Journal of Computational Physics* 107 (1993), 297–308.
- [11] KOLMOGOROV, A. N., AND FOMIN, S. V. *Elements of the Theory of Functions and Functional Analysis*. Dover Books on Mathematics, 1957.
- [12] LAX, P. D., AND WENDROFF, B. Systems of conservation laws. *Communications On Pure And Applied Mathematics* 13 (1960), 217–237.
- [13] LEVEQUE, R. J. *Numerical Methods for Conservation Laws*. Birkhäuser-Verlag, 1992.
- [14] LIOU, M.-S., LEER, B. V., AND SHUEN, J.-S. Splitting of inviscid fluxes for real gases. *Journal of Computational Physics* 87 (1990), 1–24.
- [15] MONTAGNÉ, J. L., YEE, H. C., KLOPFER, G. H., AND VINOKUR, M. Hypersonic blunt body computations including real gas effects. *NASATM 100074* (1988).
- [16] MONTAGNÉ, J. L., YEE, H. C., AND VINOKUR, M. Comparative study of high-resolution shock-capturing schemes for a real gas. *AIAA Journal* 27 (1989), 1332–1346.
- [17] MOTTURA, L., VIGEVANO, L., AND ZACCANTI, M. An evaluation of Roe’s scheme generalizations for equilibrium real gas flows. *Journal of Computational Physics* 138 (1997), 354–399.
- [18] OSHER, S. Riemann solvers, the entropy condition, and difference approximations. *SIAM Journal on Numerical Analysis* 21, 2 (1984), 217–235.
- [19] PULLIAM, T., SCHMIDT, W., AND TURKELL, E. Recent improvements in efficiency, accuracy and convergence for implicit approximate factorization algorithms. *AIAA Paper 85-0360* (1985).
- [20] ROE, P. L. Approximate Riemann solvers, parameter vectors, and difference schemes. *Journal of Computational Physics* 43 (1981), 357–372.
- [21] ROE, P. L. Characteristic-based schemes for the Euler equations. *Annual Review of Fluid Mechanics* 18, 1 (1986), 337–365.

- [22] STRANG, G. On the construction and comparison of difference schemes. *SIAM Journal of Numerical Analysis* 5 (1968), 506–517.
- [23] STRIKWERDA, J. C. *Finite Difference Schemes and Partial Differential Equations*. Wadsworth & Brooks/Cole, 1989.
- [24] TADMOR, E. Numerical viscosity and the entropy condition for conservative difference schemes. *Mathematics of Computation* 43 (1984), 369–381.
- [25] TOUMI, I. A weak formulation of Roe’s approximate Riemann solver. *Journal of Computational Physics* 102 (1992), 360–373.
- [26] VAN ALBADA, G. D., VAN LEER, B., AND JR., W. W. R. A comparative study of computational methods in cosmic gas dynamics. *Astronomy and Astrophysics* 108 (1982), 76–84.
- [27] VAN LEER, B. Towards the ultimate conservative difference scheme. II. Monotonicity and conservation combined in a second-order scheme. *Journal of Computational Physics* 14 (1974), 361–370.
- [28] VINOKUR, M. An analysis of finite-difference and finite-volume formulations of conservation laws. *Journal of Computational Physics* 81 (1989), 1–52.
- [29] VINOKUR, M., AND MONTAGNÉ, J. L. Generalized flux–vector splitting and roe average for an equilibrium real gas. *Journal of Computational Physics* 89 (1990), 276–300.
- [30] WOODWARD, P., AND COLELLA, P. The numerical simulation of two-dimensional fluid flow with strong shocks. *Journal of Computational Physics* 54 (1984), 115–173.
- [31] YEE, H. C. Numerical approximation of boundary conditions with applications to inviscid equations of gas dynamics. *NASA-TM-81265* (1981).
- [32] YEE, H. C. Numerical experiments with a symmetric high-resolution shock-capturing scheme. *NASA TM-88325* (1986).
- [33] YEE, H. C. Construction of explicit and implicit symmetric TVD schemes and their applications. *Journal of Computational Physics* 68 (1987), 151–179.
- [34] YEE, H. C. Upwind and symmetric shock–capturing schemes. *NASA TM-89464* (1987).

- [35] YEE, H. C. A class of high resolution explicit and implicit shock-capturing methods. *NASA-TM-101088* (1989).
- [36] YEE, H. C., KLOPPER, G. H., AND MONTAGNÉ, J. L. High-resolution shock-capturing schemes for inviscid and viscous hypersonic flows. *Journal of Computational Physics* 88 (1990), 31–61.
- [37] YEE, H. C., WARMING, R. F., AND HARTEN, A. Implicit total variation diminishing (TVD) schemes for steady-state calculations. *NASA TM-84342* (1983).

En este capítulo se presentan los resultados obtenidos mediante el esquema TVD de Harten-Yee descrito en el Capítulo §5 considerando que el gas se encuentra en equilibrio termoquímico de acuerdo a lo expuesto en el Capítulo §4. Se han utilizado tres tipos de variantes de este esquema. El esquema que denominaremos HYMM (*Harten-Yee Minmod*) utiliza la función limitadora *minmod* (5.24) en todas las ondas características. Un segundo esquema que denominaremos HYAD (*Harten-Yee Adaptivo*) corresponde al propuesto en [5]. En éste se utiliza la función compresiva *superbee* (5.28) en el campo de ondas linealmente degenerado sólo cuando la intensidad de estas ondas es mayor a las ondas genuinamente no lineales, bajo un criterio de comparación que se define más adelante. En caso contrario se utiliza la función *minmod* en todas las ondas. Un tercer esquema que denominaremos HYNAD (*Harten-Yee No Adaptivo*) utiliza siempre la función limitadora *superbee* en las ondas linealmente degeneradas y la función limitadora *minmod* en las ondas genuinamente no lineales. Este esquema se introduce a modo de estudiar mediante experimentos numéricos las posibles ventajas y desventajas que presenta el uso de la función limitadora *superbee* en forma adaptiva, en comparación con una técnica no adaptiva.

Los experimentos numéricos realizados a este fin son:

1. Solución de problemas transitorios unidimensionales. Se presentan resultados de 5 problemas de Riemann de alta entalpía especialmente diseñados para observar efectos del gas en equilibrio químico [7].
2. Solución de problemas transitorios bidimensionales. Se presentan resultados de 4 problemas de Riemann con simetría cilíndrica, utilizando las mismas condiciones iniciales que en los problemas de Riemann unidimensionales.

- Solución de problemas estacionarios bidimensionales. Se presentan resultados del flujo estacionario en régimen hipersónico sobre configuraciones de interés aeroespacial: *blunt bodies*. Se utilizan dos tipos de condiciones de la corriente libre: número de Mach igual a 15 a las condiciones de atmósfera estándar correspondientes a una altura de 20 km, y número de Mach 25 a una altura de 40 km. En ambos casos se comparan los resultados obtenidos asumiendo gas en equilibrio químico y asumiendo gas calórico perfecto.

6.1 Resultados unidimensionales

6.1.1 Casos de prueba

Se presentan resultados para un total de 5 problemas de Riemann unidimensionales. Estos casos de prueba se han utilizado previamente en [7, 11] para comparar la performance de esquemas TVD bajo condiciones de alta entalpía considerando gas en equilibrio químico. En la Tabla 6.1 se muestran los estados a la izquierda (L) y derecha (R) de la discontinuidad inicial para cada uno de los casos de prueba considerados.

Caso	Estado	Densidad kg/m^3	Presión N/m^2	Temperatura K	Velocidad m/sec
Caso A	(L)	0.0660	$9.84 \cdot 10^4$	4390.8	0.0
	(R)	0.0300	$1.50 \cdot 10^4$	1741.8	0.0
Caso B	(L)	1.4000	$9.88 \cdot 10^5$	2456.5	0.0
	(R)	0.1400	$9.93 \cdot 10^3$	247.1	0.0
Caso C	(L)	1.2900	$1.00 \cdot 10^5$	270.0	0.0
	(R)	0.0129	$1.00 \cdot 10^4$	2648.9	0.0
Caso D	(L)	1.0000	$6.50 \cdot 10^5$	2263.6	0.0
	(R)	0.0100	$1.00 \cdot 10^3$	348.4	0.0
Caso E	(L)	0.0100	$5.73 \cdot 10^2$	199.6	2200.0
	(R)	0.1400	$2.23 \cdot 10^4$	554.9	0.0

Tabla 6.1: Problemas de Riemann unidimensionales. Condiciones iniciales de cada caso de prueba.

El problema de Riemann unidimensional se implementa en un tubo de choque de longitud igual a 14 m. El origen de coordenadas x se sitúa en la mitad del tubo. En todos los casos, excepto el caso D, la discontinuidad inicial que separa los estados (L) y

(R) de la Tabla 6.1 coincide con el origen de coordenadas. En el caso D, la discontinuidad inicial se sitúa en $x = -1.0m$. El dominio se discretiza en un total de 100 celdas de longitud constante $\Delta x = 0.14m$. La integración temporal de la solución se realiza de acuerdo a (5.23a). La restricción del paso de tiempo se encuentra dada por

$$\Delta t = \text{CFL} \frac{\Delta x}{\max_i (|\mathbf{v}_{xi}| + c_i)}$$

donde el número de CFL se elige igual a 0.75 en todos los casos. Las condiciones de contorno corresponden a un contorno libre donde los valores en el contorno son obtenidos mediante extrapolación lineal desde el interior del dominio. El gas utilizado es aire con los siguiente porcentajes molares: ($N_2 = 78.084$, $O_2 = 20.9476$, $Ar = 0.9365$, $CO_2 = 0.0319$). La base de datos utilizada para obtener las propiedades en el equilibrio químico corresponde a la matriz \mathcal{C}_{III}^{SET} de la Tabla 4.2. La función de corrección de entropía se define de acuerdo a (5.15) donde el parámetro ϵ es elegido constante e igual a 0.1.

En el esquema HYAD se utiliza el siguiente criterio para aplicar la función limitadora *superbee* en la onda linealmente degenerada.

$$\text{Esquema HYAD} \equiv \begin{cases} g_j^{(2)}, g_{j+1}^{(2)} \equiv \text{minmod}(5.24) & \text{si } I_{j+\frac{1}{2}}^{(2)} \leq \max \left(I_{j+\frac{1}{2}}^{(1)}, I_{j+\frac{1}{2}}^{(3)} \right) \\ g_j^{(2)}, g_{j+1}^{(2)} \equiv \text{superbee}(5.28) & \text{si } I_{j+\frac{1}{2}}^{(2)} > \max \left(I_{j+\frac{1}{2}}^{(1)}, I_{j+\frac{1}{2}}^{(3)} \right) \end{cases} \quad (6.1)$$

donde las intensidades de las ondas en la intercelda $I_{j+\frac{1}{2}}^{(l)}$ se evalúan a través del módulo de la diferencia de las variables conservativas a ambos lados de la ondas características asociadas al problema de Riemann aproximado de Roe,

$$I_{j+\frac{1}{2}}^l = \|\alpha_{j+\frac{1}{2}}^l \mathbf{r}_{j+\frac{1}{2}}^l\| \quad (6.2)$$

donde $\alpha_{j+\frac{1}{2}}^l$ es la l -componente del vector de variables características definido en (5.21) y donde $\mathbf{r}_{j+\frac{1}{2}}^l$ es el l -vector columna de la matriz de vectores propios $\mathbf{R}_{j+\frac{1}{2}}$ (5.23a) evaluada en el estado promedio de Roe.

6.1.2 Resultados obtenidos

En las Figs. (6.1 a 6.5) se presenta la comparación de los resultados obtenidos con los esquemas HYMM, HYNAD y HYAD, para la densidad, presión, temperatura, número de Mach y coeficiente politrópico γ , de los casos A a E respectivamente, (véase Tabla 6.1), considerando gas en equilibrio químico.

En todos los casos, la solución numérica es comparada con la solución pseudo analítica del problema de Riemann, obtenida a partir de la solución de las condiciones de Rankine Hugoniot en los choques y la integración numérica de los invariantes de Riemann a través de las ondas de expansión, de acuerdo al procedimiento propuesto en [10] y que ha sido discutido en la Sección §3.4

6.1.2.1 Caso de prueba A

El esquema de ondas del problema de Riemann del caso A (Fig. 6.1) consiste en una onda de expansión que viaja hacia la izquierda, una discontinuidad de contacto y una onda de choque que se mueven hacia la derecha. Los tres esquemas captan en un ancho de tres celdas la onda de choque, mientras que los esquemas que utilizan la función *superbee* en el campo linealmente degenerado resuelven significativamente mejor la discontinuidad de contacto. Se presentan grandes variaciones en el coeficiente γ , lo que da una medida de la magnitud de la diferencia con el gas calórico perfecto. Una gran oscilación ocurre en la discontinuidad de contacto para este coeficiente cuya magnitud no logra ser disminuía por los esquemas HYNAD y HYAD. Esta oscilación ocurre debido a que entre los estados termodinámicos a la izquierda y derecha de la discontinuidad, existe un mínimo en la función γ , que se presenta para los estados termodinámicos que se obtienen numéricamente detrás de la onda. Finalmente, es posible observar que el esquema HYNAD y el esquema adaptivo HYAD no presentan apreciables diferencias.

6.1.2.2 Caso de prueba B

En este caso (Fig.6.2) el esquema de ondas es similar al caso A, sólo que la intensidad de la onda de choque es mayor, y la de la discontinuidad de contacto es menor. Nuevamente los tres esquemas resuelven en tres celdas la onda de choque, mientras que los esquemas que usan la función *superbee* en la onda 2, mejoran la captación de la discontinuidad de contacto. El esquema adaptivo disminuye las oscilaciones numéricas que aparecen detrás de la onda de contacto. En este caso el coeficiente γ es monótonamente decreciente con respecto a la energía interna en todo el dominio de cálculo, no observándose extremos locales en los estados termodinámicos numéricos entre discontinuidades. Este comportamiento se repite en los casos subsiguientes. Tal como en el caso A, no es posible observar apreciables diferencias entre los resultados obtenidos con los esquemas HYNAD y HYAD.

6.1.2.3 Caso de prueba C

El caso C (Fig. 6.3) presenta un sistema de ondas similar al caso anterior caracterizado por la presencia de una intensa discontinuidad de contacto cuasi estacionaria, un choque débil y una expansión transónica fuerte. Todos los esquemas sobreestiman la velocidad de la onda de choque. El esquema HYMM, sobreestima además la velocidad de la discontinuidad de contacto, mientras que los esquemas HYNAD y HYAD mejoran considerablemente la resolución de la misma. En este caso el esquema HYNAD introduce una pequeña oscilación en la región de la discontinuidad de contacto, que es reducida por el esquema adaptivo HYAD.

6.1.2.4 Caso de prueba D

El sistema de ondas del caso D (Fig. 6.4) presenta una gran expansión transónica, y una discontinuidad de contacto y onda de choques ambas con grandes saltos de temperatura pero con pequeños cambios de densidad. Se puede observar que el esquema HYNAD introduce una sobreestimación de la temperatura en la región delante de la discontinuidad de contacto que es amortiguada por el esquema adaptivo HYAD. Esta mejora introducida por el esquema adaptivo también se manifiesta en el gráfico del coeficiente politrópico.

6.1.2.5 Caso de prueba E

En este último caso (Fig. 6.5) se presentan una onda de choque cuasi estacionaria que viaja hacia la izquierda y una discontinuidad de contacto y onda de choque que viajan rápidamente hacia la derecha. La captura de la onda de choque cuasi estacionaria es prácticamente exacta con los tres esquemas, como consecuencia de usar el solver de Riemann de Roe's en la linealización local del problema de Riemann en las interfaces. Se observa un marcado comportamiento oscilatorio detrás de la onda de choque lenta, comportamiento que ha sido reportado entre otros autores por [9] en el contexto de esquemas que utilizan solvers de Riemann. En este caso puede concluirse que no se observan mejoras con la introducción de la función limitadora *superbee*.

6.1.3 Discusión general

Los experimentos numéricos unidimensionales realizados permiten mostrar que la función limitadora *superbee*, aplicada en la onda linealmente degenerada, no tiene influencia en la captura de ondas de choque, mejorando significativamente la captura

de discontinuidades de contacto. Sin embargo la función limitadora *superbee* tiende a introducir oscilaciones en regiones adyacentes a ondas de contacto, cuya magnitud e influencia depende de la velocidad de la onda, su intensidad y la interacción con otras ondas. Por otro lado, la introducción de la función limitadora *superbee* en una forma adaptiva ha mostrado reducir estas oscilaciones, sin introducir pérdida de resolución en dos de los cinco casos unidimensionales presentados. En los restantes casos no se encontraron diferencias apreciables entre los esquemas HYNAD y HYAD. Puede ser inferido a partir de los resultados obtenidos que en aquellos casos que la función *superbee* introduce oscilaciones en la cercanía de discontinuidades de contacto, mientras que la función limitadora *minmod* no, el uso del esquema adaptivo HYAD probablemente resulte en un amortiguamiento de las oscilaciones sin comprometer la resolución de la discontinuidad de contacto. Más aún, esta ventaja es obtenida a un costo computacional adicional considerado despreciable.

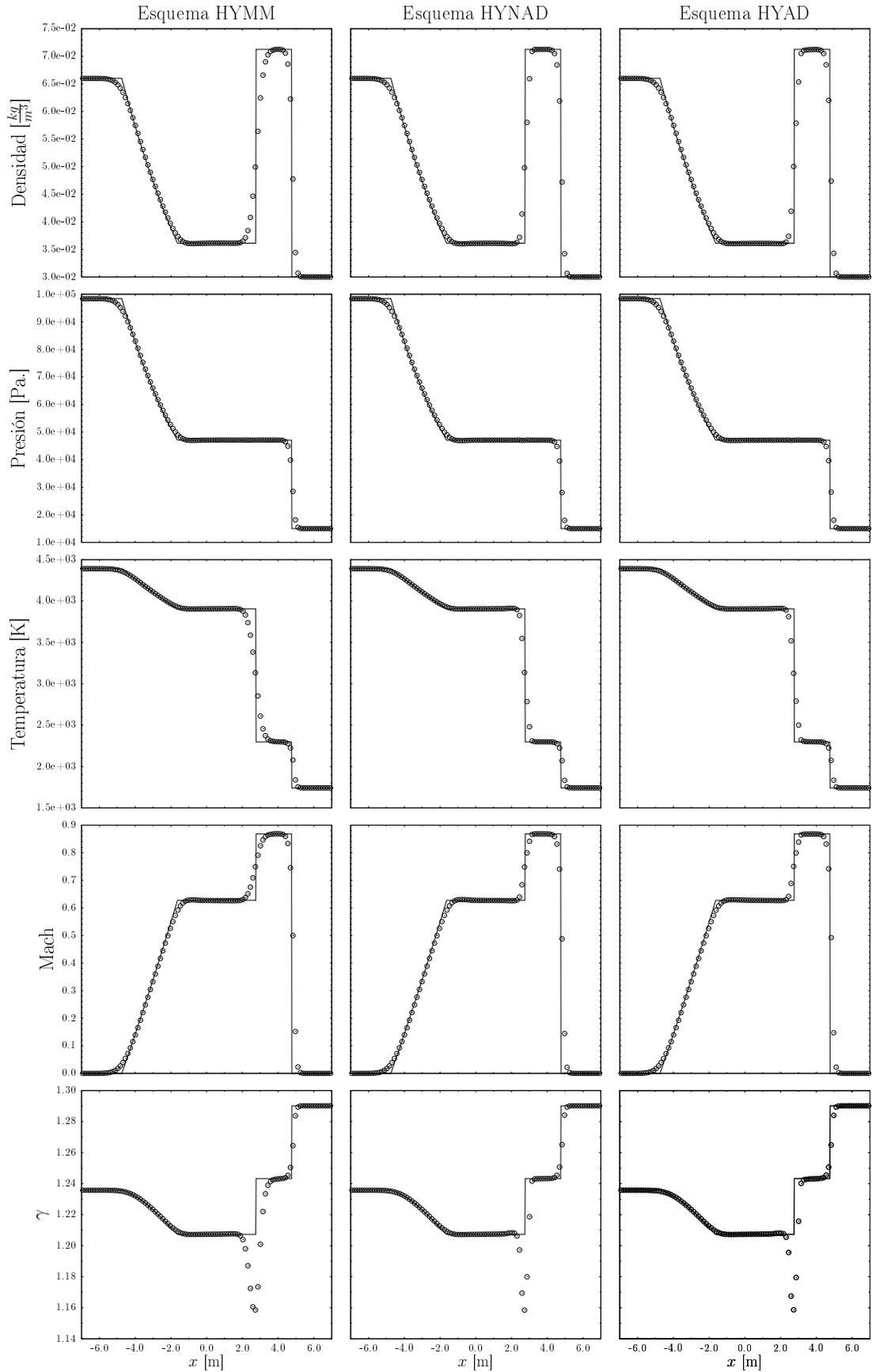


Figura 6.1: Comparación de los esquemas TVD considerando gas en equilibrio químico. Caso de prueba A. Tiempo de salida: 3.5 ms. Solución exacta: línea llena

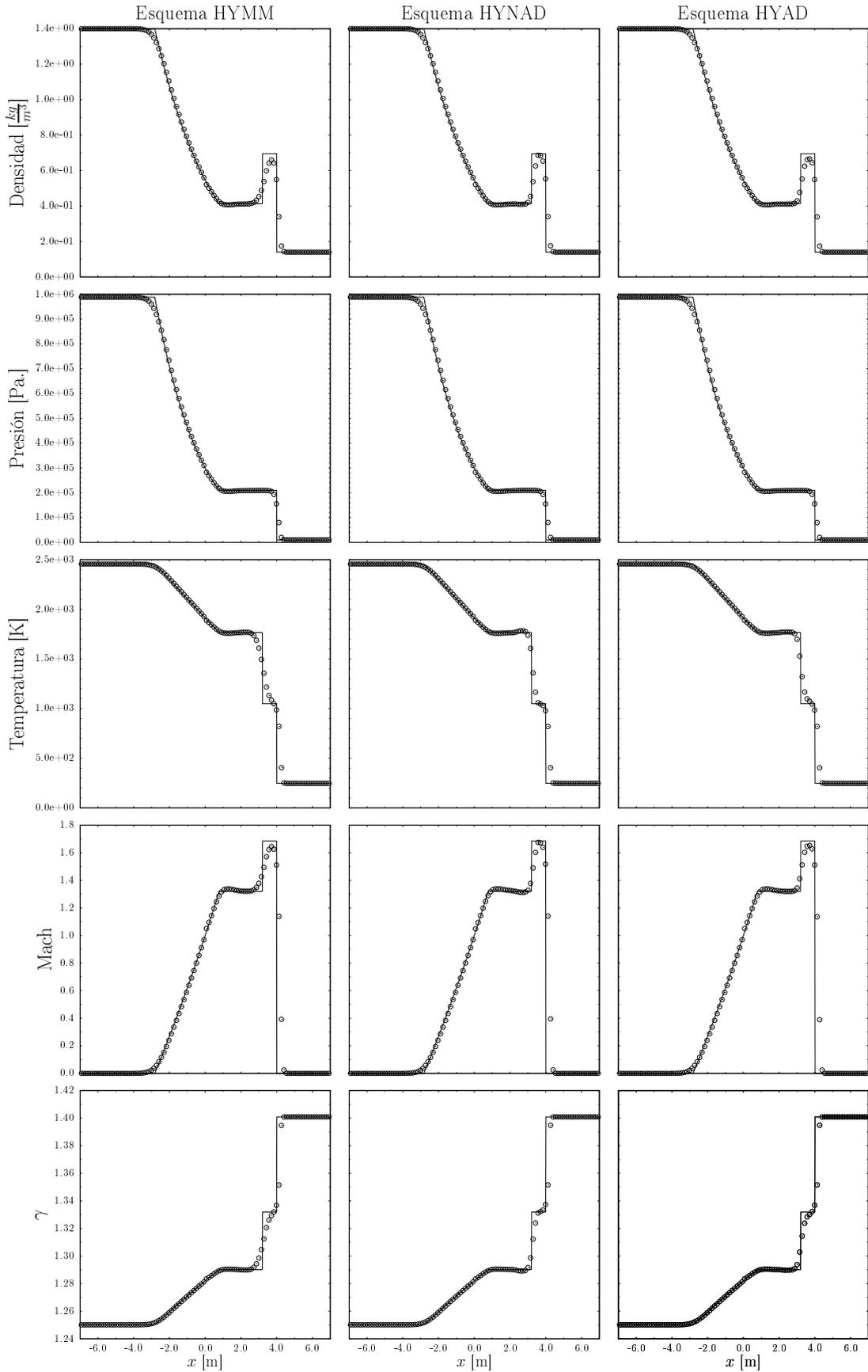


Figura 6.2: Comparación de los esquemas TVD considerando gas en equilibrio químico. Caso de prueba B. Tiempo de salida: 3.0 ms. Solución exacta: línea llena

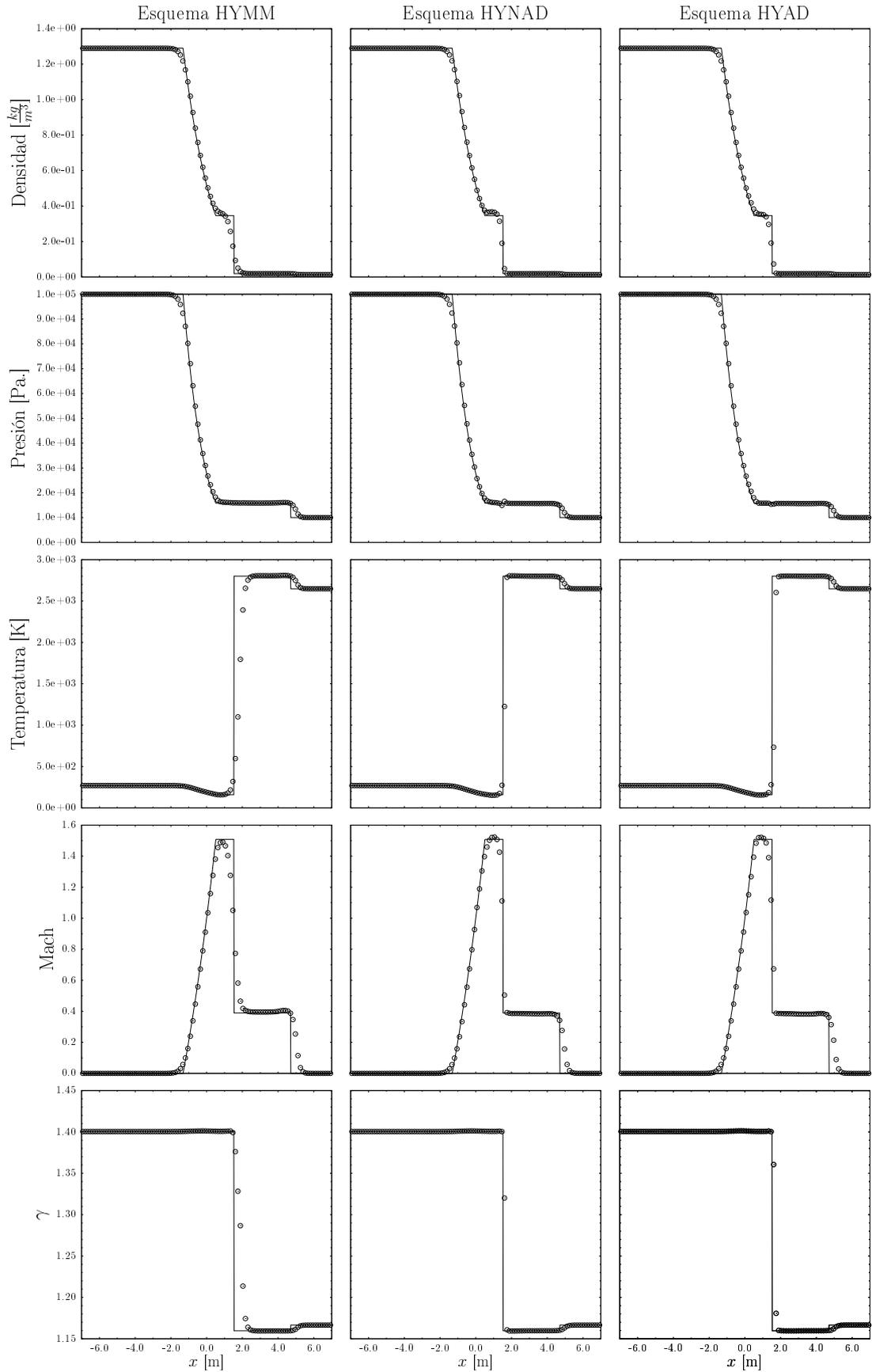


Figura 6.3: Comparación de los esquemas TVD considerando gas en equilibrio químico. Caso de prueba C. Tiempo de salida: 4.0 ms. Solución exacta: línea llena

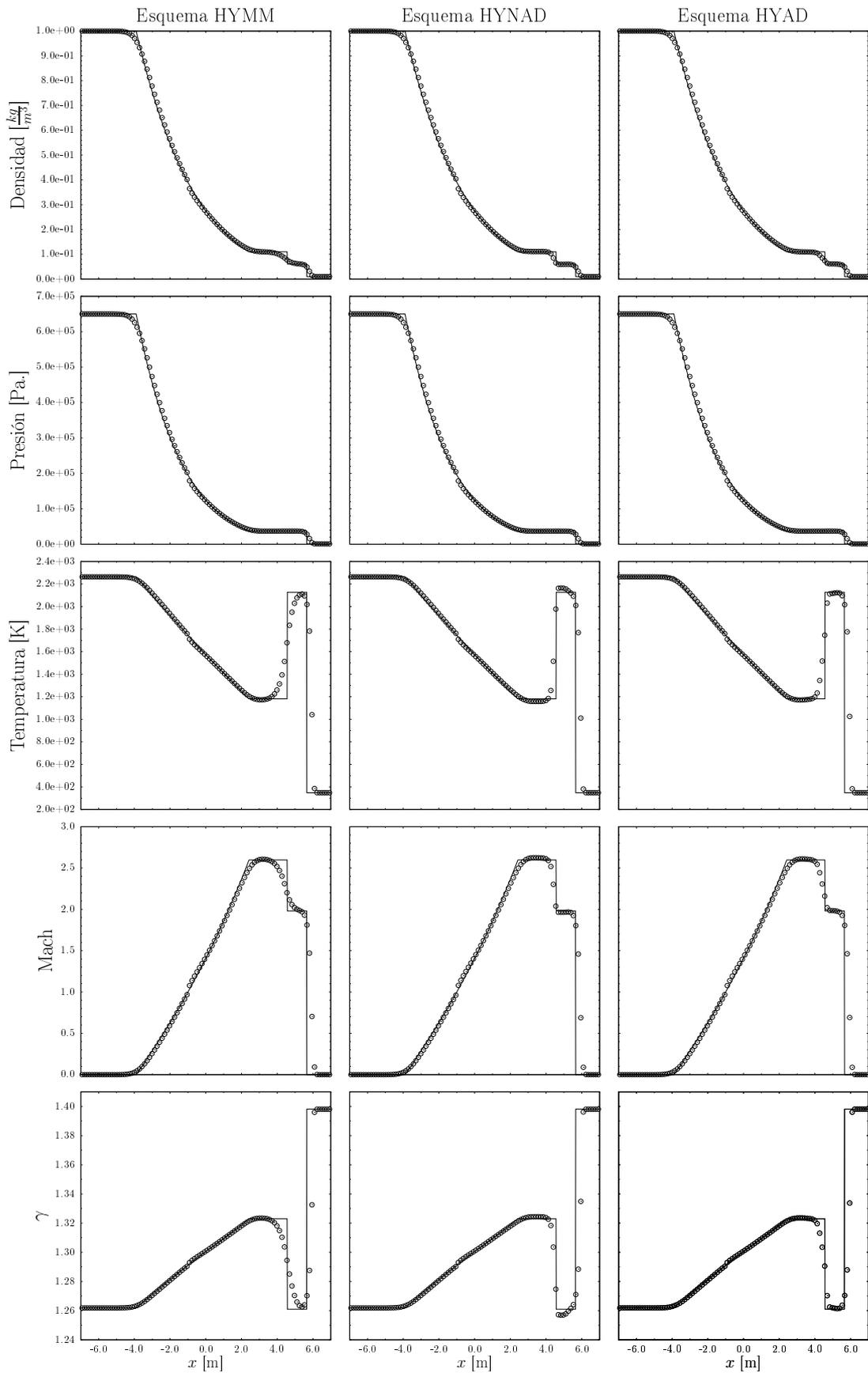


Figura 6.4: Comparación de los esquemas TVD considerando gas en equilibrio químico. Caso de prueba D. Tiempo de salida: 3.2 ms. Solución exacta: línea llena

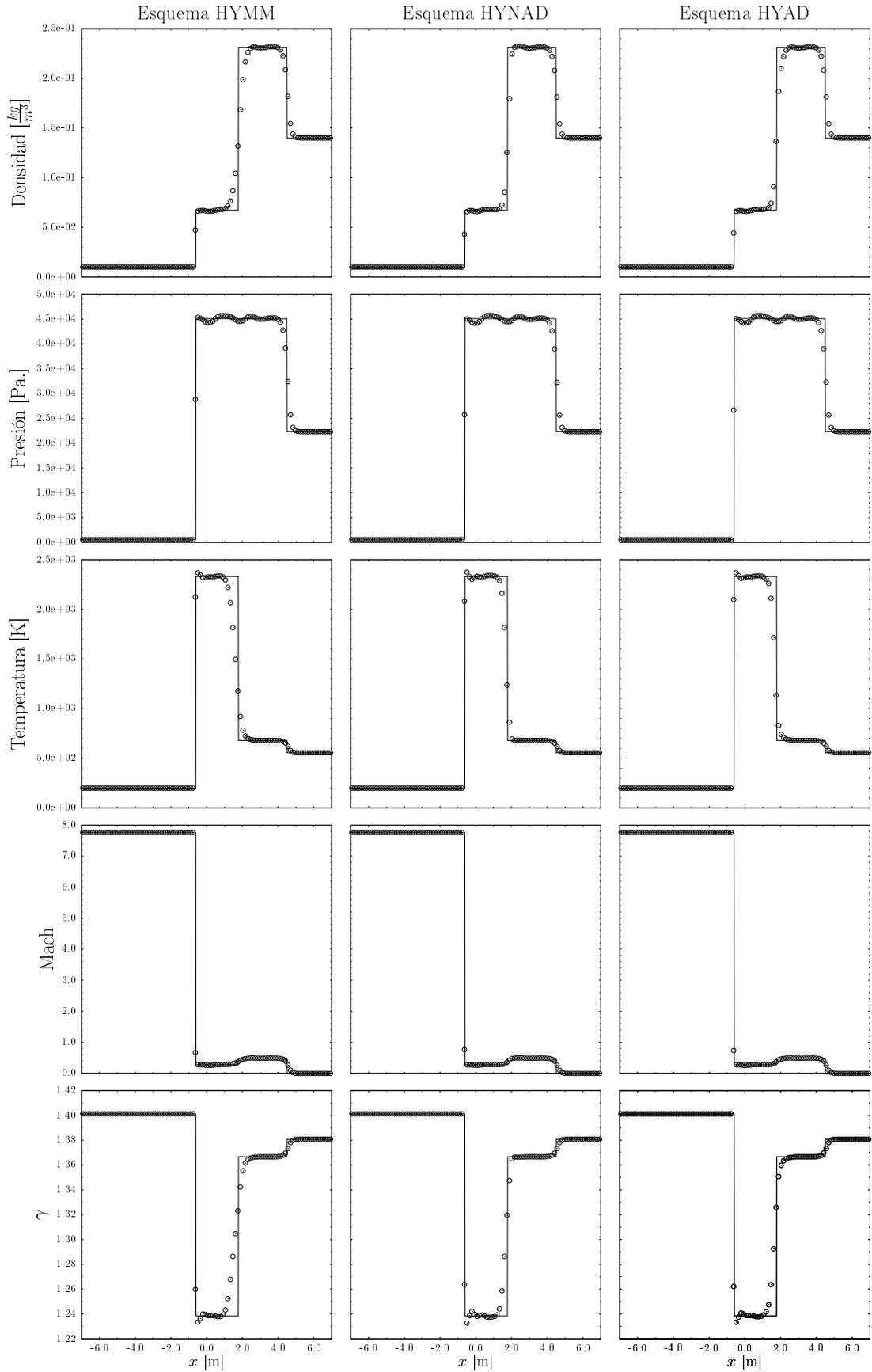


Figura 6.5: Comparación de los esquemas TVD considerando gas en equilibrio químico. Caso de prueba E. Tiempo de salida: 7.0 ms. Solución exacta: línea llena

6.2 Resultados bidimensionales

6.2.1 Problemas de Riemann con simetría cilíndrica

El problema de Riemann con simetría cilíndrica consiste en un estado inicial interno $\mathbf{u}^{(I)}$ contenido en un cilindro que lo separa de un estado inicial externo $\mathbf{u}^{(E)}$ tal como se muestra en la Figura 6.6.

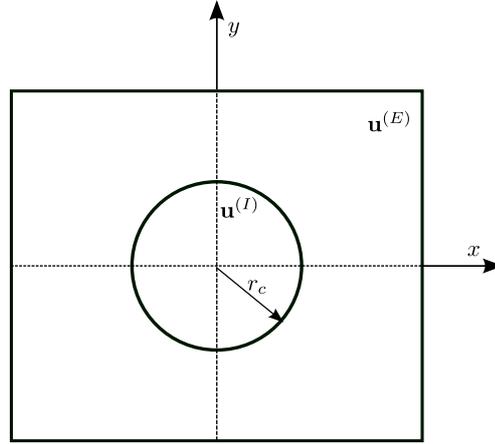


Figura 6.6: Esquema del problema de Riemann con simetría cilíndrica.

Es decir, dada la dirección radial $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ y el radio del cilindro r_c , las condiciones iniciales del problema de Riemann con simetría cilíndrica se encuentran dadas por

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t = 0) \begin{cases} \mathbf{u}^{(I)} & \text{si } r < r_c \\ \mathbf{u}^{(E)} & \text{si } r > r_c \end{cases} \quad (6.3)$$

Se presentan en esta sección resultados para un total de 4 problemas de Riemann cilíndricos cuyos estados interno $\mathbf{u}^{(I)}$ y externo $\mathbf{u}^{(E)}$ son similares a los estados izquierdo (L) y derecho (R) de los problemas de Riemann unidimensionales de la sección anterior, correspondientes a los casos de prueba A a D respectivamente. De esta manera en todos los casos los estados internos poseen mayor presión que el estado externo, por lo que se obtienen test de *explosión cilíndrica*. En la Tabla 6.2 se detallan nuevamente las condiciones iniciales de cada caso de prueba, indicando el radio del cilindro r_c del estado interno.

El dominio del problema consiste en un cuadrado con lados de longitud igual a 14 m, el cual modela únicamente el cuadrante superior positivo del dominio imponiéndose condiciones de contorno de simetría tal como se muestra en la Figura 6.7. Este domi-

Caso	Estado	Densidad kg/m^3	Presión N/m^2	Temperatura K	Velocidad m/sec	r_c m
Caso A	(I)	0.0660	$9.84 \cdot 10^4$	4390.8	0.0	7.0
	(E)	0.0300	$1.50 \cdot 10^4$	1741.8	0.0	—
Caso B	(I)	1.4000	$9.88 \cdot 10^5$	2456.5	0.0	7.0
	(E)	0.1400	$9.93 \cdot 10^3$	247.1	0.0	—
Caso C	(I)	1.2900	$1.00 \cdot 10^5$	270.0	0.0	7.0
	(E)	0.0129	$1.00 \cdot 10^4$	2648.9	0.0	—
Caso D	(I)	1.0000	$6.50 \cdot 10^5$	2263.6	0.0	6.0
	(E)	0.0100	$1.00 \cdot 10^3$	348.4	0.0	—

Tabla 6.2: Problemas de Riemann con simetría cilíndrica. Condiciones iniciales de cada caso de prueba.

no se discretiza mediante una malla cartesiana equiespaciada de 101×101 nodos que corresponde a un tamaño de grilla de 0.14 m.

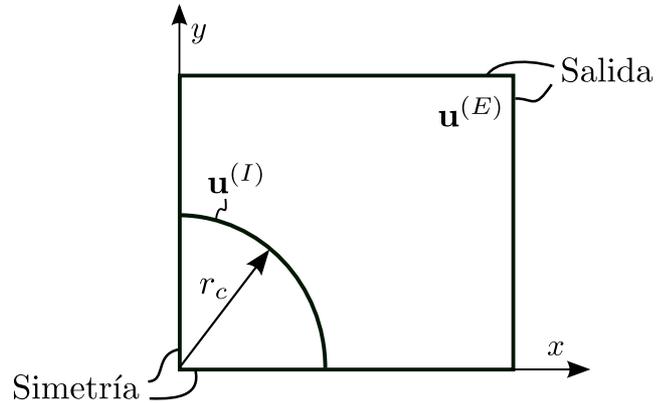


Figura 6.7: Problema de Riemann con simetría cilíndrica. Condiciones de contorno.

La solución del problema bidimensional se compara con la solución numérica del problema unidimensional no homogéneo que resulta de escribir el sistema bidimensional de ecuaciones de Euler en un sistema de coordenadas polares (r, θ) e introducir la simetría radial del problema, lo que permite obtener:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{u})}{\partial r} = \mathbf{s}(\mathbf{u}) \quad (6.4a)$$

donde

$$\mathbf{u} = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho \mathbf{v}_r \\ E \end{bmatrix}, \quad \mathbf{f} = \begin{bmatrix} \rho \mathbf{v}_r \\ \rho \mathbf{v}_r^2 + p \\ \mathbf{v}_r (E + p) \end{bmatrix}, \quad \mathbf{s} = -\frac{1}{r} \begin{bmatrix} \rho \mathbf{v}_r \\ \rho \mathbf{v}_r^2 \\ \mathbf{v}_r (E + p) \end{bmatrix} \quad (6.4b)$$

y donde \mathbf{v}_r es la velocidad en la dirección radial r . Para la integración temporal de este sistema se obtiene primero una solución intermedia $\mathbf{u}^{(1)}$ que resulta de integrar temporalmente la parte homogénea de (6.4) mediante la discretización espacial de Harten-Yee, y luego utilizar esta solución para resolver la ODE

$$\frac{d\mathbf{u}}{dt} = \mathbf{s}(\mathbf{u}) \quad (6.5)$$

sujeta a las condiciones iniciales $\mathbf{u} = \mathbf{u}^{(1)}$.

La solución del problema unidimensional equivalente es obtenida sobre una discretización de 2800 nodos que corresponde a un tamaño de grilla de $5 \times 10^{-3}m$. La integración temporal de la ODE que incorpora los términos fuentes (6.5) se obtiene mediante un método de Runge Kutta de 4to orden.

En todos los casos la función de corrección de entropía se define de acuerdo a (5.15) donde el parámetro ϵ es elegido constante e igual a 0.1. El número de CFL se elige en todos los casos igual a 0.75. La batos de datos termodinámicos en el equilibrio químico nuevamente es la matriz $C_{III}^{(SET)}$.

En el caso bidimensional el esquema adaptivo se define mediante el siguiente criterio:

$$\text{Esq. HYAD} \equiv \begin{cases} g_{i,j}^{(2,3)}, g_{i+1,j}^{(2,3)} \equiv \text{minmod}(5.24) & \text{si } \max \left(I_{i+\frac{1}{2},j}^{(2)}, I_{i+\frac{1}{2},j}^{(3)} \right) \leq \max \left(I_{j+\frac{1}{2}}^{(1)}, I_{i+\frac{1}{2},j}^{(4)} \right) \\ g_{i,j}^{(2,3)}, g_{i+1,j}^{(2,3)} \equiv \text{superbee}(5.28) & \text{si } \max \left(I_{i+\frac{1}{2},j}^{(2)}, I_{i+\frac{1}{2},j}^{(3)} \right) > \max \left(I_{i+\frac{1}{2},j}^{(1)}, I_{i+\frac{1}{2},j}^{(4)} \right) \end{cases} \quad (6.6)$$

donde las intensidades de las ondas en la intercelda $I_{i+\frac{1}{2},j}^{(l)}$ a lo largo de la dirección ξ se evalúan mediante

$$I_{i+\frac{1}{2},j}^l = \|\alpha_{i+\frac{1}{2},j}^l(\mathbf{r}_\xi^l) i + \frac{1}{2}, j\| \quad (6.7)$$

donde $\alpha_{i+\frac{1}{2},j}^l$ es la l -componente del vector $\alpha_{i+\frac{1}{2},j}$ definido en (5.49) y donde $(\mathbf{r}_\xi^l) i + \frac{1}{2}, j$ es la l -columna de la matriz de vectores propios derechos $(\mathbf{R}_\xi) i + \frac{1}{2}, j$ (5.44a) evaluada en el estado promedio de Roe entre $\mathbf{u}_{i,j}$ y $\mathbf{u}_{i+1,j}$. La definición dada puede extenderse en forma análoga a lo largo de la dirección η .

6.2.1.1 Resultados obtenidos

6.2.1.2 Caso de prueba A

En la Figura 6.8 se muestran los resultados obtenidos mediante los esquemas HYMM, HYNAD y HYAD para el caso de prueba A en un tiempo de salida de 3.5 ms. Los resultados numéricos que se muestran en éste y los siguientes casos corresponden a la línea diagonal dada por la condición $y = x$, donde $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ es la variable correspondiente al eje de abscisas. Es de esperar que la resolución de discontinuidades en esta dirección sea la más desfavorable debido a la desalineación máxima que existe entre los nodos de la grilla y la dirección radial de las ondas. No obstante, las comparaciones que fueron realizadas a lo largo de otras líneas muestran una resolución similar.

El patrón de ondas es similar al caso unidimensional análogo: una onda de expansión cilíndrica que viaja hacia el centro, y una onda de contacto y de choque cilíndrica que viajan hacia afuera. Tal como es esperado en el caso de explosiones cilíndricas, en el estado después de la onda de choque la entropía no se mantiene constante, presentándose una expansión que es una característica propia de los movimientos con simetría radial [4]. En este caso, todos los esquemas captan correctamente la onda de choque en un ancho de 3 celdas, mientras que los esquemas HYNAD y HYAD mejoran la captación de discontinuidad de contacto a un ancho de 3 celdas, en comparación al esquema HYMM que utiliza 5 celdas. Al igual que en el caso unidimensional, el coeficiente politrópico presenta un mínimo en los estados termodinámicos numéricos sobre la onda de contacto. En este caso, no se aprecian mejoras en la calidad de la solución debidas a la inclusión adaptiva de la función *superbee*, pudiéndose observar incluso que la técnica adaptiva induce un muy leve aumento de la difusión de la solución en las regiones intermedias entre la onda de contacto y la onda de choque en comparación a la técnica no adaptiva HYNAD.

6.2.1.3 Caso de prueba B

En la Figura 6.9 se presentan los resultados obtenidos para el caso de prueba B en un tiempo de 3.0 ms. En este caso, tanto el patrón e intensidad de las ondas es prácticamente similar al caso unidimensional. La más significativa diferencia es la aparición de un rápido aumento del número de Mach detrás de la onda de contacto. En este caso los tres esquemas resuelven en dos celdas la onda de choque, mientras que los esquemas que usan la función *superbee* en la onda 2, mejoran la captación de la discontinuidad de contacto capturando la misma en 2 celdas. Tal como en el caso A, no es posible observar

apreciables diferencias entre los resultados obtenidos con los esquemas HYNAD y HYAD.

6.2.1.4 Caso de prueba C

En la Figura 6.10 se presentan los resultados obtenidos para el caso de prueba C en un tiempo de 4.0 ms. El caso C presenta un sistema de ondas caracterizado por la presencia de una intensa discontinuidad de contacto cilíndrica cuasi estacionaria, un choque cilíndrico débil y una expansión transónica fuerte. En este caso la captura de la posición de la onda de choque es más precisa que en el caso unidimensional análogo. Los esquemas HYNAD y HYAD capturan prácticamente en forma exacta la onda de contacto, no pudiéndose observar diferencias apreciables entre estos dos últimos métodos.

6.2.1.5 Caso de prueba D

En la Figura 6.11 se presentan los resultados obtenidos para el caso de prueba D en un tiempo de 4.2 ms. En este caso el esquema HYNAD introduce una sobreestimación no física de la temperatura en la región delante de la discontinuidad de contacto mayor incluso que la inducida en el caso unidimensional análogo que es correctamente amortiguada por el esquema adaptivo HYAD. Esta mejora introducida por el esquema adaptivo se puede observar también en los gráficos del número de Mach y del coeficiente politrópico. En este caso particular se muestra nuevamente la capacidad de la técnica adaptiva de reducir oscilaciones espurias en la cercanía de ondas de contacto sin degradar la precisión.

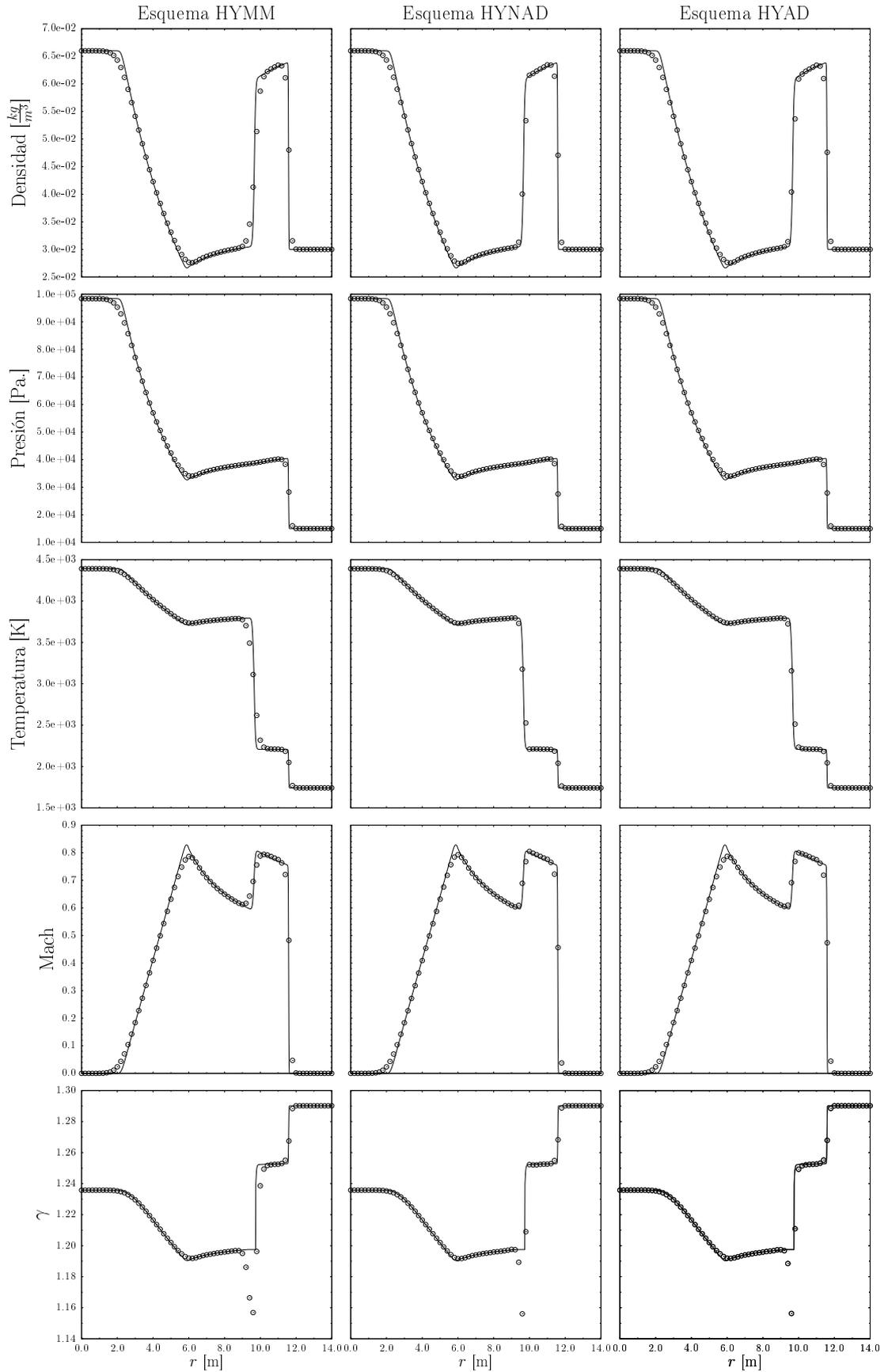


Figura 6.8: Comparación de los esquemas TVD considerando gas en equilibrio químico. Caso de prueba A con simetría cilíndrica. Tiempo de salida: 3.5 ms. Solución “exacta”: línea.

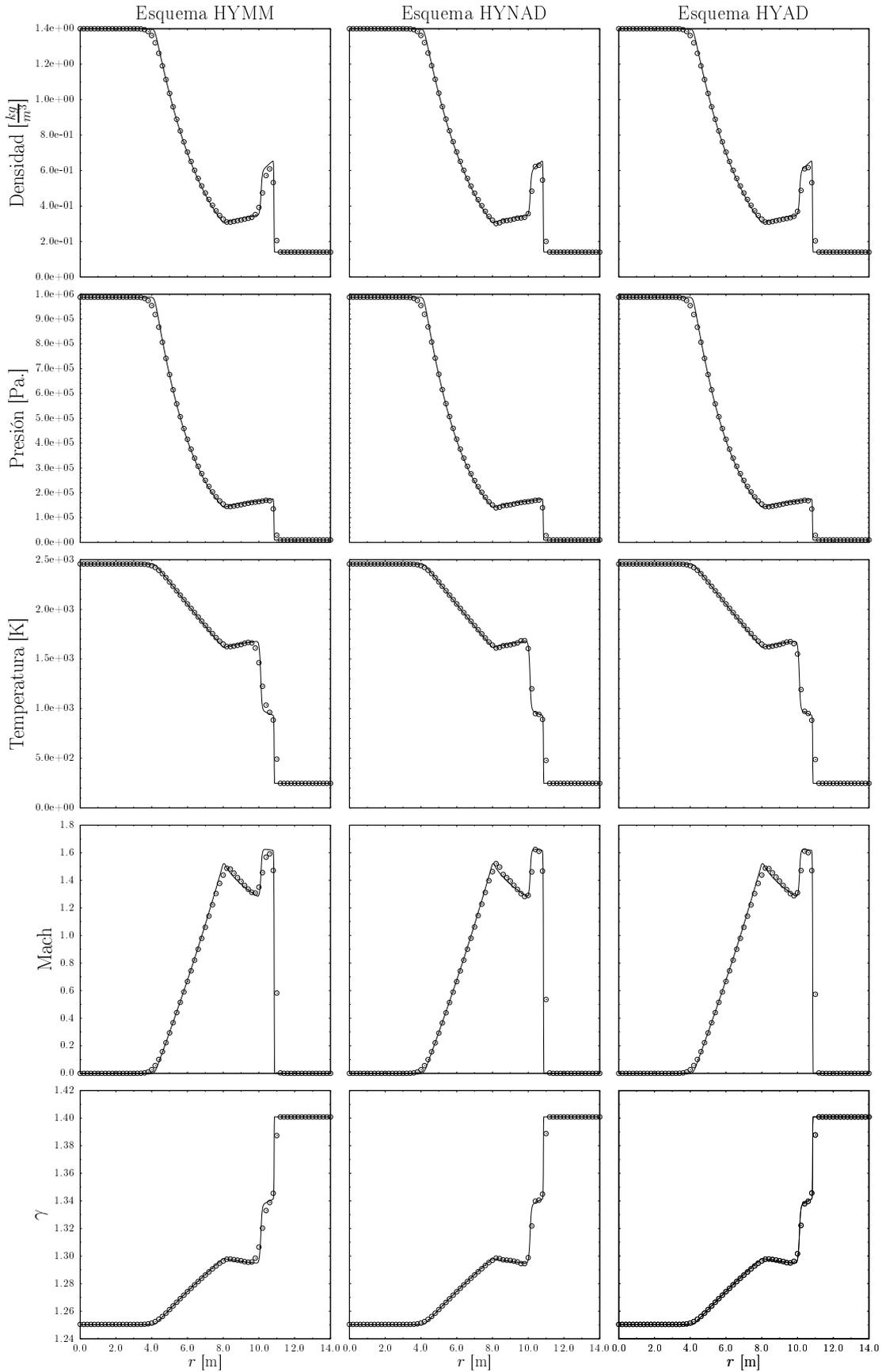


Figura 6.9: Comparación de los esquemas TVD considerando gas en equilibrio químico. Caso de prueba B con simetría cilíndrica. Tiempo de salida: 3.0 ms. Solución “exacta”: línea.

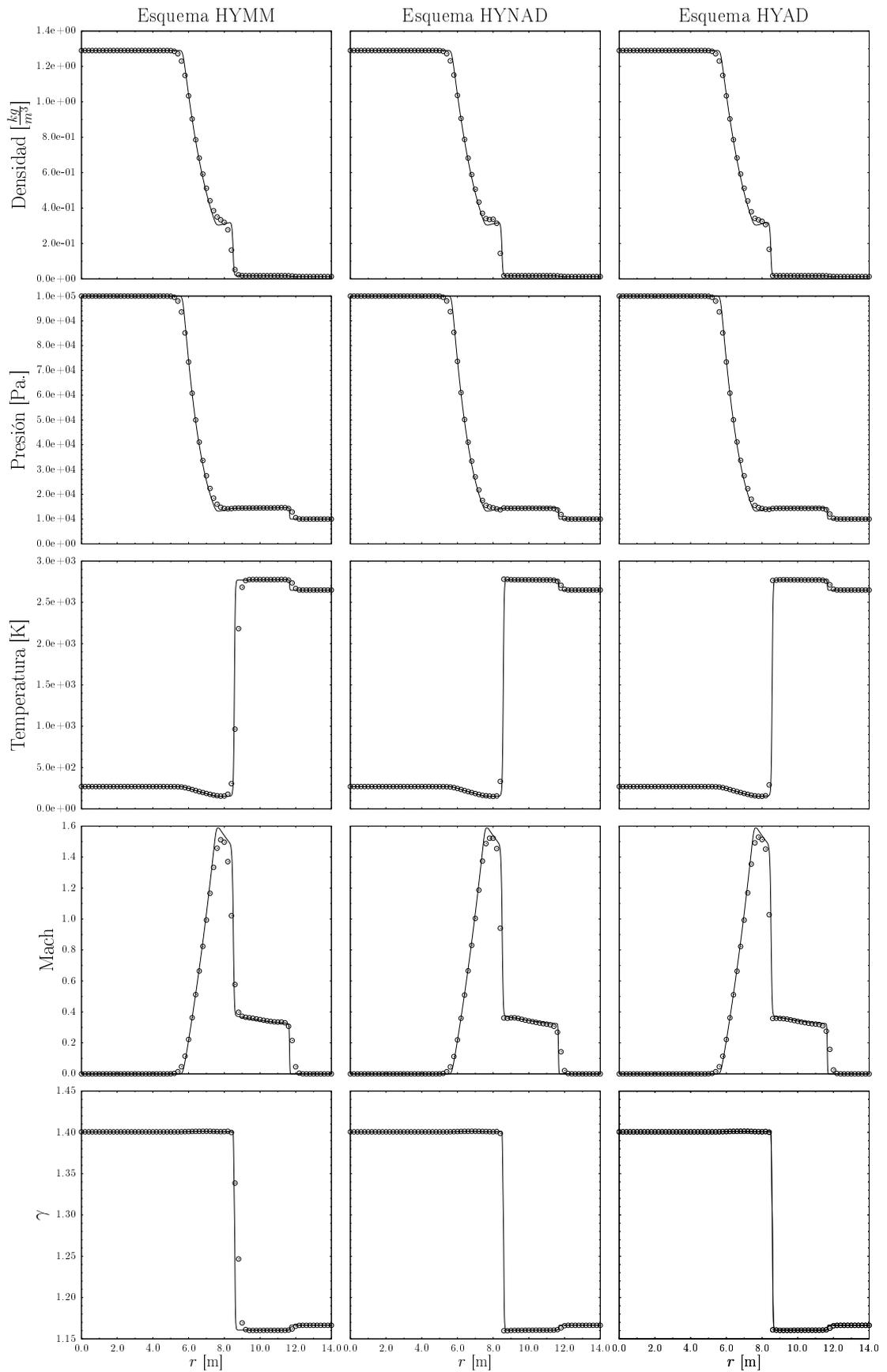


Figura 6.10: Comparación de los esquemas TVD considerando gas en equilibrio químico. Caso de prueba C con simetría cilíndrica. Tiempo de salida: 4.0 ms. Solución “exacta”: línea.

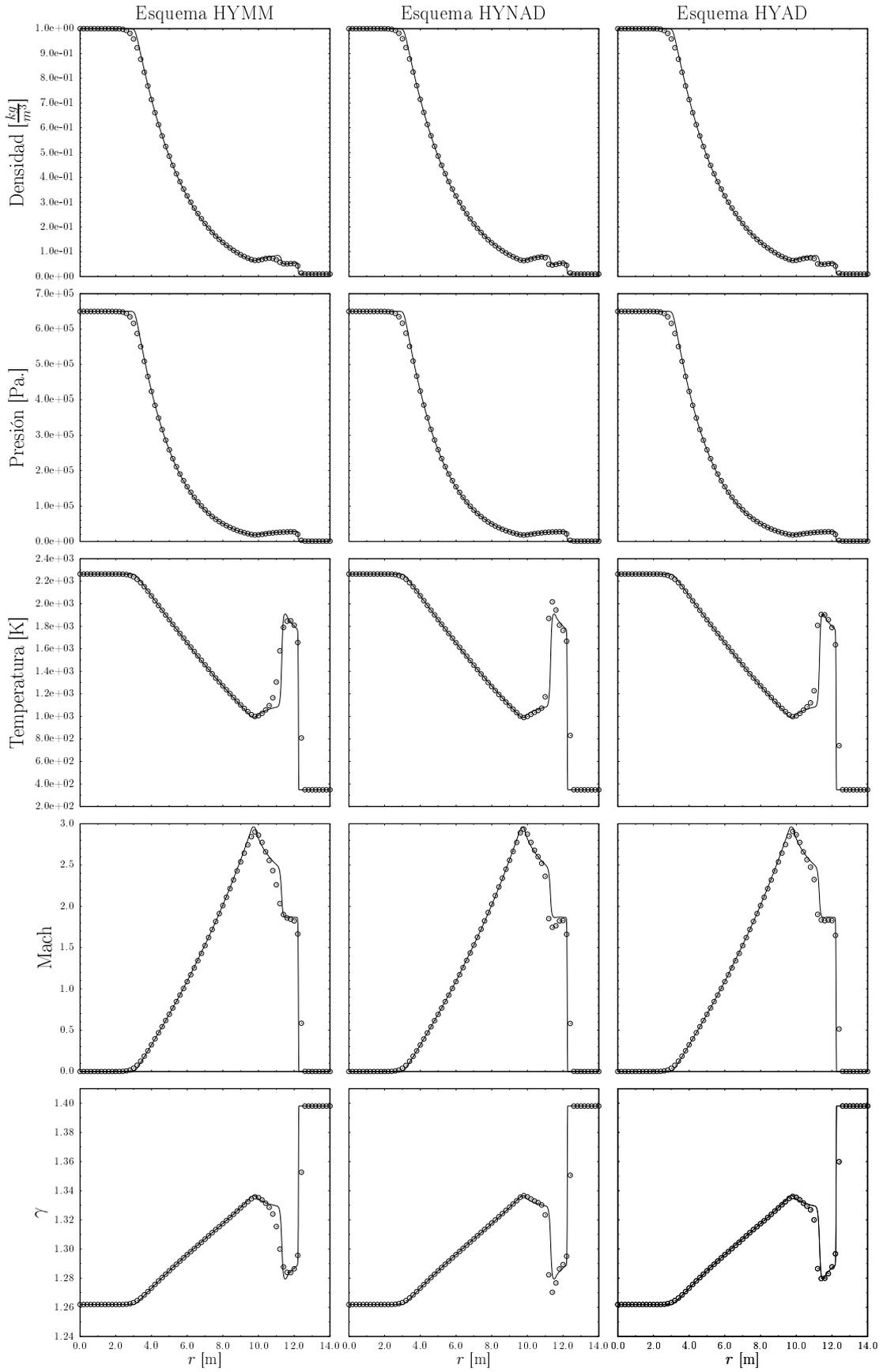


Figura 6.11: Comparación de los esquemas TVD considerando gas en equilibrio químico. Caso de prueba D con simetría cilíndrica. Tiempo de salida: 3.2 ms. Solución “exacta”: línea.

6.3 Flujo bidimensional estacionario hipersónico sobre cuerpos romos

Los cuerpos romos (*“blunt bodies”*) son configuraciones de particular interés en aerodinámica hipersónica debido a que prácticamente todos los vehículos hipersónicos utilizan narices redondeadas como forma de reducir el calentamiento aerodinámico [1]. Es posible demostrar que el calentamiento sobre la superficie del cuerpo es inversamente proporcional a la raíz cuadrada del radio de la nariz [1], indicando la eficiencia del *“blunt bodie”* en la reducción del calentamiento aerodinámico.

En la Figura 6.12 se muestra el esquema del problema del flujo supersónico sobre un cuerpo romo. En éste, una onda de choque curva se forma enfrente del cuerpo, cuya intensidad es máxima en la dirección del flujo que incide en forma normal al cuerpo. Detrás de la región donde el choque es normal o aproximadamente normal al flujo, éste ingresa en una región subsónica mientras que en las regiones donde el flujo atraviesa el choque a menores ángulos, el flujo detrás de la onda es supersónico. Ambas regiones se encuentran separadas por la denominada línea sónica. La interacción en el estado estacionario de regiones subsónicas (de naturaleza elíptica) y supersónicas (de naturaleza hiperbólica) planteó históricamente un desafío adicional en el desarrollo de métodos de solución numérica aplicados a este problema [1]. Desde el trabajo de Moretti en 1966 [8], la técnica más utilizada para resolver flujos sobre cuerpos romos consiste en obtener la solución el sistema de ecuaciones de Euler inestacionario, que es hiperbólico bajo cualquier condición del flujo, partiendo de una condición inicial arbitraria y avanzando la solución hasta un tiempo límite donde se obtiene la solución del flujo estacionario.

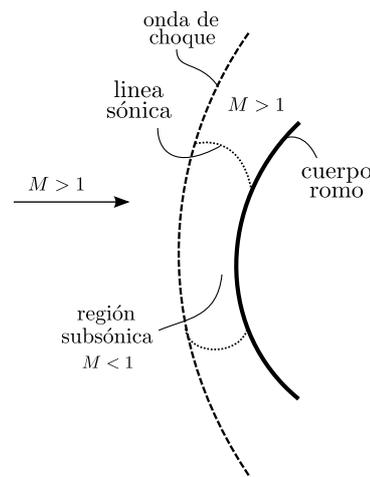


Figura 6.12: Problema del cuerpo romo.

En flujos hipersónicos donde el Mach de vuelo es ampliamente superior a la unidad, las altas tasas de transferencia presentes entre la energía cinética y los modos de energía térmica detrás de la onda de choque que se forma sobre un cuerpo romo, elevan la temperatura hasta niveles tales que se producen cambios en la composición química del gas y no son de aplicación las hipótesis de gas calórico perfecto. A su vez, debido a la naturaleza endotérmica de las reacciones químicas presentes, las temperaturas que se alcanzan son sumamente menores a las que se obtendrían en el caso de considerar válidas estas últimas hipótesis. Asimismo, esta reducción en la temperatura aumenta los valores de densidad obtenidos detrás de la onda choque, haciendo que la misma, por conservación de la cantidad de masa, reduzca su distancia con respecto al cuerpo.

En esta sección se presentan resultados del flujo hipersónico estacionario sobre un cuerpo romo de forma cilíndrica. Se utilizan dos tipos de condiciones de la corriente libre: número de Mach igual a 15 a las condiciones de atmósfera estándar correspondientes a una altura de 20 km, y número de Mach 25 a una altura de 40 km. En ambos casos se comparan los resultados obtenidos asumiendo gas en equilibrio químico y asumiendo gas calórico perfecto. Además, se realiza una comparación de los resultados obtenidos mediante los esquemas HYMM, HYAD, HYNAD definidos en la sección anterior, desde el punto de vista de la precisión de los resultados y de las propiedades de convergencia a la solución estacionaria.

6.3.1 Descripción de los casos resueltos

6.3.1.1 Definición geométrica

En la Figura 6.13 se muestra los parámetros dimensionales que definen la geometría del dominio físico considerado. Se muestra una sola mitad del dominio ya que se consideran condiciones de simetría del flujo a lo largo del eje x . Tal como se aprecia en la figura, el cuerpo romo consiste en una semielipse de semiejes a_i y b_i , mientras que las dimensiones del dominio quedan determinadas por la semielipse mayor de semiejes a_e y b_e . En la Tabla 6.3 se detallan los parámetros del dominio computacional que corresponden al flujo sobre un semicilindro de radio 1 m., similar al presentado en [6]. Nótese que se ha elegido un dominio más pequeño en el caso de gas en equilibrio químico, debido a que es esperado que en este caso la onda de choque se ubique más cerca del cuerpo.

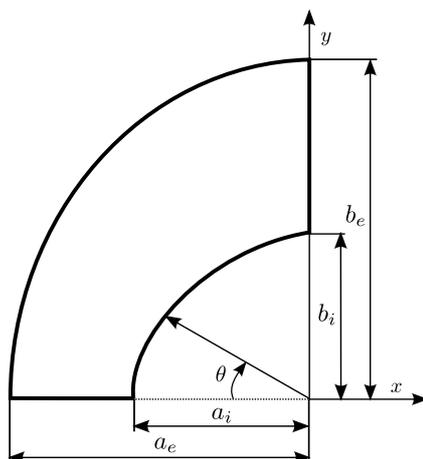


Figura 6.13: Problema del cuerpo romo. Definición del dominio físico.

Caso	a_i [m.]	b_i [m.]	a_e [m.]	b_e [m.]
Gas calórico perfecto	1.0	1.0	1.7	3.0
Gas en equilibrio químico	1.0	1.0	1.4	2.7

Tabla 6.3: Problema del cuerpo romo. Parámetros geométricos del dominio físico.

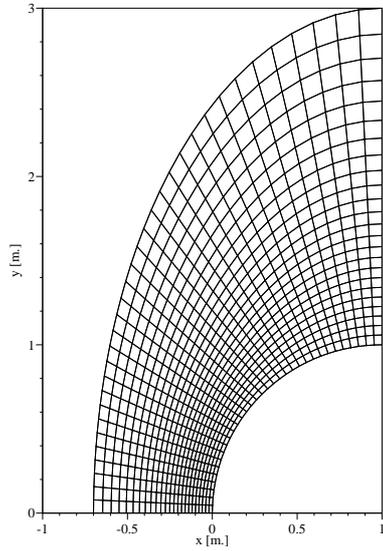
6.3.1.2 Discretización del dominio

Con motivos de mostrar la independencia de malla de los resultados obtenidos, se utilizaron dos tipos de discretizaciones del dominio. Una discretización que denominaremos *gruesa* con un total de 35 nodos en la dirección ξ (tangencial) y 25 nodos en la dirección η (radial), (véase la Fig. 6.15 para la definición de estas direcciones). Una segunda discretización, que denominaremos *fina*, tiene el doble del número de nodos en ambas direcciones, es decir 70 nodos en la dirección ξ y 50 nodos en la dirección η . La malla fue realizada mediante un método algebraico el cuál satisface la condición de normalidad al borde sólido.

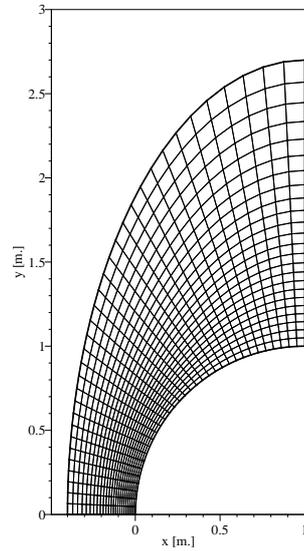
En la Figura 6.14 se muestran las discretizaciones del dominio utilizadas tanto en los casos de gas perfecto como de gas en equilibrio químico.

6.3.1.3 Condiciones de borde

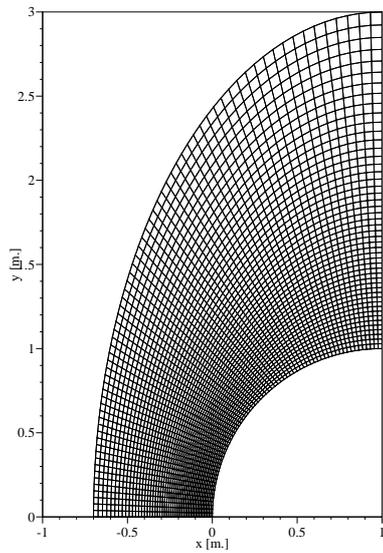
Las condiciones que se aplican sobre el contorno del dominio se detallan en la Figura 6.15. En el caso del contorno de simetría los valores de la densidad, velocidad tangencial y energía interna en el contorno son obtenidos por extrapolación de primer orden, mientras



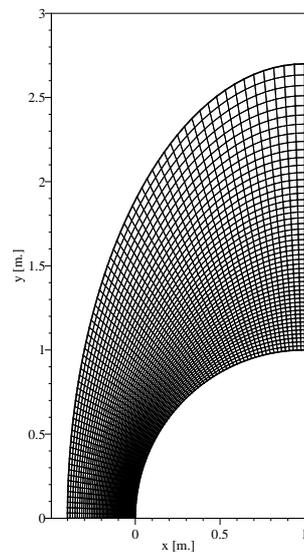
(a) Gas calórico perfecto. Malla: 25×50



(b) Gas en equilibrio químico. Malla: 25×50



(c) Gas calórico perfecto. Malla: 50×75



(d) Gas en equilibrio químico. Malla: 50×75

Figura 6.14: Problema del cuerpo romo. Discretización utilizada.

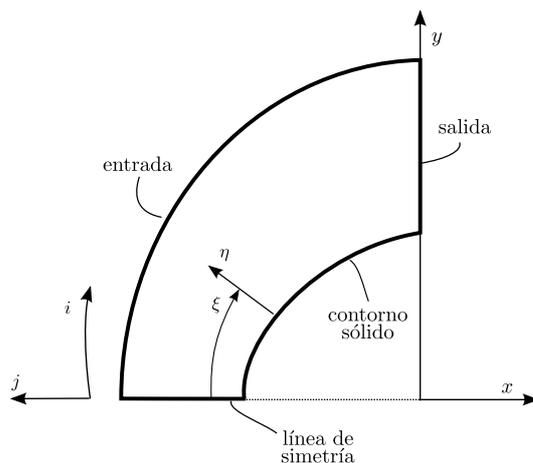


Figura 6.15: Problema del cuerpo romo. Condiciones de contorno.

que se impone la condición de nulidad de la velocidad normal a la línea de simetría. En la entrada se imponen las condiciones de la corriente libre, mientras que la salida es considerada supersónica obteniéndose los valores en el contorno por extrapolación de primer orden desde los valores del interior del dominio. En el caso del contorno sólido el tratamiento es similar al discutido en la Sección , donde la velocidad tangencial es obtenida por extrapolación de primer orden, mientras que la densidad en el borde es obtenida por extrapolación de segundo orden.

6.3.1.4 Condiciones iniciales e integración temporal

Las condiciones iniciales se imponen igual a la corriente libre en todo el dominio. Dadas estas condiciones iniciales, los cambios abruptos que atraviesan las variables del flujo en los primeros pasos de tiempo puede dar lugar a la aparición de estados no físicos (presiones y/o densidades negativas). De forma evitar este comportamiento, se relaja la condición de no penetración en las primeras iteraciones, donde la misma es impuesta en forma gradual en función del número de iteraciones. En todos los casos presentados, fue suficiente la aplicación de esta estrategia en aproximadamente las primeras 500 iteraciones. En la Tabla 6.4 se detallan las condiciones de la corriente libre de los dos casos tratados: Mach de vuelo 15 en condiciones de atmósfera estándar a 20 km. de altura y Mach 25 a una altura de 40 km.

En el caso de gas calórico perfecto se asumen válidas las ecuaciones de estado

$$\frac{p}{\rho} = RT, \quad e = \frac{p}{(\gamma - 1)\rho} \quad (6.8)$$

donde R es la constante del aire igual a $287.053 \frac{J}{kg \cdot K}$ y γ igual a 1.4 Es sencillo mostrar que en un gas calórico perfecto $\kappa = \gamma - 1$ y $\xi = 0$ permitiendo obtener en forma exacta el estado promedio de Roe en 5.35, siendo esta la única modificación que se introduce en el esquema.

Caso	Densidad kg/m^3	Presión N/m^2	Temperatura K	Velocidad m/sec
Altura: 20 Km. Mach: 15	8.8035×10^{-2}	5474.89	216.65	4426.0
Altura: 40 Km. Mach: 25	3.851×10^{-3}	277.52	2751.05	7940.8

Tabla 6.4: Problema del cuerpo romo. Condiciones iniciales de cada caso.

No es un objetivo de esta tesis la implementación de un método de integración temporal de alta tasa de convergencia, sino el estudio de la influencia que tienen las funciones limitadoras utilizadas en la discretización espacial comparadas bajo el mismo método de integración temporal. Debido a esto se utilizó para la integración temporal el método Runge Kutta TVD de 2do orden ya aplicado en los problemas transitorios. El número de CFL se elige igual a 0.2. Este valor conservativo fue necesario para la estabilización de los resultados presentados.

6.3.1.5 Corrector de entropía

Es ampliamente conocida [11] la tendencia que presentan los esquemas basados en el solver de Riemann de Roe a converger a soluciones no físicas en el flujo hipersónico sobre cuerpos romos. Por ejemplo, la patología numérica conocida como *carbuncle phenomenon* [3] que se presenta en mallas de elementos altamente alineados en la zona donde la onda de choque es normal al flujo. De forma de evitar este tipo de fenómenos, Yee [11] propone utilizar en el caso del “*blunt bodie*” el siguiente parámetro ϵ del corrector de entropía basado en el radio espectral de la matriz jacobiana transformada al dominio computacional, que para el flujo en la interface $(i + \frac{1}{2}, j)$ está dado por

$$\epsilon_{i+\frac{1}{2},j} = \tilde{\epsilon} \left(|(\xi_x)_{i+\frac{1}{2},j} \tilde{v}_x + (\xi_y)_{i+\frac{1}{2},j} \tilde{v}_y| + |(\eta_x)_{i+\frac{1}{2},j} \tilde{v}_x + (\eta_y)_{i+\frac{1}{2},j} \tilde{v}_y| + \frac{1}{2}(k_\xi + k_\eta) \tilde{c} \right) \quad (6.9)$$

donde la tilde denota el estado promedio de Roe entre los estados $\mathbf{u}_{i,j}$ y $\mathbf{u}_{i+\frac{1}{2},j}$, $k_\xi = \sqrt{\xi_x^2 + \xi_y^2}$ y donde el subíndice $i + \frac{1}{2}, j$ indica el promedio aritmético entre i, j y $i + 1, j$.

Un valor del parámetro constante $\tilde{\epsilon}$ en (6.9) de 0.15 para el caso de Mach 15, y de 0.25 en el caso de Mach 25, fue suficiente para estabilizar los resultados.

6.3.2 Resultados obtenidos. Caso I. Altura: 20 km. Mach: 25

En las Figuras 6.16, 6.17, 6.18 y 6.19 se presentan los gráficos de líneas de contorno en el dominio para la densidad, presión, temperatura y número de Mach respectivamente, de los resultados estacionarios en el caso de altura 20 km, Mach 15 utilizando la discretización más fina de 70×35 elementos y el esquema HYMM. Se puede observar una alta resolución numérica de la onda de choque en las regiones más cercanas a la línea de simetría, donde la malla se encuentra altamente alineada con los cambios en el flujo. En la zona cercana a la salida se observa una leve distorsión del choque, debido a que en esta zona la geometría de la malla pierde alineación con la geometría de la onda, mostrando la influencia que ésta tiene sobre la calidad de los resultados.

Con respecto a la composición del gas en el equilibrio químico, se presentan en la Figura 6.20 las líneas de contorno correspondientes a la distribución de las fracciones molares de las especies N_2 , O_2 , N y O . Se observa que en la región detrás del choque normal aproximadamente un 18% del nitrógeno presente se disocia en nitrógeno libre, mientras que la disociación del oxígeno es prácticamente total.

En las Figuras 6.21, 6.22, 6.23 y 6.24 se presentan los resultados para la densidad, presión, temperatura y número de Mach sobre la superficie del cuerpo respectivamente en función del ángulo θ definido en la Figura 6.13. Se observa que los tres esquemas HYMM, HYNAD y HYAD brindan resultados prácticamente similares.

En las Figuras 6.25, 6.26, 6.27 se presentan los resultados de la densidad, presión, temperatura respectivamente a lo largo de la línea de simetría donde el choque es normal a la dirección del flujo. En este caso, superpuestos a los resultados de gas calórico perfecto se grafican la solución exacta que se obtiene al resolver las condiciones de Rankine Hugoniot considerando un choque normal, y utilizar las mismas para hallar las condiciones en el punto de impacto. A fines de comparación, la posición de la onda de choque graficada com “exacta” corresponde a la obtenida mediante la correlación experimental de Billig [2], en la cual la distancia δ de la onda de choque al punto de impacto sobre la línea de simetría se encuentra dada por

$$\frac{\delta}{R} = 0.386 \exp \left[4.67/M_\infty^2 \right]$$

donde R es el radio del cilindro y M_∞ es el número de Mach de la corriente libre.

Se observa la excelente correspondencia entre los resultados numéricos y la solución exacta, siendo los resultados obtenidos mediante los esquemas HYMM, HYNAD y HYAD prácticamente similares. La captura de la onda de choque se produce en un ancho de

una celda para el caso de gas calórico perfecto y de dos celdas en el caso de gas en equilibrio químico. Notese como las hipótesis de gas en equilibrio químico prácticamente aumentan solamente un % 4 los valores de la presión calculada sobre el punto de impacto, mientras que disminuyen en aproximadamente un 47 % los valores de la temperatura, que en el caso de gas calórico perfecto es de aproximadamente 10000 K sobre el punto de impacto. Debido a que esta disminución de la temperatura aumenta la densidad que se obtienen detrás de la onda de choque en el caso de equilibrio químico disminuyen, por conservación de la masa, la distancia de la misma al cuerpo. En el caso de gas calórico perfecto se obtiene una distancia sobre la línea de simetría de la onda de choque al cuerpo aproximadamente igual a 0.384 m. mientras que para el gas en equilibrio químico esta distancia se reduce a 0.219 m.

A modo de mostrar en forma numérica la precisión de los valores obtenidos se presentan en la Tabla 6.5 los errores de la temperatura calculada sobre la línea de simetría en ambas discretizaciones, utilizando los valores del nodo ubicado inmediatamente detrás del choque normal y del nodo ubicado sobre el punto de impacto. Se nota que los errores en equilibrio químico son aproximadamente dos veces menores que los de gas calórico perfecto detrás de la onda de choque, mientras que la reducción del error al aumentar en 2 el grado de discretización es de aproximadamente un %66 para los resultados en gas en equilibrio químico y de un %50 en el caso de gas calórico perfecto.

La independencia de los resultados con respecto a la discretización del dominio se presenta en las Figuras 6.28 y 6.29 a través de la comparación de los resultados obtenidos de la presión y temperatura respectivamente sobre el cuerpo, empleando las mallas gruesa y fina, observándose una excelente correspondencia en todos los casos.

Finalmente, se presentan en las Figuras 6.30 y 6.31 las curvas de convergencia graficando la norma L_2 del residuo de la densidad en función del número de iteraciones para las discretizaciones gruesa y fina respectivamente donde la norma L_2 del residuo se define mediante la expresión:

$$L_2(Res(\rho)) = \frac{\sqrt{\sum_{i=1}^{NI} \sum_{j=1}^{NJ} (\rho_{i,j}^{n+1} - \rho_{i,j}^n)^2}}{(t^{n+1} - t^n)(NI \times NJ)} \quad (6.10)$$

donde NI y NJ son los números de nodos a lo largo de las direcciones ξ y η respectivamente.

En este caso, y tal como fue reportado por otros autores [12], se obtuvieron las mejores propiedades de convergencia mediante el uso de la función limitadora *minmod* en todas

las ondas, i.e. el esquema HYMM. Asimismo se nota que el equilibrio químico reduce la tasa de convergencia en todos los casos. La aplicación de la función *superbee* introduce un claro comportamiento errático en las propiedades de convergencia. Por ejemplo, para la discretización gruesa, mientras que el esquema adaptivo HYAD presenta tasas de convergencia similares al esquema HYMM, cuando se considera gas en equilibrio químico, converge a una solución que oscila alrededor de un punto fijo. En la discretización más fina, los dos esquemas que utilizan la función *superbee* convergen a soluciones que oscilan alrededor de un punto fijo cuando es considerado gas en equilibrio químico. Se comprobó que estas oscilaciones se producían principalmente en la región cercana a la intersección de la línea sónica con la onda de choque y que no presentaban prácticamente influencia sobre los resultados obtenidos sobre el cuerpo y la región normal al choque.

6.3.3 Resultados obtenidos. Caso II. Altura: 40 km. Mach: 25

En las Figuras 6.32, 6.33, 6.34 y 6.35 se presentan los gráficos de líneas de contorno en el dominio para la densidad, presión, temperatura y número de Mach respectivamente, de los resultados obtenidos para el caso de altura 40 km, Mach 25.

Con respecto a la composición química del gas, presentada en la Figura 6.36, se observa en este caso que aproximadamente un 80 % del nitrógeno se disocia en nitrógeno libre, mientras que prácticamente la totalidad del oxígeno se disocia en oxígeno libre en la zona del punto de impacto.

En las Figuras 6.37, 6.38, 6.39 y 6.40 se presentan los resultados de la densidad, presión, temperatura y número de Mach respectivamente, sobre la superficie del cuerpo. Nuevamente, las tres variantes del esquema de Harten Yee no brindan apreciables diferencias en ninguno de los casos.

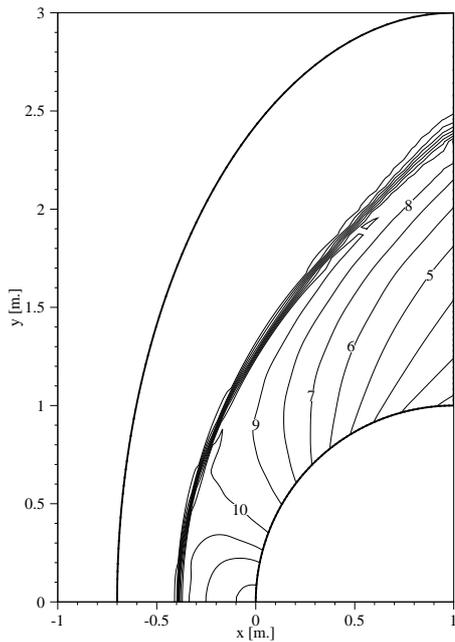
Los resultados para la densidad, presión y temperatura sobre la línea de simetría se presentan en las Figuras 6.41, 6.42, 6.43 respectivamente. En este último caso es posible notar la amplia reducción sobre los valores de temperatura que se obtienen en la región detrás de la onda de choque al considerar gas en equilibrio químico. En este último caso, la temperatura en el punto de impacto es aproximadamente igual a 7770 K, ampliamente menor que el valor de 31630 K obtenido en el caso de considerar gas calórico perfecto. Asimismo, la distancia calculada de la onda de choque al punto de impacto se reduce de un valor aproximado de 0.368 m. en gas calórico perfecto a un valor de 0.140 m. en el caso de gas en equilibrio químico.

En la Tabla 6.6 se tabulan los errores obtenidos para este caso de la temperatura sobre la línea de simetría utilizando ambas discretizaciones. En este caso se observa una

precisión de aproximadamente un orden de magnitud mayor en los cálculos considerando equilibrio químico. Esta mayor precisión se puede explicar debido a que la sensibilidad del error en la temperatura con respecto al error en la densidad es proporcional a $\frac{1}{\rho^2}$ en el caso de gas calórico perfecto, mientras que en el cálculo del equilibrio químico aparentemente, y de acuerdo a los resultados aquí obtenidos, dicha sensibilidad es aproximadamente proporcional al valor de la densidad. Finalmente, se presentan en las Figuras 6.44 y 6.45 las curvas de convergencia. Nuevamente el esquema HYMM presenta las mejores tasas de convergencia. En este caso, el esquema adaptivo HYAD converge únicamente en el caso de la discretización fina considerando gas perfecto, mientras que en los restantes casos oscila alrededor de un punto fijo. Por otro lado, el esquema no adaptivo HYNAD converge sólo en la discretización gruesa, mientras que en la discretización fina oscila alrededor de un punto fijo, dando cuenta en otro experimento numérico del comportamiento errático que introduce la función limitadora *superbee* en las propiedades de convergencia del esquema de Harten Yee.

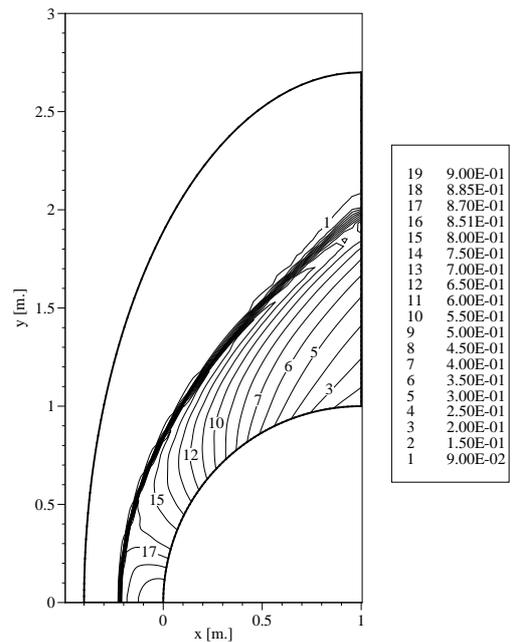
6.3.4 Discusión general

En los problemas de flujo en régimen hipersónico estacionario sobre cuerpos romos presentados en esta sección se pudo comprobar la robustez y precisión general del esquema de Harten Yee desarrollado, en la resolución numérica de este tipo de flujos. Se evidencian mediante los casos resueltos la importancia central que tienen las hipótesis de gas en equilibrio químico en el cálculo de variables de diseño tales como la distribución de temperaturas sobre el cuerpo. Por otro lado, se obtuvo que la introducción de la función limitadora *superbee* en las ondas linealmente degeneradas no presenta prácticamente influencia en los resultados obtenidos sobre las regiones de interés del dominio. No obstante, bajo las mismas condiciones de integración temporal, esta función resulta en menores tasas de convergencia a la solución estacionaria que las obtenidas al utilizar la función *minmod* en todas las ondas, o incluso la convergencia a una solución oscilatoria alrededor de un punto fijo. Se comprobó además que este comportamiento oscilatorio no influye en todo el campo de movimiento sino que se encuentra confinado a los nodos computacionales cercanos a la intersección entre la línea sónica y la onda de choque separada. La introducción de la función *superbee* en forma adaptiva si bien logra salvar este comportamiento en algunos casos, en otros disminuye las propiedades de convergencia con respecto al método no adaptivo, por lo que no pueden extraerse conclusiones a partir de los resultados aquí presentados, sobre las posibles ventajas del uso de dicha técnica en el cálculo de flujos hipersónicos estacionarios sobre cuerpos romos.



14	5.52E-01
13	5.48E-01
12	5.35E-01
11	5.23E-01
10	5.00E-01
9	4.50E-01
8	4.00E-01
7	3.50E-01
6	3.00E-01
5	2.50E-01
4	2.00E-01
3	1.50E-01
2	1.00E-01
1	8.04E-02

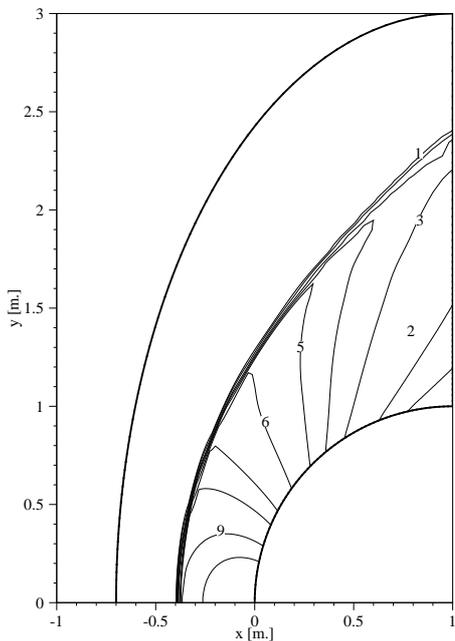
(a) Gas calórico perfecto.



19	9.00E-01
18	8.85E-01
17	8.70E-01
16	8.51E-01
15	8.00E-01
14	7.50E-01
13	7.00E-01
12	6.50E-01
11	6.00E-01
10	5.50E-01
9	5.00E-01
8	4.50E-01
7	4.00E-01
6	3.50E-01
5	3.00E-01
4	2.50E-01
3	2.00E-01
2	1.50E-01
1	9.00E-02

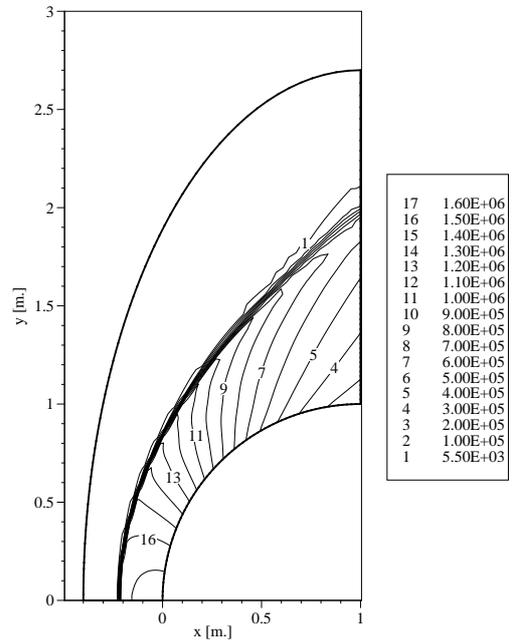
(b) Gas en equilibrio químico

Figura 6.16: Líneas de contorno de la distribución de densidad $\left[\frac{kg}{m^3}\right]$
 Altura: 20 Km. Mach: 15. Malla: 70×35 . Esquema: HYMM.



10	1.51E+06
9	1.45E+06
8	1.33E+06
7	1.23E+06
6	1.05E+06
5	8.46E+05
4	7.01E+05
3	5.55E+05
2	3.50E+05
1	2.30E+05

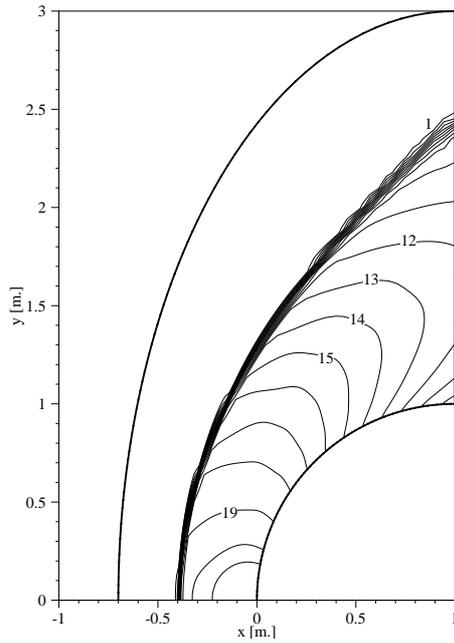
(a) Gas calórico perfecto.



17	1.60E+06
16	1.50E+06
15	1.40E+06
14	1.30E+06
13	1.20E+06
12	1.10E+06
11	1.00E+06
10	9.00E+05
9	8.00E+05
8	7.00E+05
7	6.00E+05
6	5.00E+05
5	4.00E+05
4	3.00E+05
3	2.00E+05
2	1.00E+05
1	5.50E+03

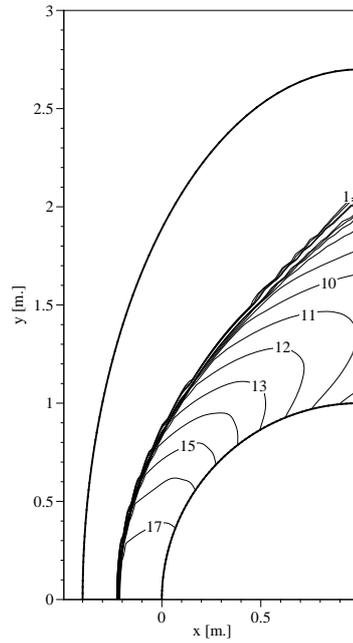
(b) Gas en equilibrio químico

Figura 6.17: Líneas de contorno de la distribución de presión [Pa.].
 Altura: 20 Km. Mach: 15. Malla: 70×35 . Esquema: HYMM.



21	9.90E+03
20	9.80E+03
19	9.50E+03
18	9.00E+03
17	8.51E+03
16	8.00E+03
15	7.50E+03
14	7.00E+03
13	6.50E+03
12	6.00E+03
11	5.50E+03
10	5.00E+03
9	4.50E+03
8	4.00E+03
7	3.50E+03
6	3.00E+03
5	2.50E+03
4	2.00E+03
3	1.50E+03
2	1.00E+03
1	5.00E+02

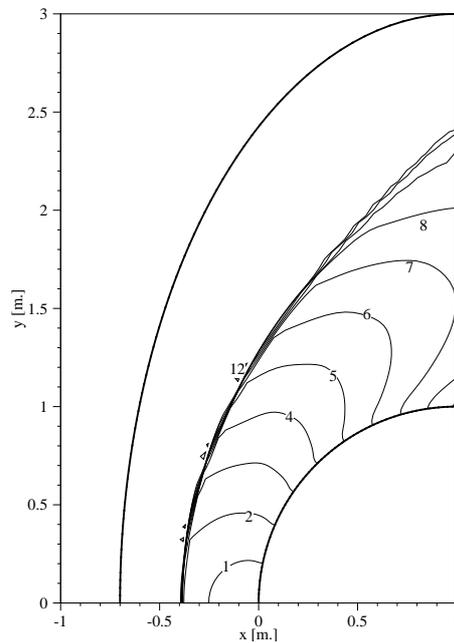
(a) Gas calórico perfecto.



17	5.20E+03
16	5.00E+03
15	4.80E+03
14	4.60E+03
13	4.40E+03
12	4.20E+03
11	4.00E+03
10	3.80E+03
9	3.60E+03
8	3.40E+03
7	3.20E+03
6	3.00E+03
5	2.80E+03
4	1.20E+03
3	1.00E+03
2	6.00E+02
1	4.00E+02

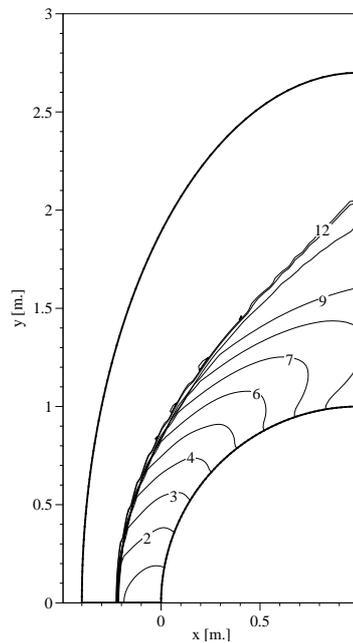
(b) Gas en equilibrio químico

Figura 6.18: Líneas de contorno de la distribución de temperatura [K.]
 Altura: 20 Km. Mach: 15. Malla: 70 × 35. Esquema: HYMM.



12	1.50E+01
11	4.00E+00
10	3.00E+00
9	2.25E+00
8	2.00E+00
7	1.75E+00
6	1.50E+00
5	1.25E+00
4	1.00E+00
3	7.50E-01
2	5.00E-01
1	2.50E-01

(a) Gas calórico perfecto.



13	1.50E+01
12	1.26E+01
11	1.00E+01
10	3.00E+00
9	2.25E+00
8	2.00E+00
7	1.75E+00
6	1.50E+00
5	1.25E+00
4	1.00E+00
3	7.50E-01
2	5.00E-01
1	2.50E-01

(b) Gas en equilibrio químico

Figura 6.19: Líneas de contorno de la distribución de número de Mach.
 Altura: 20 Km. Mach: 15. Malla: 70 × 35. Esquema: HYMM.

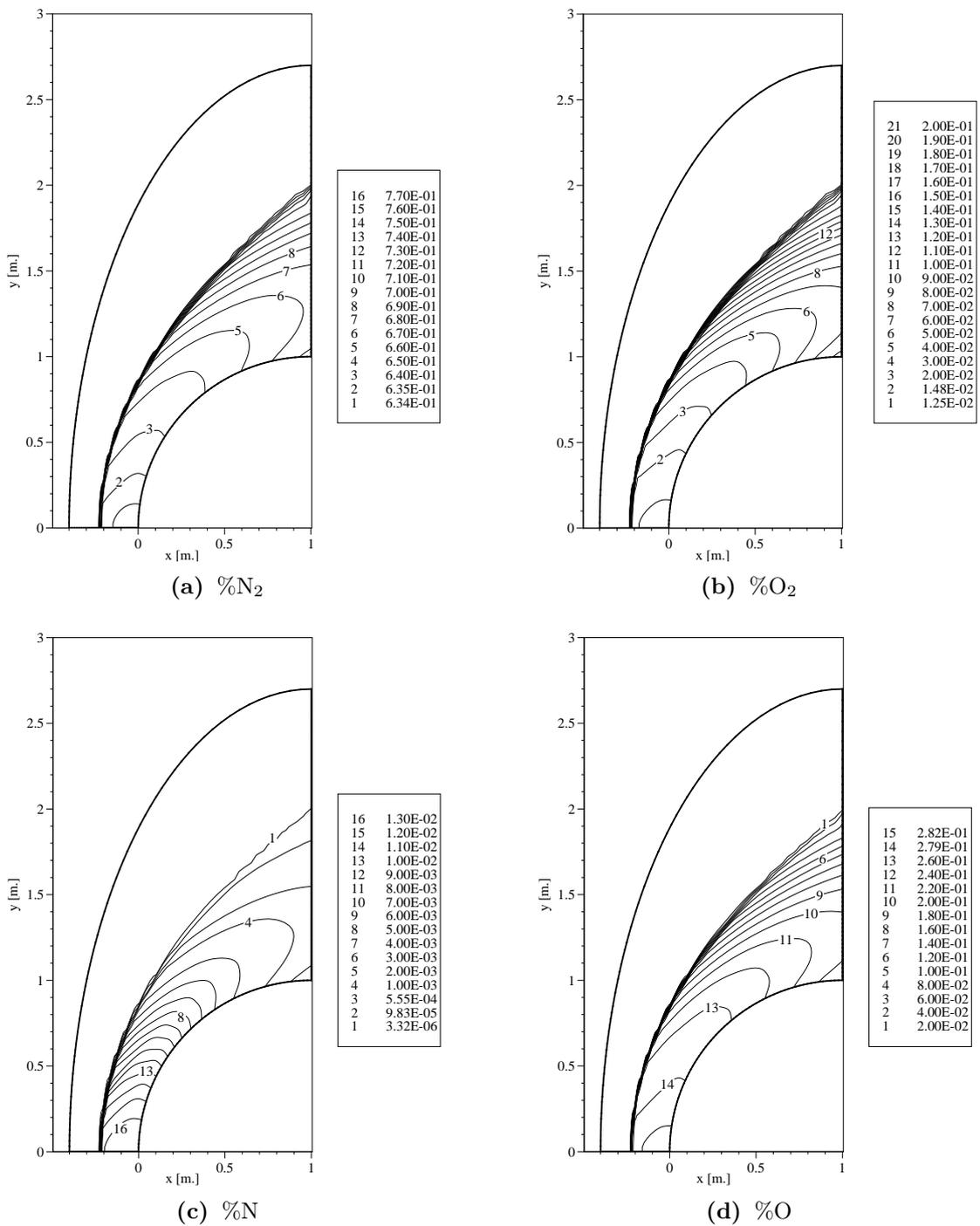


Figura 6.20: Líneas de contorno de las concentraciones molares de N₂, O₂, N y O. Gas en equilibrio químico. Altura: 20 Km. Mach: 15. Malla: 70 × 35. Esquema: HYMM.

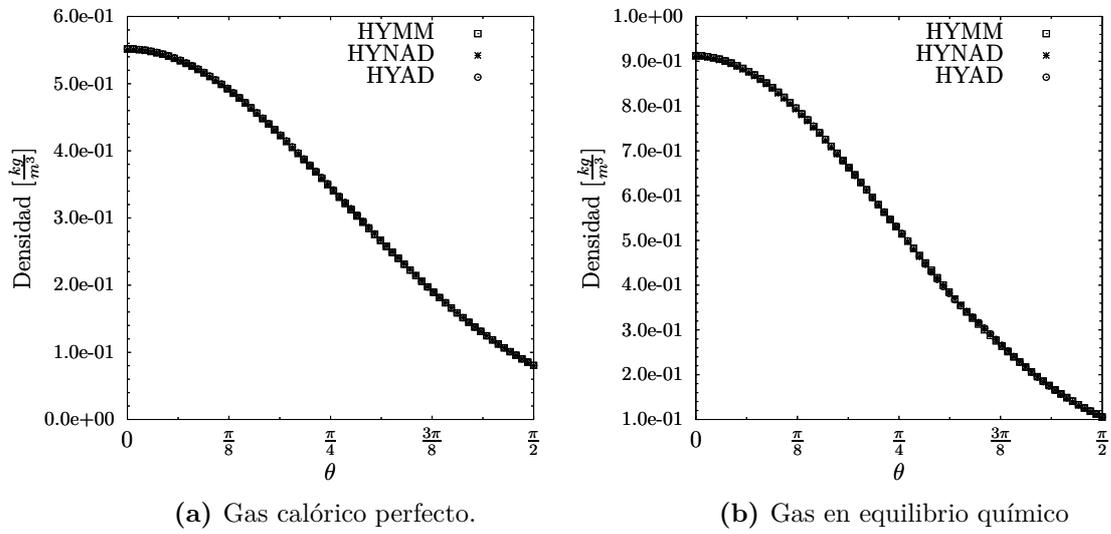


Figura 6.21: Distribución de densidad sobre la superficie del cuerpo romo.
 Altura: 20 Km. Mach: 15.

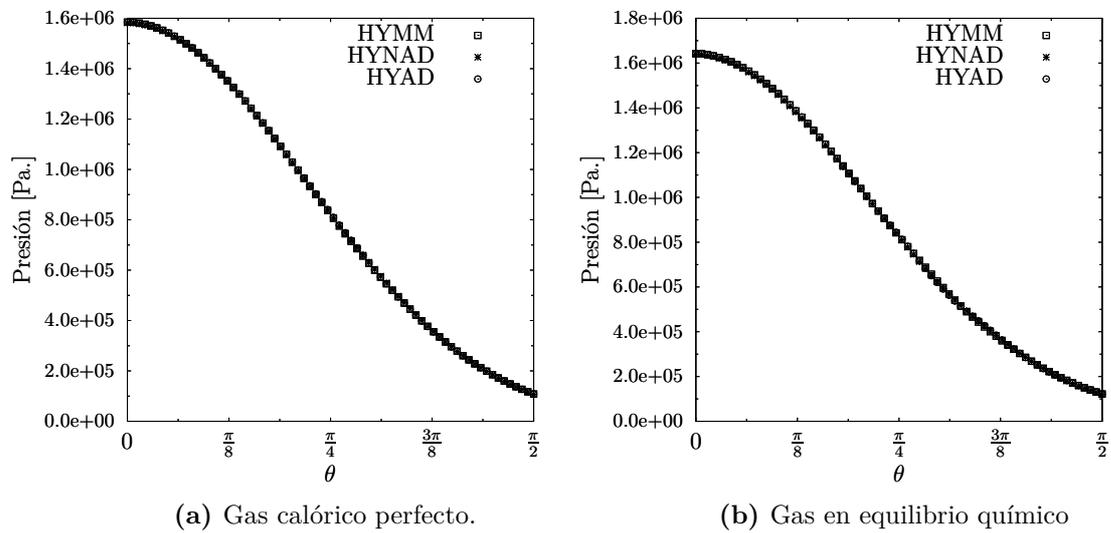
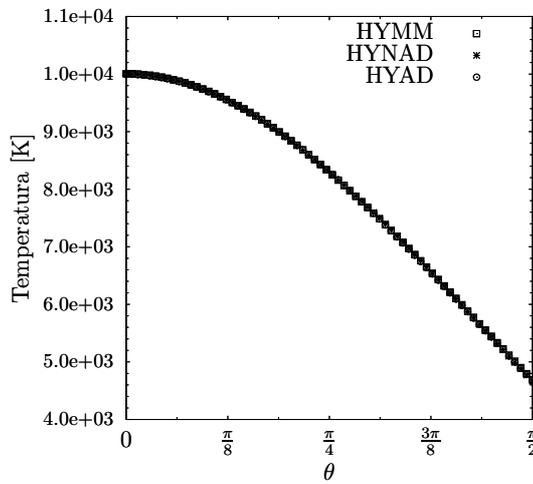
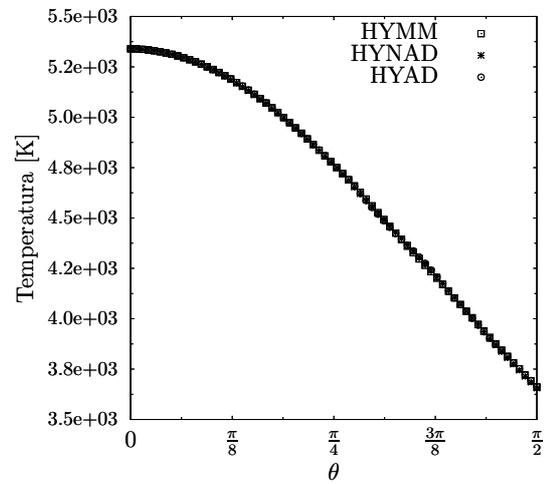


Figura 6.22: Distribución de presión sobre la superficie del cuerpo romo.
 Altura: 20 Km. Mach: 15.

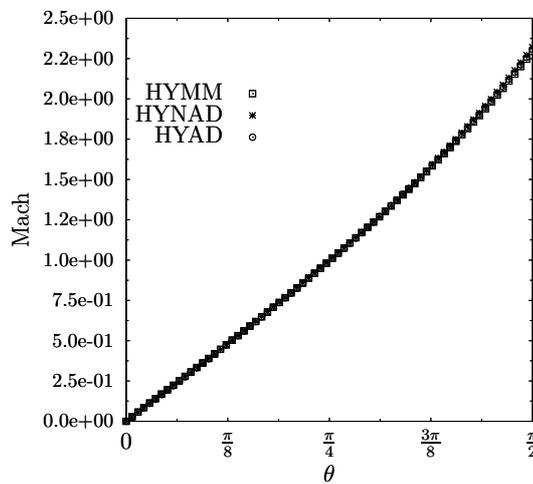


(a) Gas calórico perfecto.

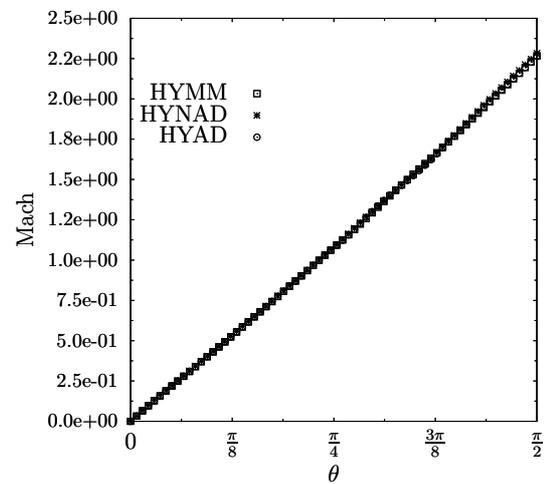


(b) Gas en equilibrio químico

Figura 6.23: Distribución de temperatura sobre la superficie del cuerpo romo. Altura: 20 Km. Mach: 15.

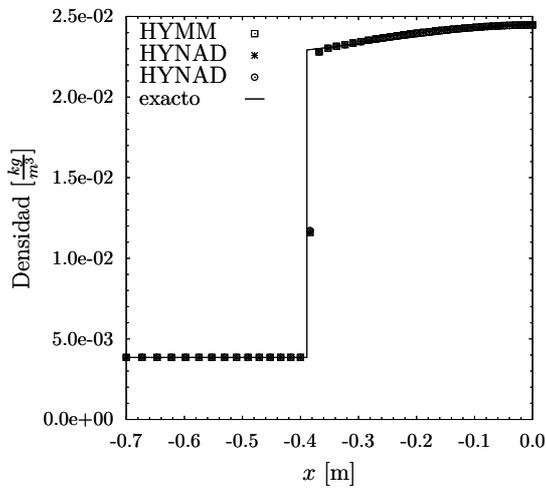


(a) Gas calórico perfecto.

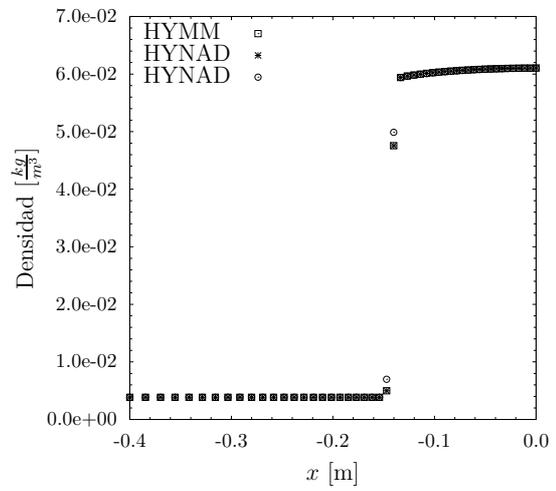


(b) Gas en equilibrio químico

Figura 6.24: Distribución de número de Mach sobre la superficie del cuerpo romo. Altura: 20 Km. Mach: 15.

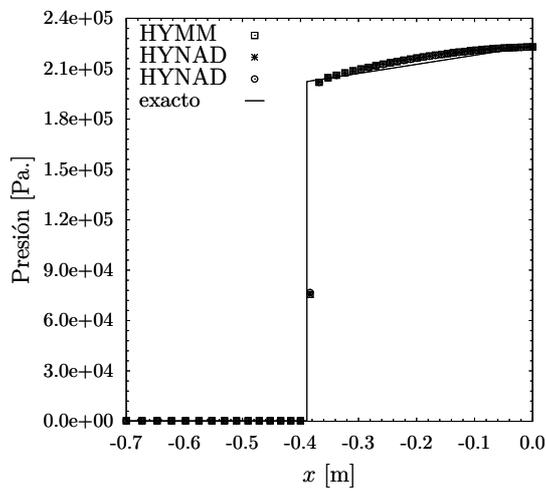


(a) Gas calórico perfecto.

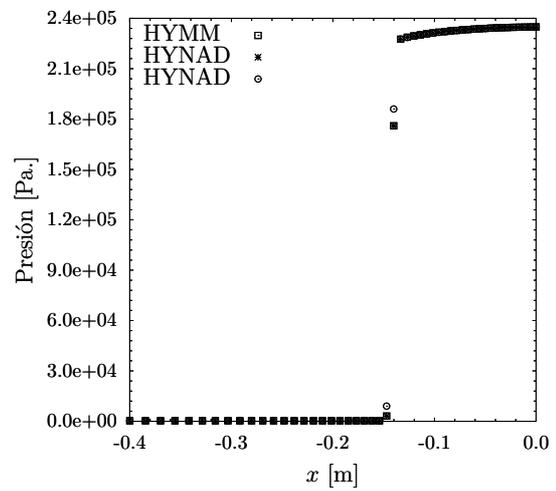


(b) Gas en equilibrio químico

Figura 6.25: Distribución de densidad sobre la línea de simetría.
Altura: 20 Km. Mach: 15.



(a) Gas calórico perfecto.



(b) Gas en equilibrio químico

Figura 6.26: Distribución de presión sobre la línea de simetría.
Altura: 20 Km. Mach: 15.

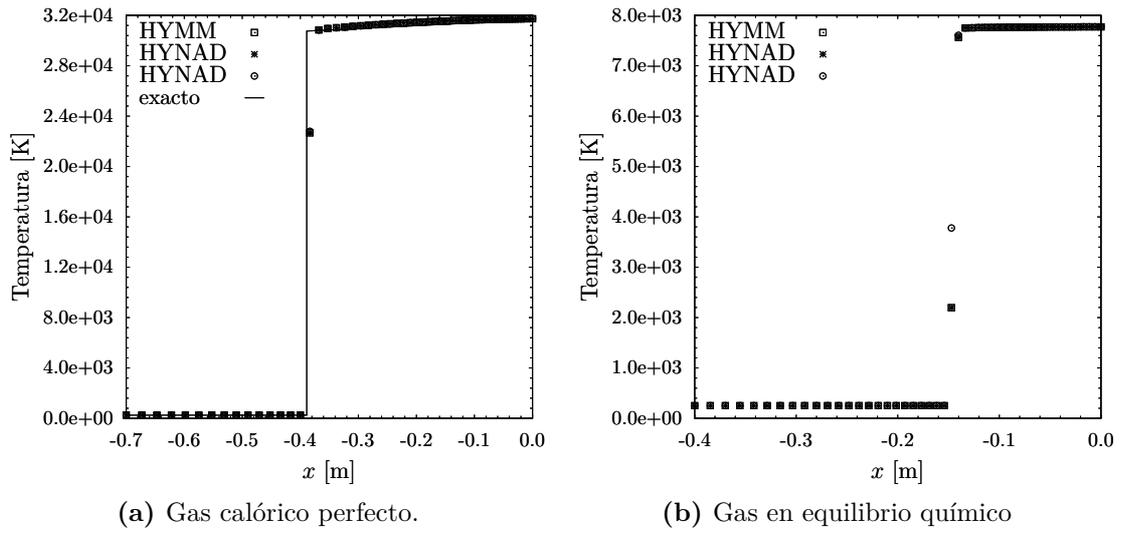
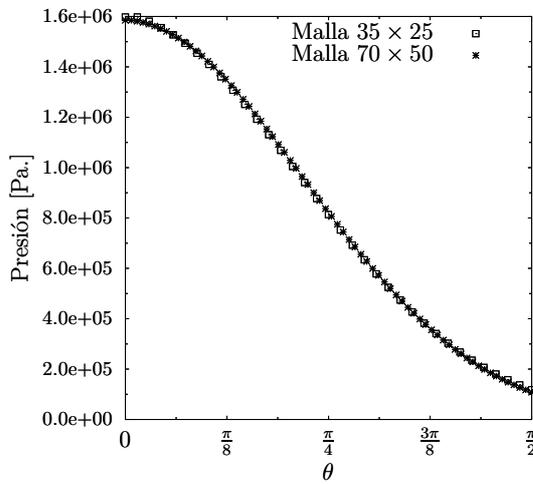


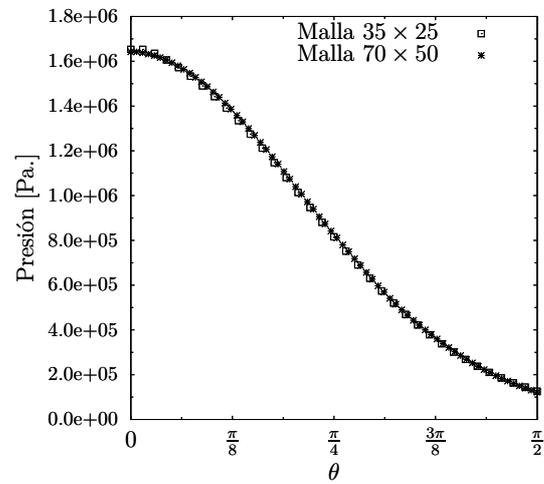
Figura 6.27: Distribución de temperatura sobre la línea de simetría.
Altura: 20 Km. Mach: 15.

Zona	Malla	Gas en equilibrio químico			Gas calórico perfecto		
		HYMM	HYNAD	HYAD	HYMM	HYNAD	HYAD
Detrás de choque	25 × 35	0.603	0.684	0.626	1.287	1.355	1.226
	50 × 70	0.215	0.175	0.213	0.612	0.548	0.544
Punto de impacto	25 × 35	–	–	–	1.145	1.355	0.964
	50 × 70	–	–	–	0.422	0.372	0.304

Tabla 6.5: Errores en el cálculo de la temperatura sobre la línea de simetría.
Altura: 20 km. Mach: 15

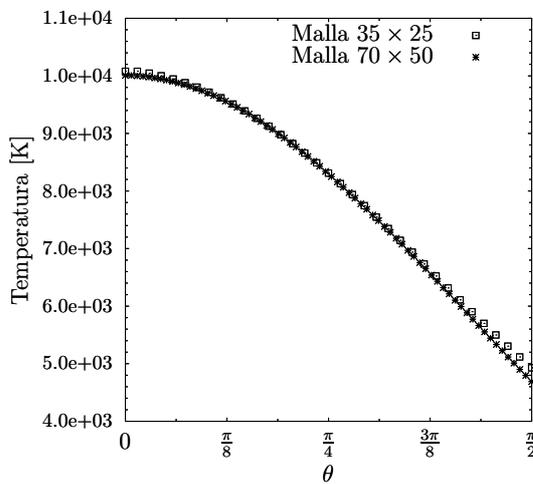


(a) Gas calórico perfecto.

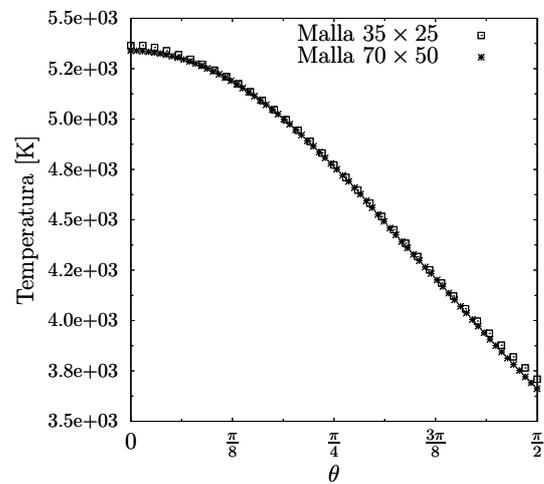


(b) Gas en equilibrio químico

Figura 6.28: Convergencia de malla de la distribución de presión sobre la superficie del cuerpo para dos niveles de discretización. Altura: 20 Km. Mach: 15. Esquema: HYMM.



(a) Gas calórico perfecto.



(b) Gas en equilibrio químico

Figura 6.29: Convergencia de malla de la distribución de temperatura sobre la superficie del cuerpo para dos niveles de discretización. Altura: 20 Km. Mach: 15. Esquema: HYMM.

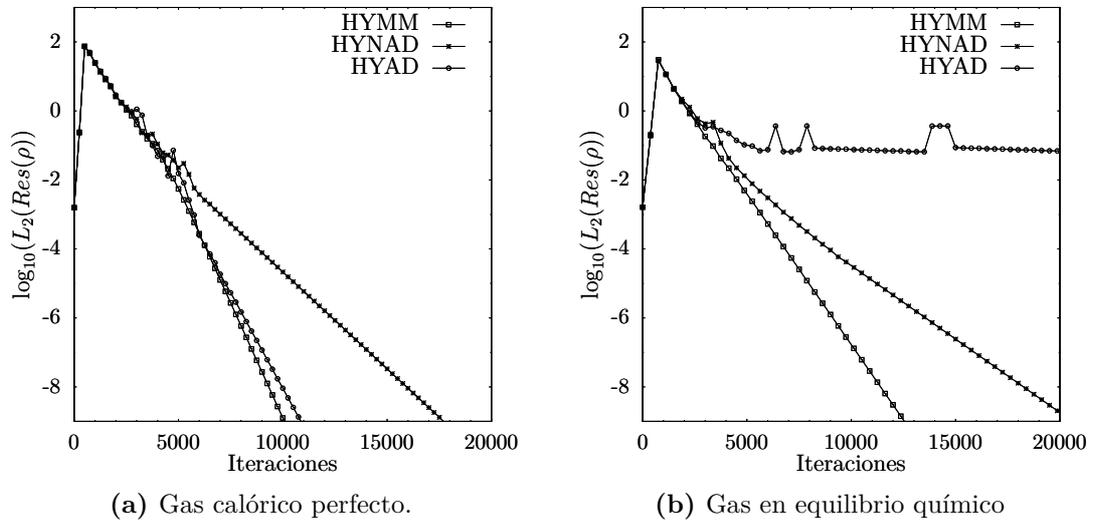


Figura 6.30: Comparación de la convergencia en la norma L_2 del residuo de la densidad. Altura: 20 Km. Mach: 15. Discretización: 35×25 .

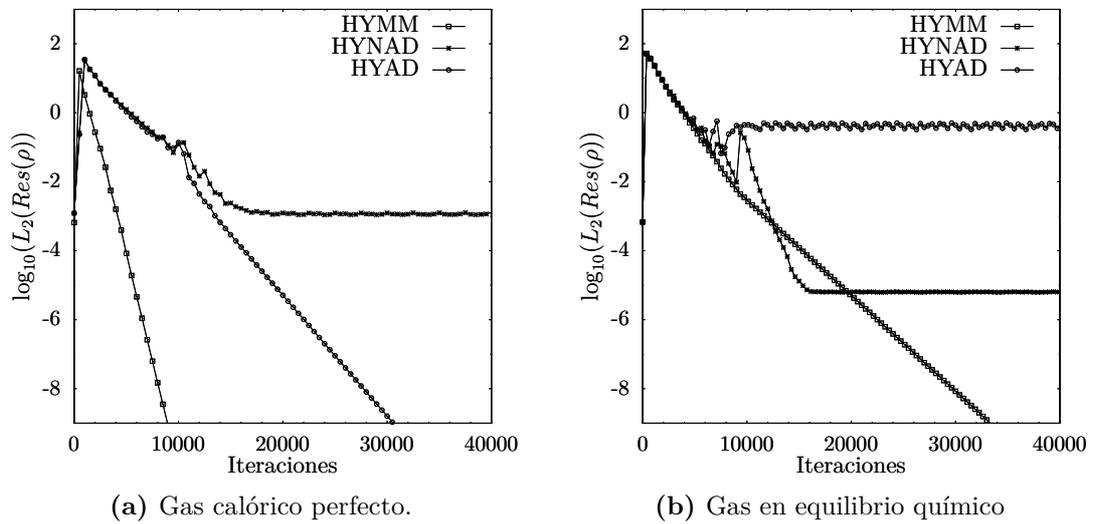


Figura 6.31: Comparación de la convergencia en la norma L_2 del residuo de la densidad. Altura: 20 Km. Mach: 15. Discretización: 70×50 .

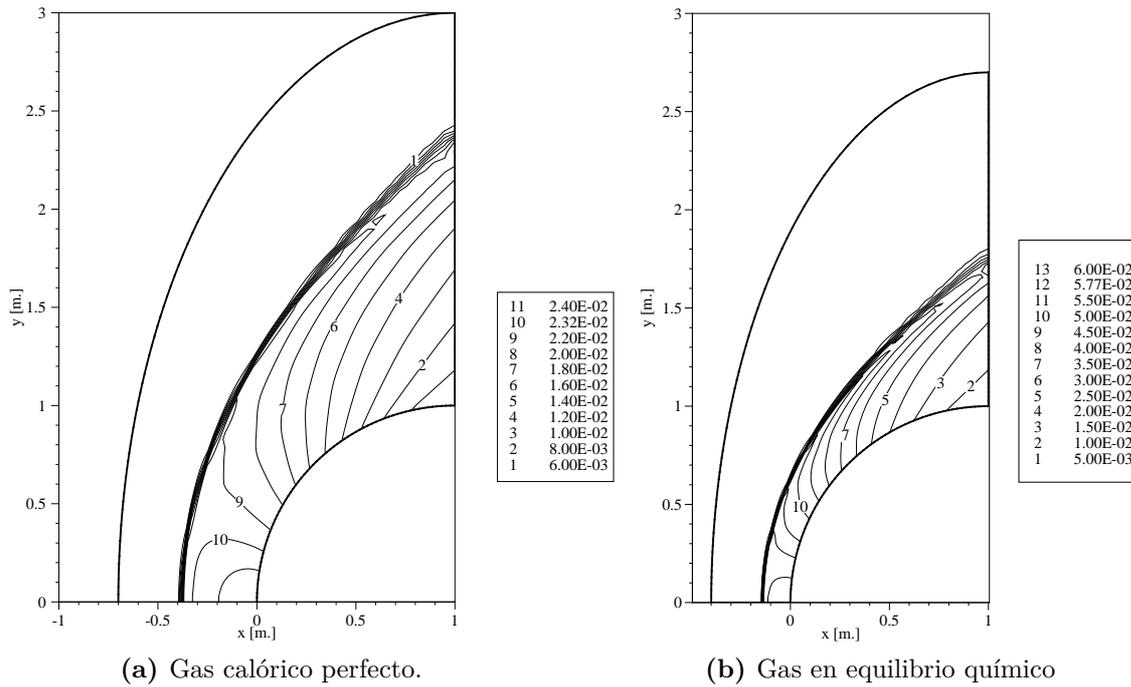


Figura 6.32: Líneas de contorno de la distribución de densidad $\left[\frac{kg}{m^3}\right]$
 Altura: 40 Km. Mach: 25. Malla: 70×35 . Esquema: HYMM.

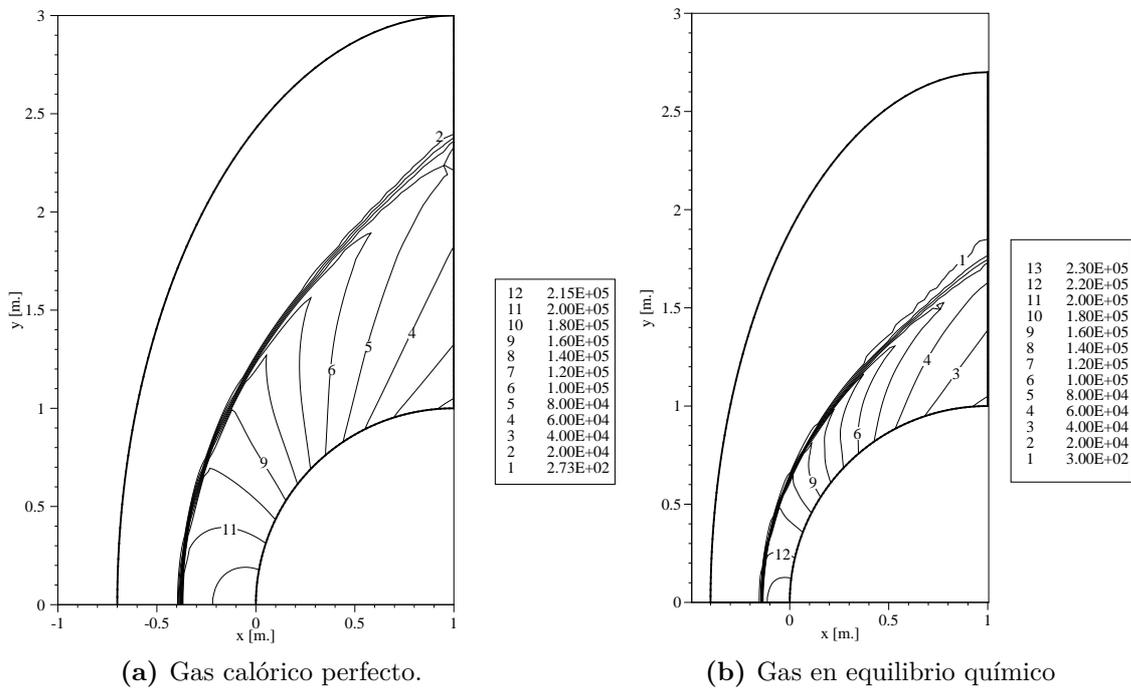
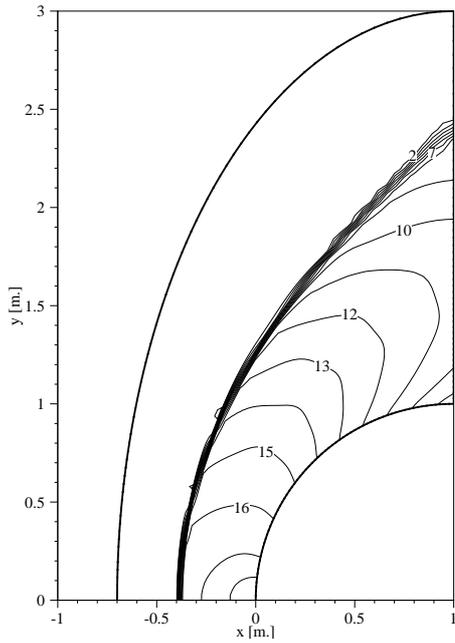
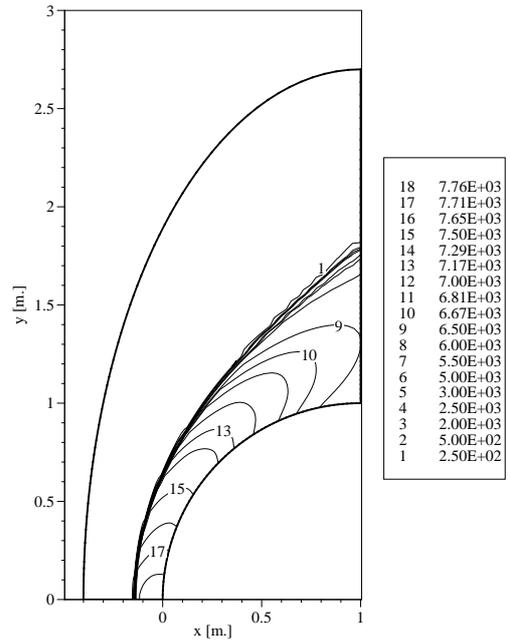


Figura 6.33: Líneas de contorno de la distribución de presión [Pa.].
 Altura: 40 Km. Mach: 25. Malla: 70×35 . Esquema: HYMM.

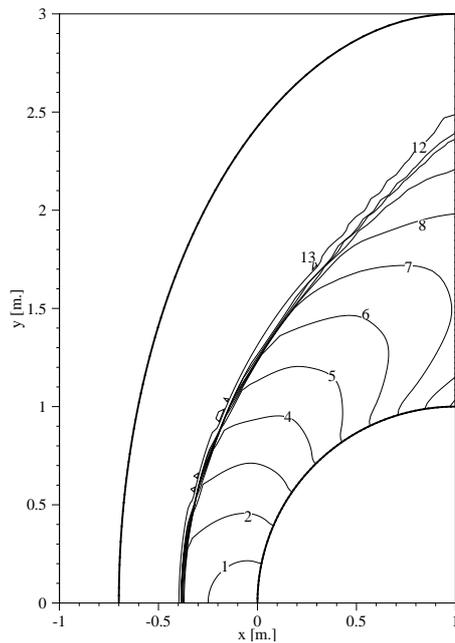


(a) Gas calórico perfecto.

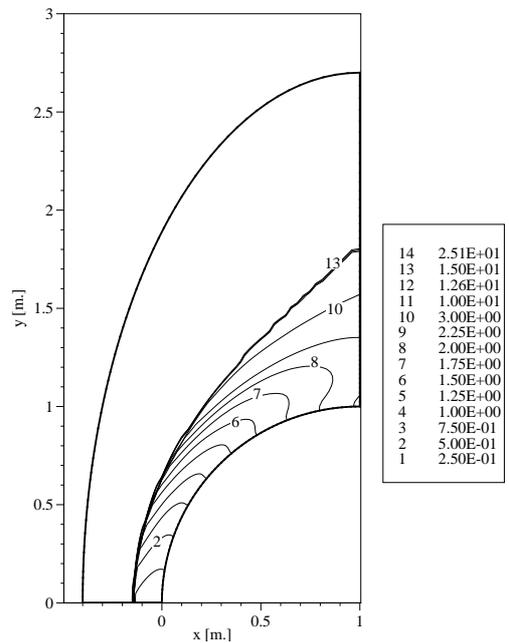


(b) Gas en equilibrio químico

Figura 6.34: Líneas de contorno de la distribución de temperatura [K].
 Altura: 40 Km. Mach: 25. Malla: 70 × 35. Esquema: HYMM.



(a) Gas calórico perfecto.



(b) Gas en equilibrio químico

Figura 6.35: Líneas de contorno de la distribución de número de Mach.
 Altura: 40 Km. Mach: 25. Malla: 70 × 35. Esquema: HYMM.

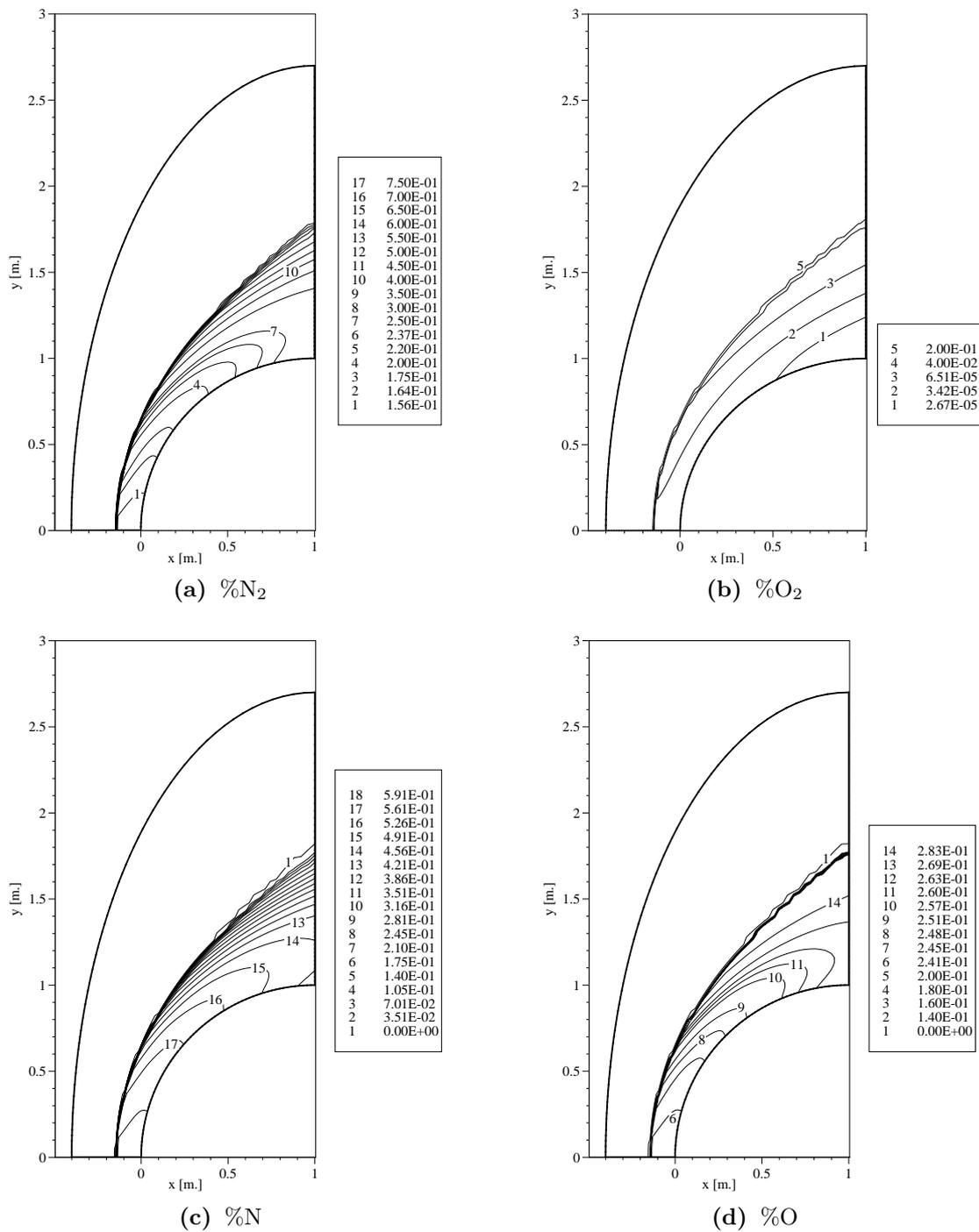


Figura 6.36: Líneas de contorno de las concentraciones molares de N₂, O₂, N y O. Gas en equilibrio químico. Altura: 40 Km. Mach: 25. Malla: 70 × 35. Esquema: HYMM.

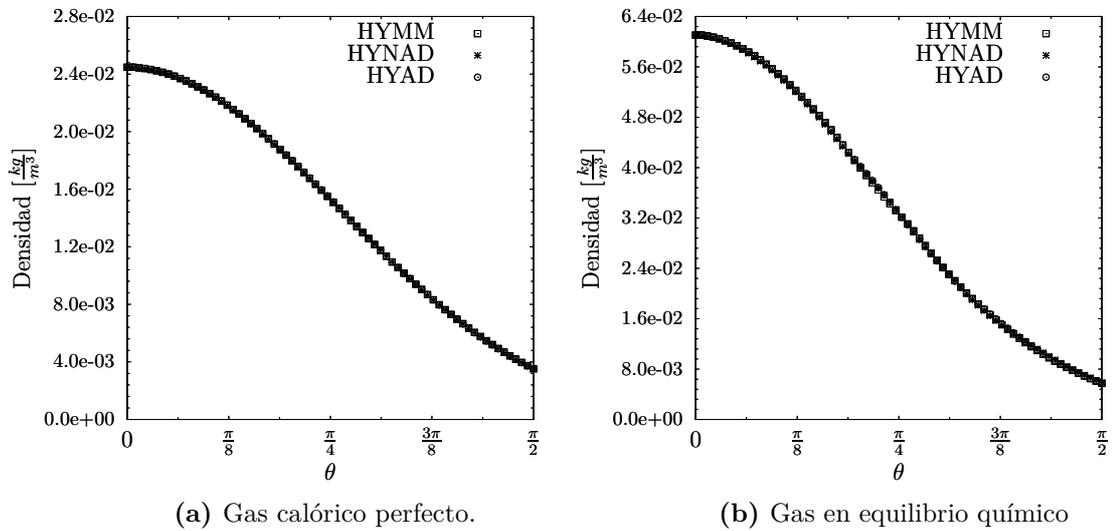


Figura 6.37: Distribución de densidad sobre la superficie del cuerpo romo.
 Altura: 40 Km. Mach: 25.

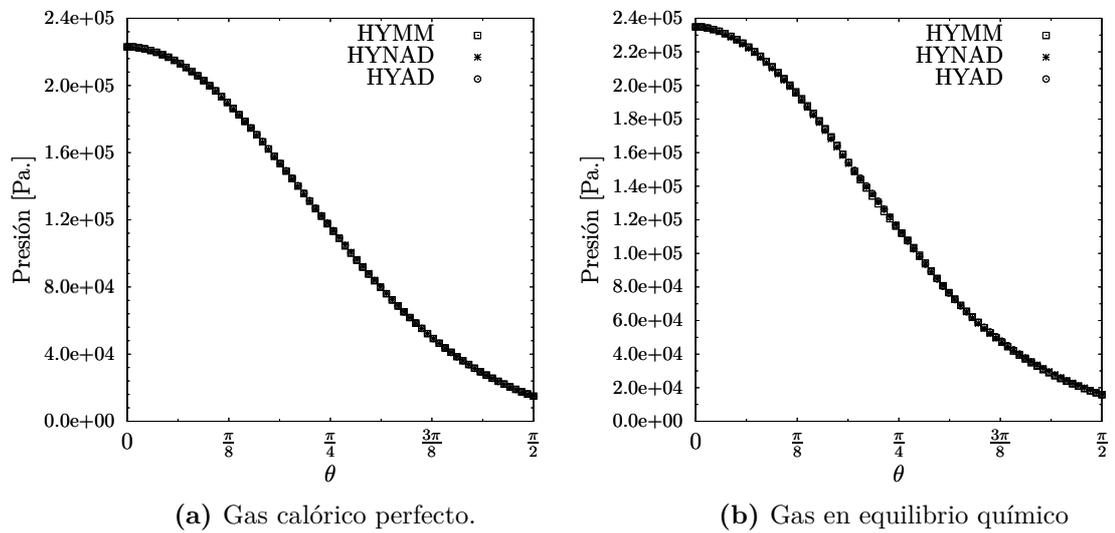
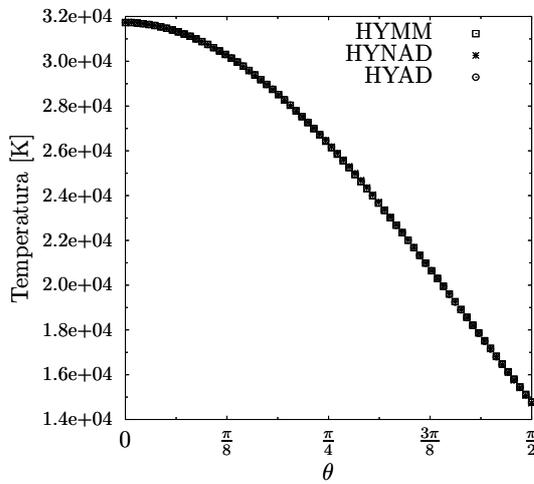
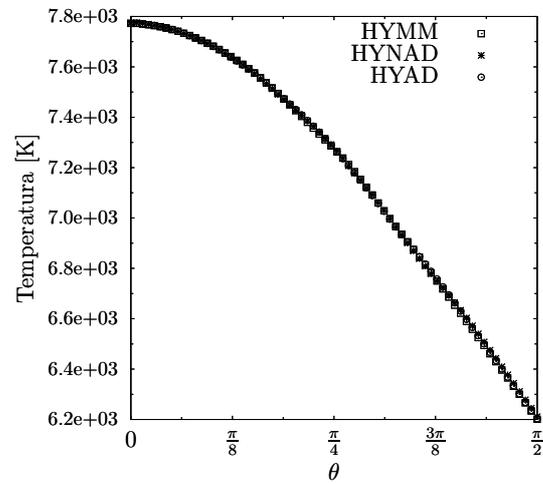


Figura 6.38: Distribución de presión sobre la superficie del cuerpo romo.
 Altura: 40 Km. Mach: 25.

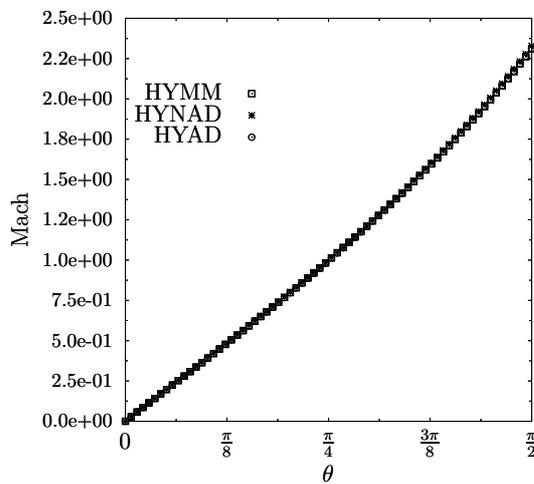


(a) Gas calórico perfecto.

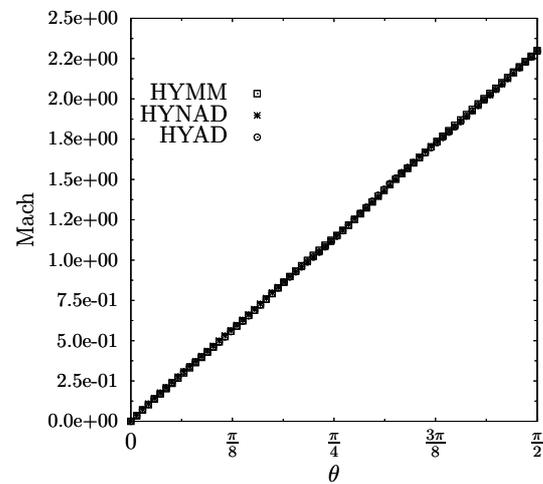


(b) Gas en equilibrio químico

Figura 6.39: Distribución de temperatura sobre la superficie del cuerpo romo.
Altura: 40 Km. Mach: 25.

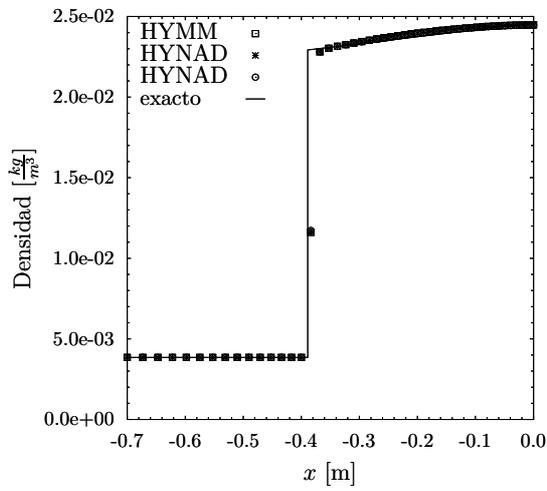


(a) Gas calórico perfecto.

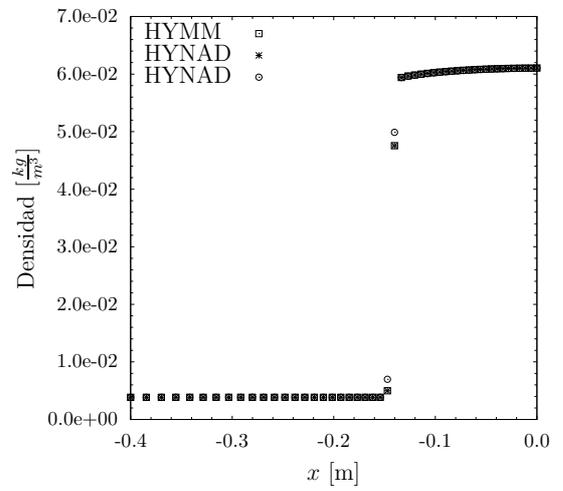


(b) Gas en equilibrio químico

Figura 6.40: Distribución de número de Mach sobre la superficie del cuerpo romo.
Altura: 40 Km. Mach: 25.

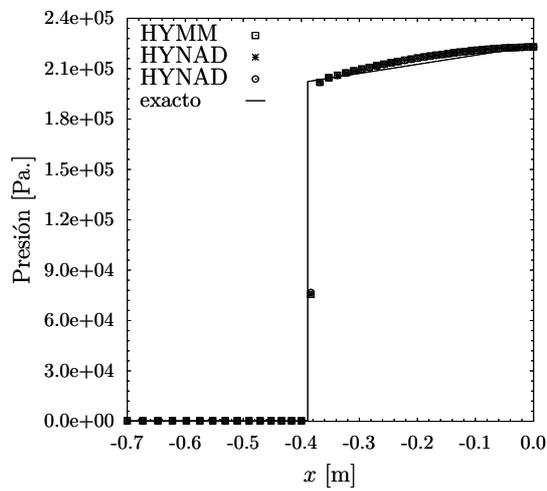


(a) Gas calórico perfecto.

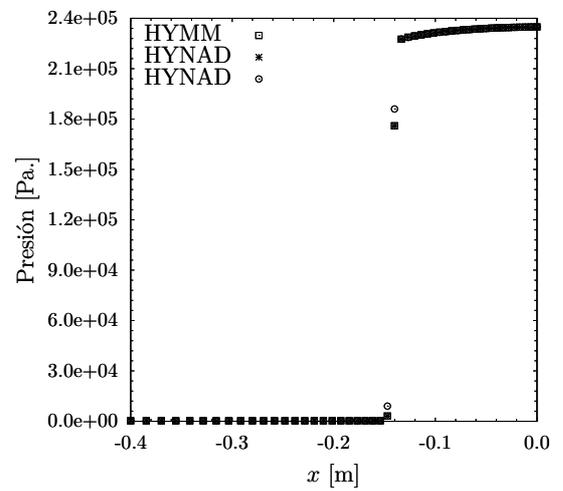


(b) Gas en equilibrio químico

Figura 6.41: Distribución de densidad sobre la línea de simetría.
Altura: 40 Km. Mach: 25.



(a) Gas calórico perfecto.



(b) Gas en equilibrio químico

Figura 6.42: Distribución de presión sobre la línea de simetría.
Altura: 40 Km. Mach: 25.

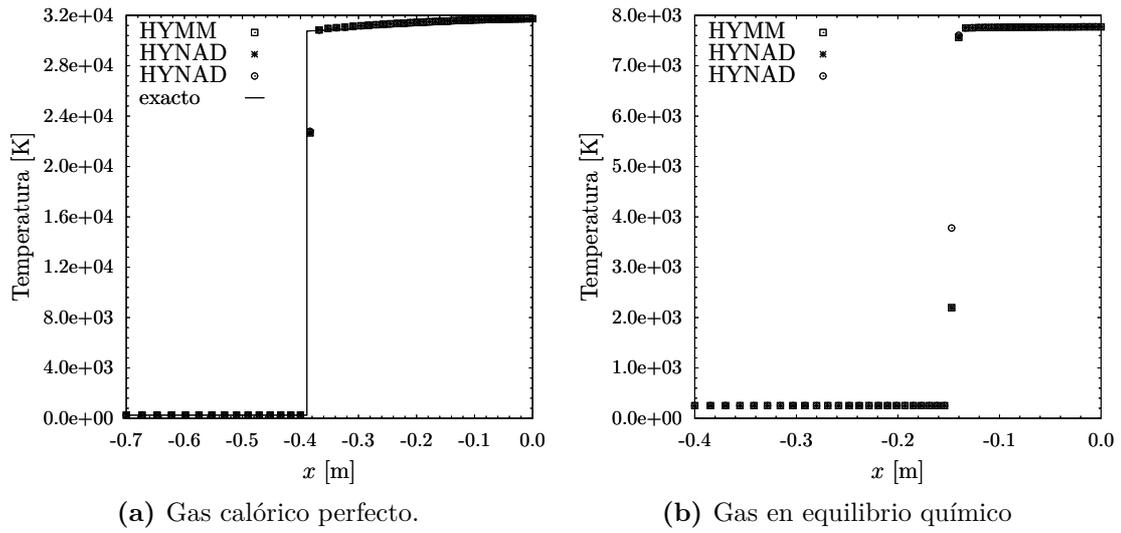
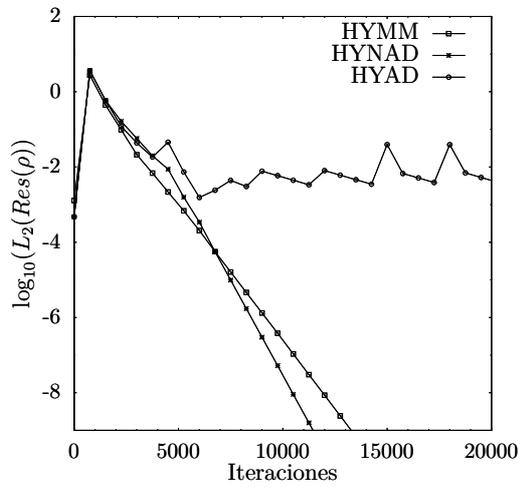


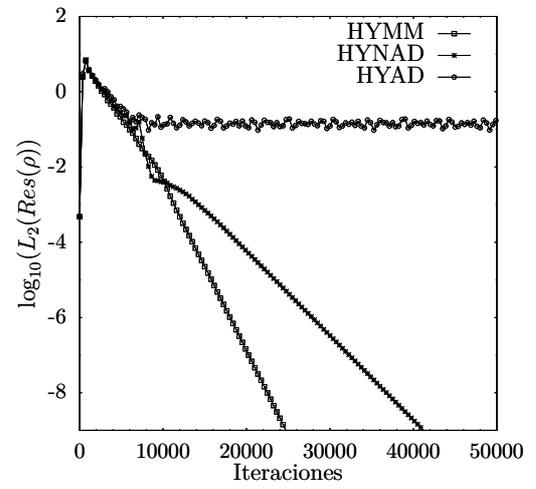
Figura 6.43: Distribución de temperatura sobre la línea de simetría.
 Altura: 40 Km. Mach: 25.

Zona	Malla	Gas en equilibrio químico			Gas calórico perfecto		
		HYMM	HYNAD	HYAD	HYMM	HYNAD	HYAD
Detrás de choque	25 × 35	0.123	0.132	0.122	1.213	1.382	1.174
	50 × 70	0.064	0.055	0.068	0.305	0.286	0.310
Punto de impacto	25 × 35	–	–	–	1.213	1.299	0.942
	50 × 70	–	–	–	0.316	0.351	0.322

Tabla 6.6: Errores en el cálculo de la temperatura sobre la línea de simetría.
 Altura: 40 km. Mach: 25

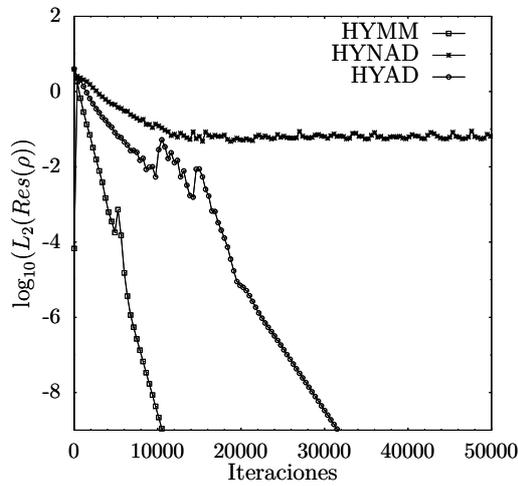


(a) Gas calórico perfecto.

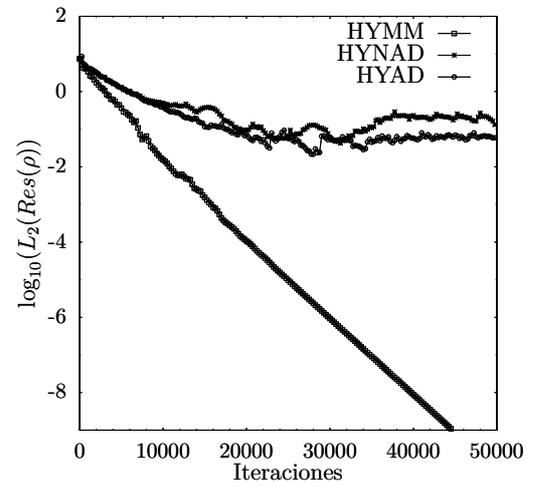


(b) Gas en equilibrio químico

Figura 6.44: Comparación de la convergencia en la norma L_2 del residuo de la densidad. Altura: 40 Km. Mach: 25. Discretización: 35×25 .



(a) Gas calórico perfecto.



(b) Gas en equilibrio químico

Figura 6.45: Comparación de la convergencia en la norma L_2 del residuo de la densidad. Altura: 40 Km. Mach: 25. Discretización: 70×50 .

BIBLIOGRAFIA

- [1] ANDERSON, J. D. *Hypersonic and High Temperature Gas Dynamics*. McGraw–Hill Book Co., 1989.
- [2] BILLIG, F. S. Shock–wave shapes around spherical and cylindrical nosed bodies. *Journal of Spacecraft and Rockets* 4 (1968), 822–823.
- [3] CHAUVAT, Y., MOSCHETTA, J., AND GRESSIER, J. Shock wave numerical structure and the carbuncle phenomenon. *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 4 (2005), 903–909.
- [4] COURANT, R., AND FRIEDRICHS, K. O. *Supersonic flow and shock waves*, second ed. Interscience Publishers Ltd., 1956.
- [5] FALCINELLI, O., ELASKAR, S., AND TAMAGNO, J. Reducing the numerical viscosity in non structured three-dimensional finite volumes computations. *AIAA Journal of Spacecrafts and Rockets* 42, 2 (2008), 406–408.
- [6] MONTAGNÉ, J. L., YEE, H. C., KLOPFER, G. H., AND VINOKUR, M. Hypersonic blunt body computations including real gas effects. *NASATM 100074* (1988).
- [7] MONTAGNÉ, J. L., YEE, H. C., AND VINOKUR, M. Comparative study of high–resolution shock–capturing schemes for a real gas. *AIAA Journal* 27 (1989), 1332–1346.
- [8] MORETTI, G., AND ABBETT, M. A time dependent computational method for blunt body flows. *AIAA Journal* 4, 12 (1966), 2136–2141.
- [9] ROBERTS, T. W. The behavior of flux difference splitting schemes near slowly moving shock waves. *Journal of Computational Physics* 90 (1990), 141–160.

- [10] SAUREL, R., LARINI, M., AND LORAUD, J. C. Exact and approximate Riemann solvers. *Journal of Computational Physics* 112 (1994), 126–137.
- [11] YEE, H. C. A class of high resolution explicit and implicit shock-capturing methods. *NASA-TM-101088* (1989).
- [12] ZHENG, B., AND LEE, C. H. The effects of limiters on high resolution computations of hypersonic flows over bodies with complex shapes. *Communication in Nonlinear Science & Numerical Simulation* 3, 2 (1998), 82–86.

7.1 Conclusiones del presente trabajo

En la presente tesis se ha desarrollado e implementado el esquema TVD introducido por Harten[3] y generalizado por Yee [5] para la solución numérica de las ecuaciones de Euler unidimensionales y bidimensionales considerando gas en equilibrio termoquímico. En el contexto del esquema TVD de Harten Yee se implementó la técnica adaptiva de inclusión de funciones limitadoras propuesta en [1]. En ésta, se introduce la función limitadora *superbee* en la familia de ondas linealmente degeneradas del problema local de Riemann en las zonas del dominio donde la intensidad de las mismas es mayor que la intensidad de las ondas genuinamente no lineales bajo un criterio de comparación previamente definido. En caso contrario, se utiliza la función limitadora *minmod* en todas las ondas. Esta metodología busca introducir mejoras en la captación de discontinuidades de contacto dadas por la función más compresiva de la región TVD *superbee*, y reduciendo las oscilaciones que esta función tiende a generar en la cercanía de dichas discontinuidades. Con motivos de comparación de la mencionada técnica adaptiva, se implementaron otras dos variantes del esquema. La primera, utiliza la función *minmod* en todas las ondas, mientras que la segunda utiliza en todo el dominio la función *minmod* en las ondas genuinamente no lineales y la función *superbee* en la familia de ondas linealmente degeneradas.

La extensión del esquema considerando gas en equilibrio químico, se realizó incluyendo el cálculo del estado termodinámico del gas a través de un algoritmo que minimiza la energía libre de Helmholtz o Gibbs de la mezcla de gases [2]. Debido al alto costo computacional que representa el cálculo del equilibrio químico en el contexto de un código fluidodinámico, se utilizó un procedimiento de interpolación de las variables ter-

modinámicas exclusivamente necesarias en el cálculo de los flujos numéricos, a partir de una base de datos obtenida en forma previa. Se mostró que esta metodología reduce en aproximadamente un orden de magnitud el costo computacional con respecto al cálculo directo del equilibrio químico, obteniéndose errores varios ordenes de magnitud menores que otra técnica ampliamente utilizada, las curvas de Tannehill, a un costo computacional comparable con ésta.

En el caso de la solución numérica de problemas unidimensionales se presentaron resultados para cinco problemas de Riemann especialmente diseñados para obtener condiciones de alta entalpía donde los efectos de considerar gas en equilibrio químico son significativos. En todos los casos resueltos, se obtuvo que la inclusión de la función *superbee* mejora significativamente la captación de discontinuidades de contacto. Por otro lado, ésta no modifica la captación de ondas no lineales (choque y expansiones). En aquellos casos donde la función *superbee* tiende a introducir oscilaciones no físicas en las zonas del dominio cercanas a la onda de contacto, se encontró que el esquema adaptivo propuesto logra reducir la magnitud de las mismas sin incurrir en una pérdida de resolución de la onda. Esta reducción fue más apreciable en aquellas variables donde la magnitud de las oscilaciones era mayor, producto de las características propias de la onda, tales como intensidad, velocidad e interacción con otras ondas.

Las mismas condiciones de los problemas de Riemann unidimensionales, fueron empleadas para obtener soluciones transitorias bidimensionales en problemas de Riemann con simetría cilíndrica. En los resultados presentados, se encontró nuevamente que la función *superbee* aplicada en la familia de ondas linealmente degenerada introduce una mejora significativa en la captación de discontinuidades de contacto sin influenciar la resolución de ondas de choque y ondas de expansión. En uno de los casos resueltos, la función *superbee* introduce oscilaciones en la cercanía de la onda de contacto las cuales fueron reducidas por el esquema adaptivo sin perjudicar nuevamente la resolución numérica de la onda.

Finalmente, se presentaron resultados sobre un problema de interés aeroespacial: el problema del flujo en régimen hipersónico estacionario sobre cuerpos romos bidimensionales. En este caso, se utilizó la extensión original multidimensional sobre mallas estructuradas del esquema de Harten Yee, a diferencia de la adaptación del esquema en mallas no estructuradas propuesta en [1]. Se presentaron resultados obtenidos asumiendo tanto las hipótesis de equilibrio químico como las de un gas calórico perfecto, de manera de evidenciar la influencia que tienen los efectos de alta temperatura en la obtención de resultados físicamente más realistas cuando se considera este tipo de flu-

jos. Aplicando las tres variantes del esquema de Harten Yee previamente consideradas, se obtuvieron resultados similares en regiones de interés del dominio tales como la superficie del cuerpo, o la línea de corriente ubicada sobre la línea de simetría. En ésta última línea, todos los resultados presentados mostraron tener un alto nivel de precisión y robustez, en comparación con soluciones analíticas o cuasi-analíticas.

Se obtuvo además que aplicando las mismas condiciones de integración temporal, en este caso un método de Runge Kutta de 2do orden explícito, la introducción de la función limitadora *superbee* resulta en menores tasas de convergencia a la solución estacionaria que las obtenidas al utilizar la función *minmod* en todas las ondas, o incluso la convergencia a una solución oscilatoria alrededor de un punto fijo. Se comprobó además que este comportamiento oscilatorio no influye en todo el campo de movimiento sino que se encuentra confinado a los nodos computacionales cercanos a la intersección entre la línea sónica y la onda de choque separada. La introducción de la función *superbee* en forma adaptiva si bien logra salvar este comportamiento en algunos casos, en otros disminuye las propiedades de convergencia con respecto al método no adaptivo, por lo que no pueden extraerse mayores conclusiones a partir de los resultados aquí presentados, sobre las posibles ventajas del uso de dicha técnica en el cálculo de este tipo de flujos.

7.2 Trabajo futuro

La continuación natural de un esquema de solución de alta resolución de las ecuaciones de Euler orientado a flujos hipersónicos tal como el aquí presentado, es la inclusión al sistema de ecuaciones de los términos de viscosidad, es decir, cuando se considera el sistema de ecuaciones de Navier Stokes compresible. La incorporación de estos efectos permite resolver una gama mayor de fenómenos físicos presentes en flujo hipersónico. Entre estos, es de particular importancia la captura numérica de la interacción que se presenta entre la capa límite con las regiones de flujo invíscido y/o la onda de choque separada a una corta distancia del cuerpo.

La incorporación de los términos viscosos si bien no presenta mayores problemas desde el punto de vista de la discretización numérica, sí da lugar a mayores requerimientos desde el punto de vista del esfuerzo computacional, debido a la alta resolución de la grilla necesaria en las zonas adyacentes al cuerpo de forma de capturar correctamente los altos gradientes que toman lugar en la zona de la capa límite. A su vez esto resulta en una drástica disminución de los pasos de tiempo admisibles, lo que torna altamente ineficientes a los métodos de integración explícita, debiéndose recurrir a métodos de inte-

gración implícitos los cuales aumentan la complejidad y el costo del código desarrollado. Uno de las metodologías que se propone utilizar con este objetivo es el llamado *Alternate Direction Implicit Method* cuya eficiencia y robustez ya ha sido altamente estudiada en el cálculo de flujos hipersónicos mediante esquemas TVD [6].

Otro de los fenómenos físicos el cual es relevante capturar en flujo hipersónico, es cuando se considera que las escalas temporales a que toman lugar las reacciones químicas son comparables a las escalas temporales del flujo y por lo tanto se asumen las llamadas hipótesis de no equilibrio químico. Al asumir estas condiciones, es necesario incorporar las ecuaciones correspondientes a la conservación de masa de cada una de las especies consideradas, además de incluir términos fuentes que modelan las tasas de producción de las especies. Este fenómeno introduce nuevas escalas temporales mucho menores que las escalas del flujo, tornando *stiff* al sistema de ecuaciones, y por lo tanto siendo de uso prácticamente inevitable, métodos de integración temporal implícitos. Una metodología de relativa simplicidad que se propone utilizar para tratar este tipo de términos es el *método del punto implícito* descrito en [4].

Finalmente, y dando cuenta del drástico aumento del costo computacional que significa la incorporación de estos fenómenos físicos, sumado al interés de la extensión a dominios tridimensionales, deberán ser tenidos en cuenta métodos de paralelización en sistemas de memoria distribuida, de manera de posibilitar el desarrollo de una herramienta eficiente para el estudio numérico de flujos de gases de alta entalpía.

BIBLIOGRAFIA

- [1] FALCINELLI, O., ELASKAR, S., AND TAMAGNO, J. Reducing the numerical viscosity in non structured three-dimensional finite volumes computations. *AIAA Journal of Spacecrafts and Rockets* 42, 2 (2008), 406–408.
- [2] GORDON, S., AND MCBRIDE, J. B. Computer program for calculation of complex equilibrium compositions and applications. Part I : Analysis. *NASA RP : 1311* (1994).
- [3] HARTEN, A. On a class of high resolution total–variation–stable finite–difference schemes. *Journal of Computational Physics* 49 (1983), 357–393.
- [4] TAMAGNO, J., ELASKAR, S., AND RIOS, G. Numerical simulation of time-dependent reacting flows. *Applied Numerical Mathematics* 47 (2003), 515–530.
- [5] YEE, H. C. Construction of explicit and implicit symmetric TVD schemes and their applications. *Journal of Computational Physics* 68 (1987), 151–179.
- [6] YEE, H. C. A class of high resolution explicit and implicit shock-capturing methods. *NASA-TM-101088* (1989).