



Eduardo A. Brizuela

Introducción al modelado numérico de flujos reactivos

Introducción al modelado numérico de flujos reactivos

Eduardo A. Brizuela

Introducción al modelado numérico de flujos reactivos

Eduardo A. Brizuela

Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional de La Plata
La Plata, 2009



Brizuela, Eduardo
Introducción al modelado numérico de flujos reactivos.
1a ed. - La Plata : Universidad Nacional de La Plata, 2011.
254 p. ; 21x15 cm.

ISBN 978-950-34-0755-4

1. Flujos Reactivos. I. Título
CDD 532

Introducción al modelado numérico de flujos reactivos

Eduardo A. Brizuela

Diseño y diagramación: Julieta Lloret



Editorial de la Universidad Nacional de La Plata (Eduulp)
47 N° 380 / La Plata B1900AJP / Buenos Aires, Argentina
+54 221 427 3992 / 427 4898
editorial@editorial.unlp.edu.ar
www.editorial.unlp.edu.ar

Eduulp integra la Red de Editoriales Universitarias Nacionales (REUN)
Primera edición, 2011
ISBN N° 978-950-34-0755-4

Queda hecho el depósito que marca la Ley 11.723
©2011 – Eduulp
Impreso en Argentina

Índice

Prólogo	13
----------------------	----

Capítulo 1

Introducción.....	15
1.1 Introducción.....	15
1.2 Planteo general del problema.....	17
1.3 Nomenclatura y unidades.....	18
1.4 Química.....	19
1.5 Termoquímica.....	20
1.6 Sistemas de reacciones elementales.....	22
1.7 Reducción de sistemas esquelatales.....	24
1.8 Resumen de química.....	26
Referencias al Capítulo 1.....	26

Capítulo 2

Modelos y métodos.....	27
2.1 Escalares conservados.....	27
2.2 Modelos de reacción.....	28
2.3 Método de resolución numérica.....	37
Referencias al Capítulo 2.....	42

Capítulo 3

Flujos turbulentos.....	43
3.1 Ecuaciones instantáneas y promedios.....	43
3.2 Tipos de promedios.....	44
3.3 Propiedades de los promedios Reynolds y Favre.....	46
3.4 La ecuación de Navier-Stokes en promedio Favre.....	48

Capítulo 4

Ecuaciones de continuidad y de transporte.....	53
4.1 La ecuación de continuidad o de conservación de la masa...	53
4.2 La ecuación general de conservación de un escalar.....	54
4.3 La ecuación de conservación de la energía.....	56
4.4 La ecuación de transporte de la fracción de mezcla.....	58
4.5 La ecuación de transporte de las especies químicas.....	58
4.6 La ecuación de transporte del avance de reacción.....	60
4.7 Resumen de las ecuaciones de transporte.....	60
4.8 Relaciones algebraicas.....	62
4.9 Cierre del modelo.....	66
Referencias al Capítulo 4.....	68

Capítulo 5

Modelos de turbulencia.....	69
5.1 Modelo de transporte de tensiones de Reynolds.....	69
5.2 Modelos de cero y una ecuación.....	70
5.3 El modelo de dos ecuaciones.....	71
5.4 Mejoras al modelo.....	76
Referencias al Capítulo 5.....	79

Capítulo 6

Condiciones de borde e iniciales	81
6.1 Condiciones de borde.....	81
6.2 Clases de fronteras.....	81
6.3 Clases de condiciones de borde.....	83
6.4 Entradas.....	84
6.5 Salidas.....	85
6.6 Paredes.....	85
6.7 Condiciones iniciales.....	91
Referencias al Capítulo 6.....	92

Capítulo 7

Diferencias y volúmenes finitos.....	93
7.1 Discretización de las ecuaciones de transporte.....	93
7.2 Celdas y volúmenes de control.....	94
7.3 Alternativas de discretización.....	97
7.4 La ecuación de transporte en diferencias y volúmenes finitos.....	101
7.5 Las condiciones de frontera	103
7.6 El número de Peclet.....	104
7.7 Otros métodos.....	105
7.8 Ubicación de las variables.....	106
7.9 La corrección de presión.....	108
Referencias al Capítulo 7.....	111

Capítulo 8

La grilla de cálculo.....	113
8.1 Tipos de grillas.....	113
8.2 Grillas cartesianas ortogonales.....	114
8.3 Grillas ajustadas al contorno (BFC).....	119
8.4 BFC, métodos diferenciales	121
8.5 BFC, métodos algebraicos.....	124
8.6 Transformación de las ecuaciones de transporte.....	126
8.7 Grillas no estructuradas.....	127
Referencias al Capítulo 8.....	131

Capítulo 9

Solución del sistema de ecuaciones	133
9.1 General.....	133
9.2 Resolvedores directos.....	134
9.3 Resolvedores iterativos.....	138
9.4 Método the Runge-Kutta.....	141
9.5 Convergencia, residuos.....	143
Referencias al Capítulo 9.....	149

Capítulo 10

Velocidades de reacción dominadas por la cinética y por la mezcla	151
10.1 Reactantes no premezclados.....	151
10.1.1 Cinética dominante.....	151
10.1.2 Mezcla dominante.....	152
10.1.3 Modelo de mezcla rápida.....	152
10.1.4 Funciones de distribución.....	157
10.1.5 El segundo momento de f.....	160
10.1.6 La velocidad de reacción.....	161
10.1.7 El método EBU.....	162
10.1.8 Velocidad de reacción.....	164
10.2 Reactantes premezclados.....	164
10.2.1 Química rápida.....	165
10.2.2 Química lenta.....	165
10.2.3 El segundo momento del avance de reacción.....	166
10.2.4 La velocidad de reacción.....	166
Referencias al Capítulo 10.....	167

Capítulo 11

Modelos de equilibrio y bases de datos	169
11.1 Bases de datos.....	169
11.2 Modelos de equilibrio.....	171
Referencias al Capítulo 11.....	174

Capítulo 12

Postprocesado.....	175
12.1 Graficadores.....	175
12.2 Postprocesado de especies menores.....	176
Referencias al Capítulo 12.....	181

Bibliografía	183
---------------------------	-----

Apéndices

Apéndice A: Sistemas esquelatales.....	187
Mecanismo GRI-Mech2.11 (Metano en aire).....	187
Apéndice B: Reducción de un sistema esquelatal.....	197
Apéndice C: Ecuaciones de Navier-Stokes en varios sistemas de coordenadas.....	207
Apéndice D: Software de generación de coordenadas ajustadas al contorno.....	211
Apéndice E: Software para realizar cálculos de equilibrio químico.....	229
Apéndice F: Un programa de simulación numérica de la combustión.....	235

Prólogo

Los flujos reactivos son procesos básicos de industrias tales como la petroquímica, farmacéutica y alimentaria, y un caso particular de flujos reactivos, la combustión de combustibles fósiles en aire, es el fundamento de nuestra civilización ya que en él se basa el transporte y la generación de energía eléctrica.

La sociedad demanda de estas industrias y procesos cada vez mayor eficiencia en el uso de los recursos naturales y al mismo tiempo menor impacto sobre el medio ambiente. Esto hace imperativo estudiar los procesos de flujo reactivo con el mayor detalle y precisión.

Tradicionalmente los flujos reactivos se han estudiado utilizando experimentos físicos tales como plantas piloto y reactores de laboratorio. Sin embargo los experimentos físicos presentan ciertas dificultades tales como su costo e inflexibilidad, lo que hace atractivo el uso de experimentos numéricos.

El modelado numérico de flujos reactivos es una rama de la ciencia que ha avanzado enormemente en muy poco tiempo, y la literatura científica ofrece un gran número de trabajos especializados. Sin embargo existe la necesidad de un texto introductorio para el estudiante o científico investigador que desee iniciarse en el tema.

En este trabajo se presentan las etapas en que se divide la tarea de modelar numéricamente un flujo reactivo, y se estudian los modelos y técnicas a utilizar para cada aspecto. Los modelos y técnicas más usuales son presentados con suficiente detalle como para poder aplicarlos en problemas sencillos, y los menos usuales son enunciados y descriptos brevemente.

En cada capítulo se da un mínimo de referencias bibliográficas tales que, con la bibliografía general al final del volumen y la ayuda de Internet el interesado pueda profundizar en el tema elegido.

CAPÍTULO 1

Introducción

1.1 Introducción

Los flujos químicamente reactivos son elementos de proceso sumamente comunes en las industrias del plástico, petroquímica, farmacéutica, etc. Por consiguiente es necesario desarrollar las herramientas teóricas para su análisis y diseño. Se necesita conocer y comprender la función de cada parámetro que influye sobre el producto de la reacción, parámetros de flujo como velocidad, presión y temperatura, y de la química, como composición, propiedades termodinámicas y de transporte, etc.

El estudio de los flujos reactivos, como el de cualquier fenómeno de la naturaleza, comprende las etapas de observación experimental, análisis de lo observado, teorización del fenómeno (modelado), prueba experimental del modelo y adopción de la teoría del fenómeno. El modelado numérico, más propiamente llamado simulación numérica, es un tipo de experimento, llamado experimento numérico por diferenciarlo del experimento físico convencional.

Tanto el experimento físico como el numérico tienen sus ventajas y desventajas y ninguno de los dos es autosuficiente: ambos son necesarios para la teorización del fenómeno. Algunas de las ventajas del experimento físico son:

- No se desprecia, ex profeso o inadvertidamente, ninguna ley física
- Comúnmente la realización del experimento insinúa algún fundamento físico que ayuda a la teorización

Las desventajas del experimento físico no son menores:

- Costo, a veces prohibitivo
- Dificultad de instrumentación, llegando a veces a la imposibilidad de medición (por ejemplo, la temperatura con el movimiento, llamada estática).

- Inflexibilidad respecto a ciertos parámetros como condiciones de borde y sus rangos.
- Errores de observación

El experimento numérico corrige o compensa las dificultades del experimento físico ya que:

- Es de relativamente bajo costo, en especial las repeticiones.
- Todos los parámetros son “observables” (calculables).
- Es sumamente flexible a bajo costo.
- Sólo adolece de errores numéricos, como errores de redondeo en el cálculo.

Por otra parte, al crear un experimento numérico se suelen despreciar ciertas leyes o efectos físicos, por conveniencia o ignorancia (por ejemplo, difusión multicomponente, transmisión del calor por radiación). Es también común que los resultados del experimento numérico sean muy voluminosos (grandes cantidades de datos numéricos) que oscurecen y obstaculizan la comprensión del fenómeno.

En resumen, hoy en día se considera que la fase experimental, por lo menos en lo que concierne al tema presente, se compone de experimentos físicos y numéricos, complementarios y de similar importancia. Tal es así que hay grupos internacionales que se dedican al diseño de experimentos que tiendan a minimizar las dificultades enumeradas más arriba para así poder realizar los dos tipos de experimentos sobre el mismo caso y perfeccionar las técnicas experimentales.

Los experimentos numéricos sobre flujos reactivos se pueden plantear en fase líquida o gaseosa o ser multifase (combustión de rocíos). La combustión heterogénea (rocíos, polvillo de carbón) requiere modelos y técnicas especiales que no se tratan en este trabajo.

Los flujos reactivos en fase líquida requieren un planteo especial de las ecuaciones a satisfacer (modelado de fluidos incompresibles) y no se tratarán en detalle, haciéndose notar, sin embargo, las diferencias cuando corresponda.

La mayor parte del presente trabajo se dedica a los flujos reactivos en fase gaseosa, de los cuales el caso más importante desde

el punto de vista socioeconómico es el de la combustión, particularmente la combustión de combustibles fósiles en aire. Sin embargo, la teoría y las técnicas descriptas son aplicables en forma general y se notarán las diferencias en los casos específicos.

1.2 Planteo general del problema

En forma general el experimento numérico se puede plantear como sigue: dado un entorno físico (reactor) y un flujo de especies químicas que pueden reaccionar químicamente entre sí, se plantean las relaciones matemáticas entre las variables del flujo, como ser,

- Leyes de conservación de la física (de la masa, de la cantidad de movimiento y de la energía)
- Leyes de la cinética química, la termodinámica y la termoquímica.
- Otras relaciones tales como relaciones de simetría, leyes de la mecánica, etc.
- Condiciones de borde o frontera.

Algunas de estas relaciones tienen forma algebraica (por ejemplo, la ecuación de estado de los gases ideales), pero otras tienen forma de ecuaciones diferenciales, es decir, plantean relaciones entre las derivadas, y no entre los valores, de las variables, y por consiguiente no tienen en general una solución explícita; para ellas se busca una solución que las satisfaga, sujeta a las condiciones de borde.

El número de ecuaciones adoptadas debe ser igual al de las incógnitas (los parámetros del flujo)

Se procede entonces a discretizar (dividir) el campo de flujo en porciones finitas y replantear las ecuaciones diferenciales en cada porción, en forma discreta, convirtiéndolas en ecuaciones algebraicas lineales, tantas como porciones haya del campo de flujo.

El sistema de ecuaciones lineales resultante se resuelve conjuntamente con las relaciones algebraicas remanentes para obtener, en cada porción del espacio discretizado, un conjunto de los valores de todos los parámetros del flujo, que forman la “solución” numérica del problema.

Aunque parezca innecesario, ha sido formalmente demostrado que dicha solución numérica tiende a la solución exacta del problema a medida que disminuye el tamaño de las porciones en que se divide el espacio físico.

1.3 Nomenclatura y unidades

Las sustancias que pueden individualizarse por una fórmula química se denominan *especies*. Un ejemplo es el dióxido de Carbono CO_2 , y otro es el Dieseloil, cuya fórmula (empírica) es $\text{CH}_{1.15}\text{S}_{0.0009}$, (por átomo de carbono).

La cantidad de una especie química presente en un punto del flujo reactivo puede medirse de diversas maneras:

- $[i]$: Concentración de la especie i , en moles/ m^3 : ej: $[\text{H}_2\text{O}]$
- y_i : Fracción de masa de la especie i ; masa de la especie por unidad de masa de mezcla; adimensional; ej: y_{CO}
- x_i : Fracción molar de la especie i ; moles de la especie por mol de mezcla; adimensional.
- Γ_i : Abundancia específica de la especie i ; kilomoles de la especie por kilogramo de mezcla.

Si denominamos W_i [kg/kmol] a la masa molecular de la especie, se cumple que

$$\Gamma_i = \frac{y_i}{W_i} \quad . \quad \{1.1\}$$

Si W es la masa molecular de la mezcla y ρ [kg/ m^3] su densidad

$$[i] = \frac{\rho y_i}{W_i} = \frac{\rho x_i}{W} = \rho \Gamma_i \quad \{1.2\}$$

Las relaciones generales

$$\Sigma y_i = \Sigma x_i = W \Sigma \Gamma_i = 1 \quad \{1.3\}$$

junto con la Ley de Dalton

$$p_i = x_i p \quad \{1.4\}$$

(p en Pascales, Pa=N/m²) y la ecuación de estado de los gases ideales

$$p = \rho \frac{\mathfrak{R}}{W} T; \quad \mathfrak{R} = 8314 \frac{J}{kmol K} \quad \{1.5\}$$

nos permiten escribir

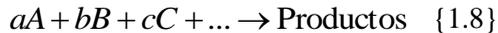
$$p_i = \rho_i \frac{\mathfrak{R}}{W_i} T, y \quad \{1.6\}$$

$$y_i = \rho_i / \rho. \quad \{1.7\}$$

Para el caso especial de las especies atómicas (ej., C, H, O, etc.) la fracción de masa se indica con z en lugar de y.

1.4 Química

La reacción química elemental



tiene velocidad de reacción según la ley de acción de masas:

$$w = k[A]^a [B]^b [C]^c \dots \left[\frac{\text{kmoles}}{\text{m}^3 \text{s}} \right], \quad \{1.9\}$$

donde la constante de reacción k viene dada generalmente en la forma de Arrhenius:

$$k = Cte T^\beta e^{-E/\mathfrak{R}T}. \quad \{1.10\}$$

Las constantes Cte, β y E están tabuladas para la reacción considerada.

La velocidad de consumo de la especie A será entonces:

$$\frac{d[A]}{dt} = -aw, \quad \{1.11\}$$

$$\rho \frac{d\Gamma_A}{dt} = -aw, \quad \{1.12\}$$

$$\rho \frac{dy_A}{dt} = -awW_A, \text{ etc.} \quad \{1.13\}$$

1.5 Termoquímica

La entalpía específica total [J/mol] de una especie i está dada por

$$H_i = \Delta H_{f,i}(T^0) + \int_{T^0}^T c_{p,i} dT, \quad \{1.14\}$$

donde $\Delta H_{f,i}(T^0)$ es el calor de formación de la sustancia a la temperatura standard T^0 (generalmente 298.16 K), y $c_{p,i}$ es el calor específico molar a presión constante.

En la gran mayoría de los flujos reactivos el número de Mach M es muy inferior a la unidad, es decir, son flujos subsónicos (lo cual no debe confundirse con flujos incompresibles ya que los flujos reactivos son en general de densidad variable debido a los cambios de temperatura). En estos casos la diferencia entre la temperatura de estagnación T_0 y la estática T es despreciable:

$$T_0 = T \left(1 + \frac{\gamma - 1}{2} M^2 \right) \approx T. \quad \{1.15\}$$

Si no fuera así se trabaja con las condiciones de estagnación y H_i será la entalpía de estagnación.

En estas condiciones H_i incluye los componentes mecánicos y químicos de la energía y por lo tanto sólo puede ser alterada por el intercambio de calor o trabajo desde o hacia el sistema. En un sistema adiabático, H_i es una variable conservada, es decir, no es afectada por la reacción química.

Para gases es común modelar la dependencia de entalpía y calor específico con la temperatura utilizando polinomios. Una forma usual es:

$$\frac{H_i}{\mathfrak{R}T} = a_1 + \frac{a_2}{2}T + \frac{a_3}{3}T^2 + \frac{a_4}{4}T^3 + \frac{a_5}{5}T^4 + \frac{a_6}{T}, \quad \{1.16\}$$

$$\frac{c_{p,i}}{\mathfrak{R}} = a_1 + a_2T + a_3T^2 + a_4T^3 + a_5T^4. \quad \{1.17\}$$

Los coeficientes para cada especie están tabulados para distintos rangos de temperatura. Las unidades de H_i son las de $\mathfrak{R}T$ y las de $c_{p,i}$ las de \mathfrak{R} . La temperatura debe ser dada en Kelvin.

La entalpía por unidad de masa es

$$h_i = H_i / W_i. \quad \{1.18\}$$

Para mezclas:

$$h = \sum_i y_i h_i = \sum_i \Gamma_i H_i, \quad \{1.19\}$$

$$H = \sum_i x_i H_i = W \sum_i y_i h_i. \quad \{1.20\}$$

La masa molecular de la mezcla es:

$$W = \sum_i x_i W_i = \frac{1}{\sum_i \frac{y_i}{W_i}} = \frac{1}{\sum_i \Gamma_i}. \quad \{1.21\}$$

Dada la reacción química



entre las especies M_i , el calor de reacción ΔH viene dado por

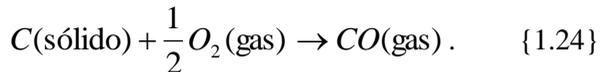
$$\Delta H = \sum_i (\nu'_i - \nu_i) H_i. \quad \{1.23\}$$

Si el resultado de la reacción es un mol de una sustancia el calor de reacción es el calor de formación de la sustancia.

Los calores de reacción se calculan a 298.16 K. Los calores de formación de las sustancias en sus estados naturales (O_2 , N_2 , C, H_2) son cero por convención.

Ejemplos:

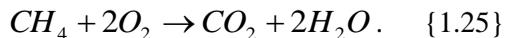
- Calor de formación



Entalpías a 298.16 K: C(s) : 0
 $O_2(g)$: 0
 $CO(g)$: -110.57 kJ/mol

Calor de formación de CO: $1 \times (-110.57) - 1 \times 0 - 1/2 \times 0 = -110.57$ kJ/mol

- Calor de reacción



$H_{CH_4} = -74.891$ kJ/mol

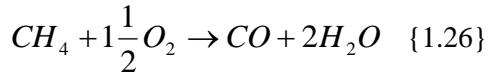
$$\begin{aligned}H_{O_2} &= 0 \\H_{CO_2} &= -393.616 \text{ kJ/mol} \\H_{H_2O} &= -241.885 \text{ kJ/mol}\end{aligned}$$

$$\Delta H_r = -393.616 \times 1 - 241.885 \times 2 + 74.891 \times 1 = -802.495 \text{ kJ/mol}$$

Un calor de reacción negativo indica una reacción exotérmica, y viceversa.

1.6 Sistemas de reacciones elementales

Las reacciones elementales obedecen a la ley de acción de masas (Ec. {1.11}). Es común encontrar en la literatura reacciones que no obedecen a la ley de acción de masas. Por ejemplo, para la reacción



la velocidad de reacción recomendada es

$$w = 5.3 \times 10^{18} e^{-57/RT} [CH_4][O_2]^{1/2}[H_2O]. \{1.27\}$$

Esto evidencia que la reacción considerada no es una reacción elemental sino que se ha obtenido experimentalmente o por combinación de reacciones elementales.

El paso de reactantes a productos finales rara vez tiene lugar entre sustancias simples en una sola reacción. Por ejemplo, la combustión del Hidrógeno



no es una reacción elemental, no obedece a la ley de acción de masas y no tiene lugar en la naturaleza. Lo que sucede es que hay un número de reacciones elementales simultáneas cuyo resultado es lo que denominamos productos, que pueden ser o no, por ejemplo, H₂O, dependiendo de las condiciones finales. Para el caso del ejemplo las reacciones elementales más importantes son:

1. $2O + M \leftrightarrow O_2 + M$
2. $O + H + M \leftrightarrow OH + M$
3. $O + H_2 \leftrightarrow H + OH$
4. $O + HO_2 \leftrightarrow OH + O_2$
5. $O + H_2O_2 \leftrightarrow OH + HO_2$
6. $H + O_2 + M \leftrightarrow HO_2 + M$
7. $H + 2O_2 \leftrightarrow HO_2 + O_2$
8. $H + O_2 + H_2O \leftrightarrow HO_2 + H_2O$
9. $H + O_2 \leftrightarrow O + OH$
10. $2H + M \leftrightarrow H_2 + M$
11. $2H + H_2 \leftrightarrow 2H_2$
12. $2H + H_2O \leftrightarrow H_2 + H_2O$
13. $H + HO_2 \leftrightarrow O + H_2O$
14. $H + HO_2 \leftrightarrow O_2 + H_2$
15. $H + HO_2 \leftrightarrow 2OH$
16. $H + H_2O_2 \leftrightarrow HO_2 + H_2$
17. $H + H_2O_2 \leftrightarrow OH + H_2O$

Como se vé, aún para el caso sencillo de la combustión del Hidrógeno con oxígeno hay que considerar 17 reacciones simultáneas que involucran 9 especies químicas, incluyendo al “gas de baño”, indicado por M.

Para situaciones más complejas el número de reacciones y especies crece rápidamente. Por ejemplo, para la combustión del metano en aire el mecanismo elemental recomendado por el Gas Research Institute de USA como Mecanismo 2.11 (ver Apéndice) consta de 274 reacciones entre 49 especies.

Es importante destacar que todas estas reacciones obedecen a la ley de acción de masas.

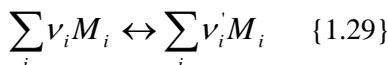
Estos listados de reacciones elementales no incluyen todas las reacciones posibles, sólo aquellas consideradas significativas. Por esto se los denomina “mecanismos esqueléticos”.

La composición de la mezcla de gases dependerá del tiempo, del escurrimiento y de las condiciones de frontera. Hay diversas herramientas que simplifican algo el problema y permiten estimar la composición de la mezcla. Se pueden citar las hipótesis de equilibrio, estado estacionario, adiabaticidad, etc.

1.7 Reducción de sistemas esqueléticos

El número de especies y reacciones de un sistema esquelético se puede reducir utilizando hipótesis basadas en la observación experimental.

Por ejemplo, puede postularse que para cierta zona del flujo una reacción está en *equilibrio*. Esto significa que, dada la reacción reversible



las velocidades de reacción en ambos sentidos son iguales:

$$w_d = k_d \prod_i [M_i]^{\nu_i} = w_r = k_r \prod_i [M_i]^{\nu'_i} . \{1.30\}$$

Se puede definir la constante de equilibrio K:

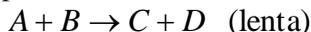
$$K = \frac{k_d}{k_r} = \frac{\prod_i [M_i]^{\nu_i}}{\prod_i [M_i]^{\nu'_i}} . \quad \{1.31\}$$

La constante de equilibrio es sólo función de la temperatura, y puede calcularse en función de las concentraciones (como se indica) o de las presiones parciales, fracciones de masa o fracciones molares. Una constante de equilibrio alta indica que la reacción está casi completa (pocos reactantes, muchos productos), y viceversa.

Otra hipótesis que puede formularse es que, nuevamente para cierta zona del flujo, una especie química está en *estado estacionario*, es decir, que su concentración es relativamente

constante en el tiempo. Luego, su velocidad de creación/ destrucción global (incluyendo todas las reacciones en las que intervenga) es cero.

También puede postularse que algunas reacciones son sumamente rápidas en cierta dirección (directa o reversa), por lo que se pueden considerar completas:





eliminando la especie C.

Finalmente, ciertas reacciones pueden considerarse extremadamente lentas y omitirse para la resolución del problema.

Con estas hipótesis y simples operaciones algebraicas se reduce el número de reacciones y especies, obteniéndose un *mecanismo reducido* que involucra sólo a ciertas *especies principales*. Es de notar que las reacciones del mecanismo reducido no obedecen a la ley de acción de masas (no son reacciones elementales).

En el proceso de generación del mecanismo reducido se obtienen relaciones matemáticas que permiten calcular

- las velocidades de reacción de las nuevas reacciones del mecanismo reducido, y
- las concentraciones de las especies menores y las supuestas en estado estacionario.

Los números de reacciones y de especies mayores del mecanismo reducido pueden especificarse a voluntad, desde el mismo mecanismo esquelético hasta la reacción de un solo paso, añadiendo más suposiciones de especies en estado estacionario, reacciones en equilibrio, reacciones rápidas y lentas, etc. El mecanismo resultante será tanto menos fiel cuanto más se lo reduzca.

El proceso de reducción ha sido automatizado y codificado en el programa REDMECH de Göttgens y otros, de dominio público.

En el Apéndice B se ilustra la generación de un mecanismo de 4 pasos a partir de un mecanismo esquelético de 18 pasos para el caso

de la combustión del metano en aire (sin incluir la química del Nitrógeno).

1.8 Resumen de química

La mezcla reactiva tendrá una composición definida por las concentraciones de las especies químicas.

Las concentraciones están relacionadas entre sí y a las condiciones de frontera y de estado por las reacciones químicas. Las últimas están dadas por mecanismos esqueletales que comprenden reacciones elementales que obedecen la ley de acción de masas.

El número de especies y reacciones a considerar puede reducirse considerablemente por medio de hipótesis simplificadoras.

Luego, el aspecto químico del problema de simulación numérica queda reducido al cálculo de las concentraciones de un número reducido de especies (las especies principales o mayores) de las cuales se conocen sus velocidades de creación/destrucción química; el cálculo de las especies menores es algebraico.

El conocimiento de las concentraciones de las especies permite el cálculo de las demás propiedades de la mezcla (densidad, masa molecular, entalpía, etc.).

Referencias al Capítulo 1

- J. Göttgens and P. Terhoeven; *Appendix B : RedMech : an automatic reduction program*, en *Reduced kinetic mechanisms for applications in combustion systems; Lecture notes in physics.*, New series m., Monographs ;, m15, Norbert Peters; Bernd Rogg, Eds. Springer-Verlag, Berlin ; New York, 1993

CAPÍTULO 2

Modelos y métodos

2.1 Escalares conservados

Un concepto muy útil para el modelado de flujos reactivos es el de escalares conservados. Un escalar conservado es aquel que no se modifica por las reacciones químicas. Ejemplos de escalares conservados son los números de átomos de las especies atómicas; en un sistema adiabático la entalpía total estandarizada es también un escalar conservado.

Para la reacción $A+B \rightarrow \text{Productos}$, definimos la fracción de mezcla como

$$f = \frac{\text{masa de la especie } A}{\text{masa total}}. \quad \{2.1\}$$

Se nota que la cantidad de masa que aportó a la mezcla la especie A no se puede alterar, haya o no sucedido la reacción química.

Definida de esta manera la fracción de mezcla es un escalar conservado.

Si el flujo es premezclado la fracción de masa tiene la misma definición, sólo que toma un solo valor en todo el campo. (no sólo es un escalar conservado sino que es una constante).

Para flujos no-premezclados, si β es un escalar conservado que toma los valores β_A y β_B en las corrientes de reactantes de entrada A y B, entonces se puede escribir

$$f = \frac{\beta - \beta_B}{\beta_A - \beta_B}. \quad \{2.2\}$$

De esta manera f queda normalizado entre 0 y 1.

Una aplicación inmediata de este concepto es en el caso de la reacción adiabática. La entalpía de la mezcla en cualquier punto del campo de flujo estará dada por

$$f = \frac{h - h_B}{h_A - h_B}, \quad \{2.3\}$$

de donde

$$h = f h_A + (1 - f) h_B. \quad \{2.4\}$$

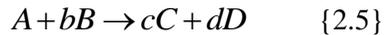
Luego, el conocimiento de f y las condiciones de entrada nos permite obtener la entalpía en todo el campo de flujo.

2.2 Modelos de reacción

Si la química es suficientemente rápida con respecto a la fluidomecánica podemos considerar que, una vez que los reactantes han arribado al volumen de control por difusión/convección y están íntimamente mezclados, la concentración de reactantes y productos se puede estudiar exclusivamente en base a las reacciones químicas.

En este caso tenemos dos modelos de reacción relativamente sencillos que proporcionan la composición de la mezcla. Estos son el modelo *de un solo paso* y el de *equilibrio químico*.

En el modelo de un solo paso consideramos la reacción



(que puede extenderse a más productos).

La fracción de mezcla en cualquier punto del campo puede obtenerse por su definición:

$$f = \frac{[A]W_A}{[A]W_A + [B]W_B}. \quad \{2.6\}$$

Dada la velocidad de la reacción w , los consumos y producciones de las especies son $w_A = -w$, $w_B = -bw$, $w_C = +cw$, y $w_D = +dw$. Si formamos los escalares

$$\beta_1 = [A] - [B]/b \quad \{2.7\}$$

$$\beta_2 = [A] + [C]/c \quad \{2.8\}$$

$$\beta_3 = [A] + [D]/d \quad \{2.9\}$$

$$\beta_4 = [B]/b + [C]/c \quad \{2.10\}$$

$$\beta_5 = [B]/b + [D]/d \quad \{2.11\}$$

y derivamos con respecto al tiempo, como $d[i]/dt = w_i$,

$$\frac{d\beta_1}{dt} = w_A - w_B / b = -w + w = 0, \quad \{2.12\}$$

$$\frac{d\beta_2}{dt} = w_A + w_C / c = -w + w = 0, \text{ etc.}, \quad \{2.12\}$$

lo que prueba que β_1 - β_5 no se crean ni se destruyen en el tiempo, o sea, son escalares conservados.

Multiplicamos β_1 por aW_A/W y queda:

$$\beta_1 = [A] \frac{W_A}{W} - [B] \frac{W_B}{W} \frac{W_A}{W_B} \frac{1}{b}. \quad \{2.13\}$$

Llamamos s al coeficiente estequiométrico de la especie B, en unidades de masa:

$$s = \frac{bW_B}{W_A}, \quad \{2.14\}$$

y, como

$$[A] \frac{W_A}{W} = y_A, \quad \{2.15\}$$

resulta

$$\beta_1 = y_A - \frac{y_B}{s}. \quad \{2.16\}$$

Similarmente, si llamamos

$$s' = \text{masa producida de } C \text{ por unidad de masa de } A, \quad \{2.17\}$$

y

$$s'' = \text{masa producida de } D \text{ por unidad de masa de } A, \quad \{2.18\}$$

quedan

$$\beta_2 = y_A + \frac{y_C}{s'}, \quad \{2.19\}$$

$$\beta_3 = y_A + \frac{y_D}{s''}, \quad \{2.20\}$$

$$\beta_4 = y_B + y_C \frac{s}{s'}, \quad \{2.21\}$$

y

$$\beta_5 = y_B + y_D \frac{s}{s''}. \quad \{2.22\}$$

Notamos que $s'+s''=s+1$.

Utilizamos ahora β_1 para formar f :

$$f = \frac{\beta_1 - \beta_{1B}}{\beta_{1A} - \beta_{1B}}, \quad \{2.23\}$$

$$\beta_{1A} = y_{AA}, \quad \{2.24\}$$

$$\beta_{1B} = -\frac{y_B}{s}. \quad \{2.25\}$$

donde y_{BB} es la fracción de masa de la especie B en la corriente de entrada B (normalmente igual a 1, pero puede haber alguna especie inerte). Luego,

$$f = \frac{y_A - \frac{y_B}{s} + \frac{y_{BB}}{s}}{y_{AA} + \frac{y_{BB}}{s}}. \quad \{2.26\}$$

Distinguimos ahora el valor estequiométrico de f , aquel para el cual ni A ni B aparecen entre los productos. Luego, si $f > f_e$ habrá menos B que el necesario y aparecerá A entre los productos. Para este caso, en la mezcla $y_B=0$ y resulta

$$f = \frac{y_A + \frac{y_{BB}}{s}}{y_{AA} + \frac{y_{BB}}{s}}. \quad \{2.27\}$$

Cuando $f=f_e$ será también $y_A=0$ y entonces

$$f_e = \frac{\frac{y_{BB}}{s}}{y_{AA} + \frac{y_{BB}}{s}}. \quad \{2.29\}$$

De las dos últimas relaciones, para $f>f_e$

$$y_A = \frac{y_{BB}}{s} \left(\frac{f}{f_e} - 1 \right) (1), \quad \{2.30\}$$

$$y_B = 0 (2). \quad \{2.31\}$$

Considerando ahora β_2 y con igual procedimiento:

$$\beta_{2A} = y_{AA}, \quad \{2.32\}$$

$$\beta_{2B} = 0, \quad \{2.33\}$$

$$f = \frac{y_A + \frac{y_C}{s'}}{y_{AA}}. \quad \{2.34\}$$

Luego,

$$y_C = s' \left[f y_{AA} - \frac{y_{BB}}{s} \left(\frac{f}{f_e} - 1 \right) \right] (3), \quad \{2.35\}$$

y considerando β_3

$$y_D = s'' \left[f y_{AA} - \frac{y_{BB}}{s} \left(\frac{f}{f_e} - 1 \right) \right] (4), \quad \{2.36\}$$

En la región $f<f_e$ será $y_A=0$. Considerando β_1 obtenemos

$$f = \frac{-\frac{y_B}{s} + \frac{y_{BB}}{s}}{y_{AA} + \frac{y_{BB}}{s}}. \quad \{2.37\}$$

$$y_B = y_{BB} \left(1 - \frac{f}{f_e} \right) (2'), \quad \{2.38\}$$

$$y_A = 0 \text{ (1')}. \quad \{2.39\}$$

y considerando β_4 y β_5 :

$$y_C = s' f y_{AA} \text{ (3')}, \quad \{2.40\}$$

$$y_D = s'' f y_{AA} \text{ (4')}. \quad \{2.41\}$$

Este modelo de un solo paso se puede representar en el plano y - f como se muestra:

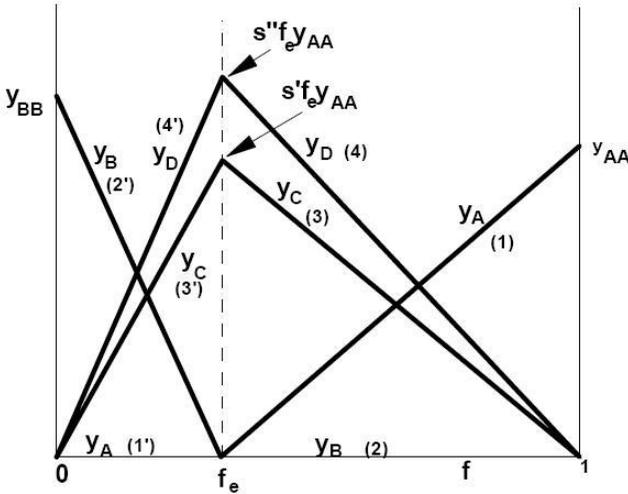


Figura 2.1: Modelo de un solo paso

De este modo dado un valor de la fracción de mezcla f podemos obtener la composición de la mezcla.

Obtenida la composición de la mezcla obtenemos la entalpía de la reacción adiabática como:

$$h = f h_{AA} + (1 - f) h_{BB}, \quad \{2.42\}$$

o bien como

$$h = \sum_i y_i h_i. \quad \{2.43\}$$

Para obtener la temperatura de la mezcla es común reducir el orden del polinomio (Ec. {1.18}), por ejemplo, al segundo grado:

$$h_i = a_{1i} + a_{2i}T + a_{3i}T^2, \quad \{2.44\}$$

Luego,

$$h = \left(\sum_i y_i a_{1i} \right) + T \left(\sum_i y_i a_{2i} \right) + T^2 \left(\sum_i y_i a_{3i} \right), \quad \{2.45\}$$

y la temperatura se obtiene resolviendo la ecuación de segundo grado, ya que h es conocido.

Alternativamente, si el calor de reacción por mol de A es $-\Delta H_r$, podemos calcular la temperatura T_a de la reacción adiabática del balance:

$$hM_A = \frac{-\Delta H_r}{W_A} M_A = (M_A + M_B) c_p (T_a - T_m), \quad \{2.46\}$$

donde M_A y M_B son las masas de las especies y donde utilizamos un calor específico por unidad de masa medio y la temperatura de la mezcla sin reaccionar:

$$T_m = fT_{AA} + (1-f)T_{BB}. \quad \{2.47\}$$

Si el número de moles de B lo damos como el valor estequiométrico b dividido por la equivalencia ϕ , operando la Ec. {2.46} obtenemos

$$\frac{-\Delta h_r}{c_p} = \left(1 + \frac{s}{\phi} \right) (T_a - T_m). \quad \{2.48\}$$

Dado que estamos considerando química rápida, en el caso de procesos premezclados la mezcla de reactivos dá lugar a los productos en forma inmediata. Sin embargo puede ser de utilidad definir una variable θ de avance de la reacción, desde la mezcla inerte hasta la reacción completada. Con lo anterior definimos entonces

$$\theta = \frac{T - T_m}{T_a - T_m}. \quad \{2.48\}$$

El avance de reacción varía entre 0 y 1.

También definimos los valores de las fracciones de mezcla de A, B, C y D en la mezcla inerte:

$$y_{Am} = f y_{AA}, \quad \{2.49\}$$

$$y_{Bm} = (1 - f) y_{BB}, \quad \{2.50\}$$

$$y_{Cm} = 0, \quad \{2.51\}$$

$$y_{Dm} = 0. \quad \{2.52\}$$

En la reacción premezclada la fracción de mezcla toma un único valor. Para el caso de $f < f_e$ las fracciones de mezcla de A, B, C y D se pueden obtener a partir de la Figura 2.2:

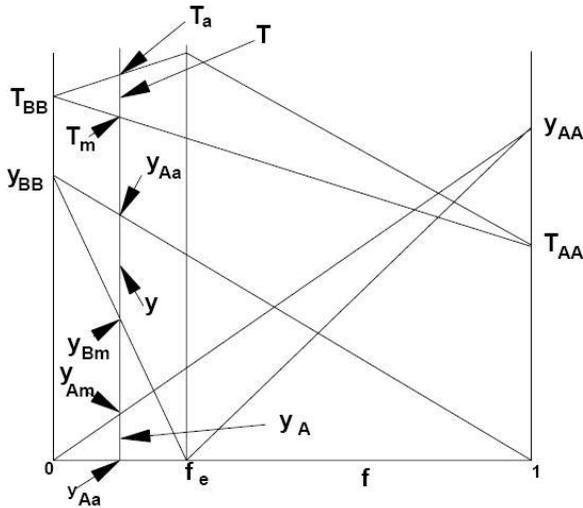


Figura 2.2: Pasaje de mezcla a productos

Resultan:

$$y_A = \theta f y_{AA}, \quad \{2.53\}$$

$$y_B = \left[\theta \left(\frac{f}{f_e} - f \right) + 1 - \frac{f}{f_e} \right] f y_{BB}, \quad \{2.54\}$$

$$y_C = \theta s' f y_{AA}, \quad \{2.55\}$$

$$y_D = \theta s'' f y_{AA}. \quad \{2.56\}$$

Para la región $f > f_e$ similarmente resulta:

$$y_A = \left[\theta f_e \left(\frac{1-f}{1-f_e} \right) + \frac{f-f_e}{1-f_e} \right] y_{AA}, \quad \{2.57\}$$

$$y_B = \theta(1-f)y_{BB}, \quad \{2.58\}$$

$$y_C = \theta \left(\frac{1-f}{1-f_e} \right) s' f_e y_{AA}, \quad \{2.59\}$$

$$y_D = \theta \left(\frac{1-f}{1-f_e} \right) s'' f_e y_{AA}. \quad \{2.60\}$$

Para la temperatura, en ambas regiones:

$$T = \theta(T_a - T_m) + T_m. \quad \{2.61\}$$

El modelo de un solo paso nos dá la composición de la mezcla con sólo conocer f , pero no resulta en ninguna especie intermedia o menor. Para esto es necesario un modelo que admita la existencia de más especies y reacciones.

El segundo modelo simple es el de equilibrio químico: se asume que la química es rápida y la mezcla de un número de especies es estable en el tiempo a una dada temperatura.

Se nota que esto no implica que no estén sucediendo reacciones químicas ni que todas las velocidades de reacción sean cero, sino que, para todas las especies, las velocidades de creación y de destrucción están balanceadas.

La composición de una mezcla definida por su fracción de mezcla y su presión es sólo función de la temperatura a través de las constantes de reacción

$$k = AT^{-\beta} e^{-E/RT}. \quad \{2.62\}$$

Luego, podemos formar una tabla donde, dados f y h obtenemos la composición y_i y la temperatura de la mezcla.

El equilibrio de la mezcla puede hallarse utilizando la energía libre de Gibbs, G , cuya definición es:

$$G = H - TS. \quad \{2.63\}$$

Para un sistema en equilibrio a T y P constantes se demuestra que la energía libre es mínima, o sea, $\Delta G = 0$. En estas condiciones se puede demostrar que

$$\Delta G = \Delta G^0 + \mathcal{R}T \ln(K_p) = 0, \quad \{2.64\}$$

donde ΔG^0 es el cambio en G a una atmósfera desde condiciones STP a las actuales, y K_p es la constante de equilibrio de la reacción, calculada utilizando presiones parciales.

Esta última ecuación nos relaciona la composición ($\Delta G^0, K_p$) con la temperatura, y se puede plantear una de estas relaciones para cada reacción, por ejemplo, de un sistema esquelético. Luego se busca minimizar G variando sistemáticamente la composición y la temperatura.

Esto se puede hacer automáticamente utilizando, por ejemplo, el programa EQUIL o DEQUIL, variantes del programa STANJAN, de dominio público. Estos programas hallan la composición de equilibrio dadas f y T , o h y T , o T y P , etc. Y se pueden especificar las especies involucradas sin especificar el mecanismo esquelético, o el mecanismo deseado.

La figura siguiente ilustra el resultado para una mezcla de CH_4 y aire, inicialmente a 336K. No se especificó un mecanismo de reacción sino solamente las 17 especies $\text{CH}_4, \text{CO}_2, \text{H}_2\text{O}, \text{CO}, \text{H}_2, \text{N}_2, \text{CH}_3, \text{H}, \text{O}, \text{OH}, \text{HCO}, \text{HO}_2, \text{CH}_2\text{O}, \text{O}_2, \text{CH}_3\text{O}, \text{H}_2\text{O}_2$ y C , (este último para balancear si fuera necesario durante el cálculo). Se muestran la temperatura (caso adiabático) y algunas especies:

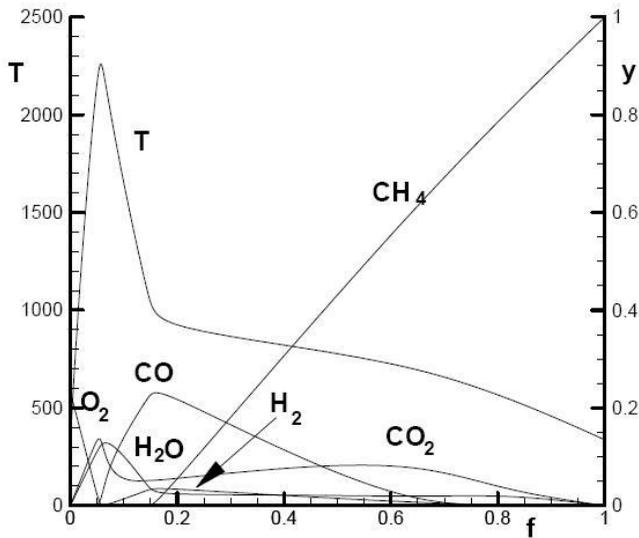


Figura 2.3: Equilibrio, metano en aire a 336K

El modelo de equilibrio sí permite calcular algunas especies intermedias y menores. Sin embargo, aún no se tiene en cuenta la fluidomecánica, es decir, la convección y difusión.

Estos métodos, de un solo paso y equilibrio químico, pueden utilizarse para dar una solución aproximada rápida, o bien para generar una condición inicial para la resolución numérica completa. En ambos casos se incorpora el modelo en forma de tablas de y_i versus f o de y_i versus f y h .

2.3 Método de resolución numérica

En breve, el método de resolución numérica consiste en satisfacer las ecuaciones de conservación de la física, habida cuenta de las condiciones de frontera.

Una ecuación de conservación (también llamada ecuación de transporte o de balance) es conceptualmente la igualdad referida a un volumen de control:

$$\text{Cambio en el tiempo} = \text{convección} + \text{difusión} + \text{creación/destrucción}.$$

Este concepto se aplica a cualquier parámetro intensivo, es decir, que sea una propiedad del fluido.

Las incógnitas a computar son:

- presión
- temperatura
- densidad
- masa molecular
- velocidad (3 componentes)
- composición (n componentes)
- entalpía

a los que se pueden agregar otros parámetros tales como los calores específicos, viscosidad, etc.

No es necesario resolver ecuaciones de conservación para todas las variables. Hay otras relaciones algebraicas que permiten reducir el número de ecuaciones a resolver. Por ejemplo, la ecuación de estado

$$p = \rho \frac{\mathfrak{R}}{W} T, \quad \{2.65\}$$

la ecuación para la masa molecular

$$\frac{1}{W} = \sum_n \frac{y_n}{W_n}, \text{ etc.}, \quad \{2.66\}$$

y particularmente el uso de escalares conservados. De estos últimos se pueden generar al menos tantos como especies atómicas haya en las corrientes de entrada, ya que el número de átomos es un escalar conservado.

También disponemos de las relaciones $h = h(T)$ y $c_p = c_p(T)$ y relaciones viscosidad-temperatura.

De todos modos, debemos satisfacer ecuaciones de conservación para un número elevado de escalares.

Las ecuaciones de conservación, escritas en forma tensorial y utilizando la convención de Einstein (índices repetidos indican suma) son:

- Ecuación de continuidad o de conservación de la masa:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i)}{\partial x_i} = 0. \quad \{2.67\}$$

- Ecuación de conservación de la cantidad de movimiento o ecuación de Navier-Stokes (una para cada dirección i):

$$\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i u_j)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right) \right] - \frac{\partial p}{\partial x_i} \quad \{2.68\}$$

- Ecuación de conservación de la energía o de entalpía:

$$\frac{\partial(\rho h)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j h)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\frac{\mu}{Pr} \left(\frac{\partial h}{\partial x_j} + \left(\frac{1}{Le} - 1 \right) \left(h_k \frac{\partial y_k}{\partial x_j} \right) \right) \right] + \frac{\partial p}{\partial t} \quad \{2.69\}$$

- Ecuación de conservación de la especie química y_n :

$$\frac{\partial(\rho y_n)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j y_n)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\frac{\mu}{Sc} \frac{\partial y_n}{\partial x_j} \right] + (Ww)_n \quad \{2.70\}$$

En estas ecuaciones,

- μ es la viscosidad dinámica,
- Pr es el número de Prandtl, $Pr = c_p \mu / \lambda$
- λ es la conductividad térmica, de $dq/dt = -\lambda \nabla T$,
- Sc es el número de Schmidt, $Sc = \mu / \rho D$,
- D es la difusividad, del flujo difusivo $dm/dt = -\rho D \nabla y$
- Le es el número de Lewis, $Le = Sc / Pr$

En la ecuación de Navier-Stokes hemos despreciado el segundo coeficiente de viscosidad $\mu' = k + \frac{2}{3} \mu \cong 0$, y en la de entalpía hemos supuesto despreciables

- Los efectos de masa (gravedad)
- Los efectos Dufour y Soret (difusividad térmica)

- La difusión de presión

Una vez identificadas las variables que requieren una ecuación de conservación se procede a satisfacerlas en el campo de flujo, teniendo como condición las fronteras del campo. Las ecuaciones se satisfacen en forma discretizada, convirtiéndolas de ecuaciones diferenciales parciales a ecuaciones lineales en diferencias o volúmenes finitos.

La discretización de las ecuaciones de conservación puede hacerse de varias maneras, desde la sencilla (implícita centrada)

$$\frac{\partial y}{\partial x} = \frac{y_{+1} - y_{-1}}{2\Delta x}; y_{+1} = y(x + \Delta x); y_{-1} = y(x - \Delta x) \quad \{2.71\}$$

hasta los procedimientos más complejos como QUICK, FCT, etc., que se verán más adelante.

Se obtiene así un sistema de ecuaciones lineales, tantas como celdas de discretización existan en el volumen, por cada variable a computar.

El sistema de ecuaciones se resuelve generalmente por métodos iterativos, obteniéndose un conjunto de valores de todas las variables para cada celda del campo de flujo.

Los programas de computación (software) necesarios para el cálculo pueden adquirirse comercialmente o crearse para el problema.

Se debe notar que hay operaciones de cómputo anteriores y posteriores a la resolución del sistema de ecuaciones, denominadas en general pre-procesado y post-procesado. Las primeras incluyen la generación de la grilla de celdas de cómputo y de las matrices de constantes físicas y geométricas. Las segundas comprenden el cálculo de parámetros derivados utilizando leyes físicas y relaciones algebraicas, la manipulación de resultados y su presentación gráfica.

Ambos, el pre y el post-procesado, son operaciones tanto o más complejas como la solución del campo de flujo. El mallado y la preparación de las condiciones iniciales y de frontera del cálculo insumen normalmente la mayor parte del tiempo de una simulación. Por su parte, el resultado de la simulación es un gran número de datos numéricos cuya interpretación es muy difícil sino imposible sin

un eficiente método de presentación gráfica y condensación de resultados.

Hoy en día, en general, ya no se considera razonable escribir el software para ninguna de las etapas de solución. El post-procesado es el caso más claro, ya que existen procesadores gráficos muy eficientes y versátiles, tanto comerciales (TECPLOT) como de acceso público (GNUPLOT).

El pre-procesado es algo más problemático ya que los generadores de grilla, tanto los más simples como los más sofisticados, usualmente no pueden utilizarse como “cajas negras”, ya que producen resultados menos que óptimos o en ocasión fallan totalmente. Es común tener que escribir algo de software, ya sea para modelar inicialmente la geometría o para refinar el pre-procesado.

En lo que se refiere al procesado de las ecuaciones de transporte, si bien los algoritmos de solución de sistemas lineales y los esquemas de avance del cálculo usualmente pueden ser del tipo de “caja negra”, es comúnmente necesario tener acceso al código en lenguaje de programación (FORTRAN, C, etc.) para poder implementar modelos físicos y químicos (modelos de reacción, de mezcla, etc.) y las operaciones complementarias (cálculo de otros escalares, puntos de decisión). Algunos códigos comerciales (por ejemplo, CFX, FLUENT), pueden ser adquiridos en forma mixta, con las secciones de propiedad intelectual que dan ventaja comercial (el resolvidor de ecuaciones, la discretización) pre-compilados y sellados, y la sección de cálculos algebraicos y toma de decisiones en código abierto para introducir software específico local.

Con respecto al equipo a utilizar (hardware), vale el aforismo que no hay problema cuya solución no pueda mejorarse con una computadora más grande. La capacidad de las computadoras personales (PC) ha aumentado y continúa aumentando tanto que la mayoría de los problemas de flujos reactivos pueden encararse utilizando una PC de máxima performance. En las condiciones actuales la mejora más importante que puede desearse es mayor velocidad del reloj (memoria y procesador más veloces).

En los últimos tiempos ha comenzado a popularizarse el uso de grupos de PC conectadas para funcionar en paralelo (cluster). Si el código de cálculo se genera apropiadamente para la computación en

paralelo esto puede redundar en reducciones del tiempo de cálculo inversamente proporcionales al número de PC en el cluster.

Las supercomputadoras usualmente son necesarias para problemas con muy altos números de Reynolds (flujos de la atmósfera), de muy alta velocidad (supersónicos) o de malla muy fina (simulación numérica directa o DNS). Las minicomputadoras (workstations) están perdiendo terreno frente a las PC, conservando su ventaja sólo en dos áreas: velocidad y sistema operativo (UNIX versus WINDOWS o LINUX).

Considerando el costo de las supercomputadoras y workstations, la solución más efectiva es probablemente utilizar dos o tres PC, configuradas especialmente para las tareas de pre-procesado (gráfica interactiva, capacidad de almacenamiento), para procesado (máxima velocidad de procesado y memoria, posiblemente un cluster) y post-procesado (software gráfico, calidad de pantalla e impresión).

Los tiempos de solución son tan variados como los problemas a resolver. A título indicativo, las escalas de tiempo razonables son:

- Pre-procesado: semanas-hombre para el primer problema, horas para variaciones sobre el original.
- Procesado: horas a días de máquina.
- Post-procesado: días a semanas-hombre.

Referencias al Capítulo 2

- W.C.Reynolds; *The Element Potential Method for Chemical Equilibrium Analysis: Implementation in the Interactive Program STANJAN, Version 3*, Stanford University (1986), incluido en R.J.Kee, F.M.Rupley, E. Meeks, and J.A.Miller, *Chemkin-III: A Fortran Chemical Kinetics Package for the Analysis of Gas-Phase Chemical and Plasma Kinetics*, Sandia National Laboratories Report SAND 96-8216 (1996).
- R.J.Kee, F.M.Rupley, and J.A.Miller, "The Chemkin Thermodynamic Data Base," Sandia Nacional Laboratorios Report SAND87-8215B (1990).

CAPÍTULO 3

Flujos turbulentos

3.1 Ecuaciones instantáneas y promedios

Las ecuaciones dadas en el Capítulo 2 son válidas instantáneamente, habida cuenta de las simplificaciones hechas.

Cuando el flujo es dependiente del tiempo es necesario satisfacer las ecuaciones de transporte en un número de instantes sucesivos lo que permite computar, por ejemplo, un flujo en desarrollo temporal. La simulación numérica de flujos en desarrollo temporal se denomina simulación numérica directa (DNS) y requiere un esfuerzo computacional tan elevado que al presente está limitada a casos relativamente simples, con números de Reynolds bajos (experimentos de ondas de choque, combustión en tubos de choque).

Hay una clase de flujos que, si bien son estacionarios en el tiempo, se caracterizan porque las variables (velocidad, temperatura, composición) varían constantemente en una forma aparentemente impredecible alrededor de un valor medio.

Estos flujos turbulentos requerirían la simulación numérica instantánea con muy breves pasos de tiempo y en gran número. En la actualidad no se poseen los medios computacionales, en especial el hardware, para hacer tales cálculos, y, aún si pudiera hacerse, es probable que no fuera de interés práctico, ya que para la utilización de flujos turbulentos interesa conocer las propiedades promedio. La utilidad del experimento numérico como contraste y complemento del experimento físico se hace efectiva cuando los resultados de ambos son comparables, y los instrumentos físicos en general miden valores promedio.

Luego, es necesario modificar las ecuaciones instantáneas de transporte para computar los parámetros estocásticos de las variables, vale decir, sus momentos (media, varianza, tercer momento, cuarto momento o kurtosis, etc.).

En la generación de las ecuaciones promediadas se acepta la hipótesis de Taylor sobre la equivalencia de las medias espaciales y temporales en un volumen de control (hipótesis ergódica).

3.2 Tipos de promedios

Sea la variable ϕ sujeta a variaciones estocásticas. El promedio simple o del tipo Reynolds se define por

$$\phi = \bar{\phi} + \phi', \quad \{3.1\}$$

donde $\bar{\phi}$ es el promedio espacio-temporal de la variable ϕ en un volumen de control y ϕ' la fluctuación estocástica cuya media es, por definición, cero

Para hallar el promedio se mide la variable a intervalos regulares de tiempo en un punto de espacio un número de veces. Alternativamente, se toma un número de muestras simultáneas en un volumen de control en puntos igualmente espaciados.

Si el espaciado L , el período de muestreo T son tales que, dada la velocidad U del flujo,

$$U \approx L/T \quad \{3.2\}$$

ambos promedios serán iguales. Inversamente, si la velocidad del flujo es U y tomamos muestras separadas un tiempo T el promedio será válido en un entorno de tamaño L , y si tomamos muestras en un volumen de tamaño L el período de muestreo no debe ser superior a T .

Esto asume que lo que se está midiendo es efectivamente ϕ . Sin embargo, hay casos en que la medición de la variable no es tan aparente. Por ejemplo, si se utiliza un tubo Pitot para medir velocidad en un flujo turbulento, lo que se mide es $\overline{\frac{1}{2} \rho v^2}$, que no es igual a $\frac{1}{2} \bar{\rho} (\bar{v})^2$. Para poder deducir \bar{v} de esta medición es necesario hacer

$$\overline{\rho v^2} = (\overline{\rho} + \overline{\rho'}) (\overline{v} + \overline{v'}) (\overline{v} + \overline{v'}) = \overline{\rho} (\overline{v})^2 + \overline{\rho} \overline{v'^2} + \overline{\rho'} \overline{v'^2} + 2\overline{v} \overline{\rho' v'} \quad \{3.3\}$$

lo que requiere conocer tres nuevas correlaciones, $\overline{v'^2}$, $\overline{\rho' v'^2}$ y $\overline{\rho' v'}$.

Hay otras mediciones en las que el valor medido depende de la densidad o la velocidad u otras variables; la medición de temperatura con termocuplas o hilos calientes son ejemplos.

Para flujos reactivos donde puede existir fuertes variaciones en la densidad de la mezcla se prefiere utilizar el promedio tipo Favre, o de pesada con la densidad, definido por

$$\phi = \tilde{\phi} + \phi'' \quad \{3.4\}$$

El cómputo del promedio de ϕ se realiza según

$$\tilde{\phi} = \frac{\overline{\rho \phi}}{\overline{\rho}} \quad \{3.5\}$$

Esto mejora el caso del ejemplo ya que

$$\overline{\rho v^2} = \overline{\rho} v^2 = \overline{\rho \tilde{v}^2} + \overline{\rho} v''^2 \quad \{3.6\}$$

y sólo requiere una correlación (la varianza o autocorrelación de v).

Favre definió este promedio para simplificar la medición de las propiedades de los gases en base a la ecuación de estado

$$p = \rho \frac{\Re}{W} T, \quad \{3.7\}$$

que, utilizando promedio Reynolds resulta en

$$\overline{p} = \frac{\Re}{W} \overline{\rho T} = \frac{\Re}{W} (\overline{\rho T} + \overline{\rho' T'}), \quad \{3.8\}$$

mientras que, utilizando el promedio Favre se elimina la correlación densidad-temperatura:

$$\overline{p} = \frac{\Re}{W} \overline{\rho \tilde{T}} \quad \{3.9\}$$

Desafortunadamente esta simplificación se pierde cuando la composición de la mezcla (dada por la masa molecular W) es también una variable estocástica, ya que

$$\frac{1}{W} = \sum_i \left(\frac{y}{W} \right)_i, \quad \{3.10\}$$

y, si bien las masas moleculares de las especies, W_i , son constantes, las fracciones de masa y_i son variables turbulentas, y resulta

$$\bar{p} = \Re \sum_i \frac{\overline{\rho y_i T}}{W_i} = \Re \sum_i \frac{(\overline{\rho y_i T} + \overline{T' \rho' y'_i} + \overline{\rho' y'_i T'} + \overline{y_i \rho' T'} + \overline{\rho' y'_i T'})}{W_i}. \quad \{3.11\}$$

Esto se simplifica un poco usando promedio Favre:

$$\bar{p} = \Re \bar{\rho} \sum_i \left[\left(\frac{\tilde{y}}{W} \right)_i \tilde{T} + \left(\frac{y''}{W} \right)_i T'' \right], \quad \{3.12\}$$

pero nuevamente encontramos una correlación entre fluctuaciones de composición y temperatura que, incidentalmente, apunta al corazón de la química.

Lo anterior se repite al promediar las ecuaciones de transporte: el uso de promedios Favre simplifica el resultado, pero quedan correlaciones por modelar. Esto se denomina *el problema de cierre o de clausura* de la turbulencia (en el sentido de formar un sistema completo o cerrado de ecuaciones).

3.3 Propiedades de los promedios Reynolds y Favre

Según sus definiciones,

$$\overline{\phi} = \overline{\phi} + \overline{\phi'}; \quad \overline{\phi'} = 0, \quad \{3.13\}$$

$$\overline{\phi} = \overline{\tilde{\phi}} + \overline{\phi''}; \quad \overline{\phi''} = 0. \quad \{3.14\}$$

Notamos que $\overline{\phi'} \neq 0$ y $\overline{\phi''} \neq 0$. De las definiciones, tomando promedios cruzados y notando que

$$\overline{\tilde{\phi}} = \overline{\phi}, \text{ y} \quad \{3.15\}$$

$$\overline{\tilde{\phi}} = \overline{\tilde{\phi}}, \quad \{3.16\}$$

resulta

$$\tilde{\phi} = \overline{\tilde{\phi}} + \phi', \text{ y} \quad \{3.17\}$$

$$\overline{\phi} = \overline{\tilde{\phi}} + \overline{\phi''}, \quad \{3.18\}$$

de donde obtenemos

$$\overline{\phi''} = -\frac{\overline{\rho' \phi'}}{\rho}. \quad \{3.19\}$$

También se encuentra que

$$\overline{\phi'^2} = \overline{\phi^2} - \overline{\phi}^2, \quad \{3.20\}$$

$$\overline{\phi''^2} = \overline{\phi^2} + \overline{\tilde{\phi}^2}. \quad \{3.21\}$$

Para la densidad en particular se encuentra que

$$\overline{\rho'^2} = \overline{\rho}(\overline{\tilde{\rho}} - \overline{\rho}), \quad \{3.22\}$$

$$\overline{\rho''^2} = \overline{\tilde{\rho}}(\overline{\tilde{\rho}} - \overline{\rho}), \quad \{3.23\}$$

Como $\overline{\rho'^2} \geq 0$ y $\overline{\rho''^2} \geq 0$ deducimos que $\overline{\tilde{\rho}} \geq \overline{\rho}$ y también que $\overline{\rho''^2} \geq \overline{\rho'^2}$, es decir, que la distribución de probabilidades en promedio Favre tiene una media más alta y es más dispersa (su varianza es mayor), como ilustra la Figura siguiente:

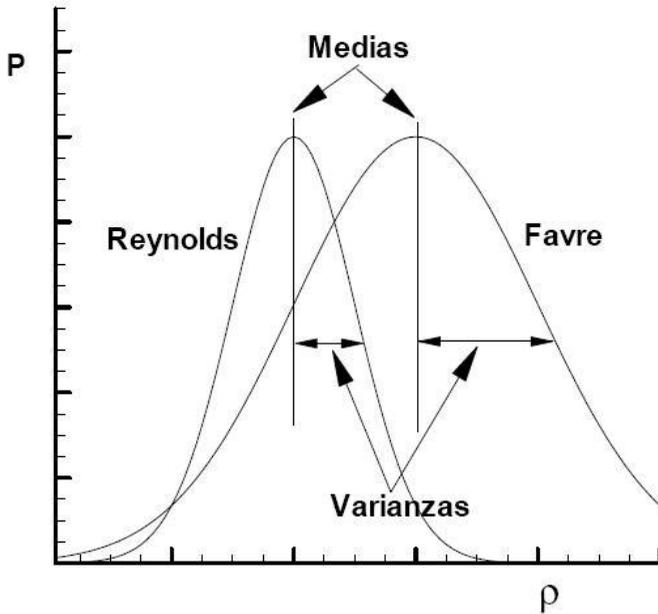


Figura 3.1: Distribuciones de probabilidades Reynolds y Favre

3.4 La ecuación de Navier-Stokes en promedio Favre

En forma tensorial y utilizando la notación de Einstein, la ecuación instantánea de conservación de la cantidad de movimiento en la dirección i es:

$$\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i u_j)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} [\mu_l S_{ij}] - \frac{\partial p}{\partial x_i}, \quad \{3.24\}$$

donde

$$S_{ij} = \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_k}{\partial x_k}. \quad \{3.25\}$$

y μ_l es la viscosidad laminar.

El término $\frac{\partial u_k}{\partial x_k} = \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z}$ es la dilatación o

divergencia de la velocidad, indicada en adelante por θ , y δ_{ij} es el delta de Kronecker.

Tomando promedio tipo Reynolds:

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}u_i u_j)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} [\mu_t \bar{S}_{ij}] - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i}, \quad \{3.26\}$$

donde hemos despreciado las variaciones turbulentas de la viscosidad laminar ya que la viscosidad de la mezcla no cambia mucho con la composición en los casos más usuales.

El término convectivo $u_i u_j$ lo expandimos como

$$u_i u_j = \tilde{u}_i \tilde{u}_j + u_i'' u_j'' \quad \{3.27\}$$

Para modelar el segundo término del segundo miembro adoptamos una forma de la Ley de Fick, o de difusión con el gradiente, que escribimos

$$u_i'' u_j'' = -D_{t,u} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j}, \quad \{3.28\}$$

que indica que la perturbación u''_i se difunde en la dirección j según la magnitud del gradiente (la diferencia) del valor promedio \tilde{u}_i en la dirección j , con un coeficiente de proporcionalidad $D_{t,u}$ (turbulento, de u).

El coeficiente de difusión lo reemplazamos utilizando el número de Schmidt:

$$Sc = \frac{\mu}{\rho D}, \quad \{3.29\}$$

$$Sc_t = \frac{\mu_t}{\rho D_t}, \quad \{3.30\}$$

(La “viscosidad turbulenta”, μ_t , aún no está definida)

Como también podríamos haber escrito

$$u_i'' u_j'' = -D_{t,u} \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i}, \quad \{3.31\}$$

adoptamos la forma

$$u_i'' u_j'' = -\frac{\mu_t}{Sc_t \bar{\rho}} \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right). \quad \{3.32\}$$

Si en esta expresión (que no es una suma ya que no hay subíndices repetidos) hacemos $i = j$ obtenemos

$$\bar{\rho} u_i''^2 = -\frac{\mu_t}{Sc_{t,u}} 2 \frac{\partial u_i}{\partial x_i}. \quad \{3.33\}$$

Si sumamos ahora los tres componentes obtenemos, en el primer miembro,

$$\bar{\rho} \left(u''^2 + v''^2 + w''^2 \right), \quad \{3.34\}$$

que es el doble de

$$\tilde{\kappa} = \frac{1}{2} u_i'' u_i'' = \frac{\left(u''^2 + v''^2 + w''^2 \right)}{2} \quad \{3.35\}$$

llamada la energía cinética de la turbulencia.

En el segundo miembro tenemos $2 \tilde{\theta}$. Luego, para mantener la igualdad de la *traza* (valor de la expresión para $i = j$) hacemos

$$\begin{aligned} \bar{\rho} u_i'' u_j'' = \\ -\frac{\mu_t}{Sc_{t,u}} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \frac{2}{3} \delta_{ij} (\bar{\rho} \tilde{\kappa}) + \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\mu_t}{Sc_{t,u}} \tilde{\theta}. \end{aligned} \quad \{3.36\}$$

Sustituyendo en la ecuación promediada:

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_i\tilde{u}_j)}{\partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_t}{Sc_{t,u}} \tilde{S}_{ij} \right) + \frac{2}{3} \delta_{ij} (\bar{\rho}\tilde{\kappa}) = \frac{\partial}{\partial x_j} [\mu_l \bar{S}_{ij}] - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} \quad \{3.37\}$$

Notamos que $\delta_{ij} \frac{\partial}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_i}$ y reordenamos para obtener

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_i\tilde{u}_j)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu_l \bar{S}_{ij} + \frac{\mu_t}{Sc_{t,u}} \tilde{S}_{ij} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\bar{p} + \frac{2}{3} \bar{\rho}\tilde{\kappa} \right) \quad \{3.38\}$$

Se verá luego que en general $\mu_t \ll \mu_l$, por lo que despreciamos la diferencia entre \bar{S}_{ij} y \tilde{S}_{ij} y, adoptando un valor del número de Schmidt laminar escribimos

$$\bar{\rho}D_u = \frac{\mu_l}{Sc_{l,u}} + \frac{\mu_t}{Sc_{t,u}} \cong \frac{\mu_l + \mu_t}{Sc_u}; Sc_u \cong Sc_{t,u}, \quad \{3.39\}$$

y queda finalmente

$$\boxed{\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_i\tilde{u}_j)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho}D_u \tilde{S}_{ij}) - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\bar{p} + \frac{2}{3} \bar{\rho}\tilde{\kappa} \right)} \quad \{3.40\}$$

Se hace notar que al sustraer el término $-2/3\tilde{\kappa}$ a la componente u_i ''² hemos supuesto que $\tilde{\kappa}$ se divide igualmente en las tres direcciones, o sea, se ha supuesto turbulencia isotrópica.

La ecuación de Navier-Stokes queda así escrita en términos de $\bar{\rho}$, \bar{p} y \tilde{u} , faltando aún definir la viscosidad turbulenta μ_t .

Todo lo anterior fue desarrollado en notación tensorial. Cuando las ecuaciones de Navier-Stokes se escriben en coordenadas cartesianas ortogonales, cilíndricas o esféricas pueden aparecer otros términos que se deben modelar. Las expresiones completas de la ecuación de Navier-Stokes en varios sistemas de coordenadas se dan en el Apéndice C.

CAPÍTULO 4

Ecuaciones de continuidad y de transporte

4.1 La ecuación de continuidad o de conservación de la masa

La forma instantánea de la ecuación de conservación de la masa, o de continuidad, es:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i)}{\partial x_i} = 0. \quad \{4.1\}$$

En promedio Reynolds,

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho} \bar{u}_i + \overline{\rho' u_i'})}{\partial x_i} = 0, \quad \{4.2\}$$

lo que requiere un modelo para la correlación $\overline{\rho' u_i'}$. En promedio Favre la ecuación es más simple:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho} \tilde{u}_i)}{\partial x_i} = 0. \quad \{4.3\}$$

En otros sistemas de coordenadas:

- Cartesianas ortogonales x, y, z:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho} \tilde{u})}{\partial x} + \frac{\partial(\bar{\rho} \tilde{v})}{\partial y} + \frac{\partial(\bar{\rho} \tilde{w})}{\partial z} = 0. \quad \{4.4\}$$

- Cilíndricas r, φ , z:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial(r \bar{\rho} \tilde{u})}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial(\bar{\rho} \tilde{v})}{\partial \varphi} + \frac{\partial(\bar{\rho} \tilde{w})}{\partial z} = 0.$$

{4.5}

4.2 La ecuación general de conservación de un escalar

Para un escalar general ϕ la ecuación de transporte es:

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j \phi)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D_{l,\phi} \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right) + S^\phi, \quad \{4.6\}$$

donde $\rho D_{l,\phi} = \frac{\mu_t}{Sc_\phi} \cong \frac{\mu_t}{Pr_\phi}$ si $Le \cong 1$, y S^ϕ es el término de fuente o de creación/destrucción de ϕ .

Tomando promedio Reynolds:

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{\phi})}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho} u_j \phi)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\overline{\rho D_{l,\phi} \frac{\partial \phi}{\partial x_j}} \right) + \bar{S}^\phi, \quad \{4.7\}$$

Expandiendo el término convectivo:

$$\frac{\partial(\bar{\rho} u_j \phi)}{\partial x_j} = \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_j\tilde{\phi} + \bar{\rho}u''_j\phi'')}{\partial x_j}. \quad \{4.8\}$$

Adoptamos la ley de difusión por el gradiente o ley de Fick:

$$\bar{\rho}u''_j\phi'' = \bar{\rho}u''_j\phi' = -\bar{\rho}D_{t,\phi} \frac{\partial\tilde{\phi}}{\partial x_j} = -\frac{\mu_t}{Sc_\phi} \frac{\partial\tilde{\phi}}{\partial x_j}, \quad \{4.9\}$$

con la viscosidad turbulenta μ_t y el número de Schmidt que corresponde a ϕ .

Luego,

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{\phi})}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_j\tilde{\phi})}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\overline{\rho D_{l,\phi} \frac{\partial \phi}{\partial x_j}} + \frac{\mu_t}{Sc_\phi} \frac{\partial\tilde{\phi}}{\partial x_j} \right) + \bar{S}^\phi, \quad \{4.10\}$$

Si despreciamos la variación del coeficiente de difusión $D_{l,\phi}$ con la turbulencia queda:

$$\frac{\mu_t}{Sc_\phi} \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial x_j} + \frac{\mu_t}{Sc_\phi} \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial x_j}. \quad \{4.11\}$$

Considerando que $\mu_t \square \mu_l$, despreciamos la diferencia entre las medias Reynolds y Favre de ϕ y escribimos:

$$\frac{\mu_l}{Sc_\phi} \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial x_j} + \frac{\mu_t}{Sc_\phi} \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial x_j} = \bar{\rho} D_\phi \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial x_j}, \quad \{4.12\}$$

$$\bar{\rho} D_\phi = \frac{\mu_l + \mu_t}{Sc_\phi}. \quad \{4.13\}$$

Ocasionalmente algunos autores hacen diferencia entre el número de Schmidt para el componente laminar y el turbulento, definiendo

$$\bar{\rho} D_\phi = \frac{\mu_l}{Sc_{\phi,l}} + \frac{\mu_t}{Sc_{\phi,t}}. \quad \{4.14\}$$

La ecuación de transporte promediada queda entonces:

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{\phi})}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_j\tilde{\phi})}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho} D_\phi \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial x_j} \right) + \overline{S^\phi}, \quad \{4.15\}$$

La forma Reynolds de esta ecuación es mucho más compleja ya que aparecen un número de correlaciones, como ser:

$$\overline{\rho u_j \phi} = \bar{\rho} \bar{u}_j \bar{\phi} + \bar{u}_j \overline{\rho' \phi'} + \bar{\phi} \overline{\rho' u'_j}, \quad \{4.16\}$$

que deberían ser modeladas.

Para el caso de un escalar conservado el término de fuente es cero,

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{\phi})}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_j\tilde{\phi})}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho} D_\phi \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial x_j} \right). \quad \{4.17\}$$

Al no haber término de fuente, la ecuación de transporte de una variable $\xi = a + b\phi$ (con a y b constantes) es la misma ya que la ecuación es lineal en ϕ .

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(\phi) &= \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{\phi})}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_j\tilde{\phi})}{\partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho}D_\phi \frac{\partial\tilde{\phi}}{\partial x_j} \right) \\ &= 0 \end{aligned} \quad \{4.18\}$$

Luego, las soluciones de la ecuación de $\mathcal{L}(\phi)$ y las de $\mathcal{L}(\xi)$ son también combinaciones lineales. Es decir, sólo es necesario resolver una ecuación diferencial parcial para escalares conservados, y las soluciones de los demás escalares conservados se pueden obtener algebraicamente.

La única observación es que el número de Schmidt debe ser muy similar para ambos escalares conservados.

El término de fuente $\overline{S^\phi}$ puede tener valores distintos de cero, aún para escalares conservados, en las fronteras. En los casos en que sea necesario evaluarlo, se debe tener presente que se evalúa en promedio Reynolds y no Favre.

4.3 La ecuación de conservación de la energía

Consideramos la conservación de la entalpía total de estagnación por unidad de masa h , que ya fue definida. La ecuación instantánea puede consultarse en el texto de Anderson, Tannehill y Pletcher o en el de Kuo. Despreciando el efecto de las fuerzas de masa, los efectos Dufour y Soret (difusión-temperatura) y aplicando como antes la ley de Fick resulta:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{h})}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_j\tilde{h})}{\partial x_j} &= \\ \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho}D_h \frac{\partial\tilde{h}}{\partial x_j} \right) + \frac{\partial\bar{p}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\frac{\mu_t}{\text{Pr}} \left(\frac{1}{Le} - 1 \right) h_i \overline{\frac{\partial y_i}{\partial x_j}} \right] & \end{aligned} \quad \{4.19\}$$

(Notar la suma en el último término)

Si el número de Lewis Le fuese muy distinto a la unidad debiéramos modelar el término $\overline{h_i \frac{\partial y_i}{\partial x_j}}$, lo que crea considerable dificultad, ya que

$$\overline{h_i \frac{\partial y_i}{\partial x_j}} = \overline{h_i} \frac{\partial \overline{y_i}}{\partial x_j} + \overline{h'_i \frac{\partial y'_i}{\partial x_j}}, \quad \{4.20\}$$

y no sólo debemos modelar una correlación que es básica en flujos reactivos (fluctuaciones de energía, o sea, temperatura, y composición) sino que también necesitamos conocer los promedios Reynolds de entalpía y composición.

Pero aún si Le fuera distinto de la unidad, como en flujo turbulento

$$\frac{\mu_i}{Pr} \left(\frac{1}{Le} - 1 \right) \square \Gamma_h, \quad \{4.21\}$$

se desprecia este término.

El término $\frac{\partial \overline{p}}{\partial t} = 0$ puede ser muy importante para flujos como en motores de combustión interna; para flujos isobáricos, como en la mayoría de los reactores químicos, es cero, con lo que queda $\mathcal{L}(\tilde{h}) = 0$, lo que reafirma que la entalpía total de estagnación es un escalar conservado.

Sin embargo, si la transmisión de calor por radiación o por conducción no fueran despreciables se deben introducir términos de fuente apropiados. Igualmente se deben introducir términos de fuente en las fronteras si hay intercambio de energía.

Algunos autores prefieren plantear la ecuación de conservación de la energía en función de la temperatura. Para ello escriben $h = c_p T$ y reemplazan en la ecuación de h . En este caso es necesario generar una tabla de calor específico *de la mezcla* en función de la temperatura para ajustar el valor de c_p según vaya variando la solución de T . Este es un procedimiento engorroso y se prefiere la solución del párrafo (2.2) para obtener temperatura y calor específico de y_i y h .

4.4 La ecuación de transporte de la fracción de mezcla

Siendo la fracción de mezcla un escalar conservado su ecuación de transporte es

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{f})}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_j\tilde{f})}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho}D_f \frac{\partial\tilde{f}}{\partial x_j} \right). \quad \{4.22\}$$

Normalmente no existen en esta ecuación los términos de fuente, pero pueden existir en ciertos casos de flujos bifásicos. Por ejemplo, si se considera la cantidad de masa evaporada de una gota de líquido dentro de un volumen de referencia. Suponiendo que el líquido es el reactivo al cual corresponde $f = I$. Si la masa evaporada es m y la masa original en el volumen era M , el incremento de f resulta:

$$\Delta f = \frac{1-f}{1+m/M} \frac{m}{M} = \frac{1-f}{M/m+1} > 0, \quad \{4.23\}$$

que sería el término de fuente.

Si en cambio en el volumen de referencia se inyecta el otro reactivo en cantidad m por unidad de tiempo, la disminución de f es

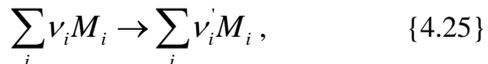
$$\Delta f = \frac{f}{M/m+1} > 0, \quad \{4.23\}$$

4.5 La ecuación de transporte de las especies químicas

Para la especie química i escribimos la ecuación instantánea

$$\frac{\partial(\rho\Gamma_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j \Gamma_i)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D_{l,\phi} \frac{\partial\Gamma_i}{\partial x_j} \right) + w_i, \quad \{4.24\}$$

donde w_i es la velocidad de creación/destrucción de la especie en $\text{kmol/m}^3/\text{s}$, es decir, en las unidades de la velocidad de reacción:



$$w = k(T) \prod_i [M_i]^{v_i}, \quad \{4.26\}$$

$$w_i = (v_i' - v_i) w. \quad \{4.27\}$$

Para obtener la ecuación de las fracciones de masa reemplazamos $y_i = \Gamma_i W_i$ y obtenemos

$$\frac{\partial(\rho y_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j y_i)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D_{l,\phi} \frac{\partial y_i}{\partial x_j} \right) + W_i w_i, \quad \{4.28\}$$

Tomando promedio Reynolds y con las mismas operaciones que para las anteriores ecuaciones de transporte llegamos a:

$$\frac{\partial(\bar{\rho} \tilde{y}_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{y}_i)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho} D_i \frac{\partial \tilde{y}_i}{\partial x_j} \right) + W_i \bar{w}_i. \quad \{4.29\}$$

Notamos que el término de fuente queda en promedio Reynolds. Esto crea una seria dificultad ya que

$$\bar{w}_i = (v_i' - v_i) \bar{w} = k(T) \prod_i [M_i]^{v_i}, \quad \{4.30\}$$

y aparecerían un elevado número de correlaciones debido a las fluctuaciones de temperatura y concentración, a más de la complicación de promediar potencias de las concentraciones. Por otro lado tampoco se dispone de los promedios Reynolds de las concentraciones, pero esto no es una dificultad ya que

$$[i] = \frac{\rho y_i}{W_i} \rightarrow \overline{[i]} = \frac{\bar{\rho} \tilde{y}_i}{W_i}. \quad \{4.31\}$$

Simplemente a fin de poder continuar se desprecian las fluctuaciones y correlaciones y se adopta

$$\bar{w}_i = k(\tilde{T}) \prod_i \overline{[i]}^{v_i} = k(\tilde{T}) \bar{\rho}^{\sum_i v_i} \frac{\prod_i \tilde{y}_i^{v_i}}{\prod_i W_i^{v_i}}, \quad \{4.32\}$$

4.6 La ecuación de transporte del avance de reacción

Para las situaciones de reacción premezclada es conveniente trabajar con el avance de reacción definido por

$$\Theta = \frac{T - T_m}{T_p - T_m} = \frac{c_p (T - T_m)}{Q y_{AA}}, \quad \{4.33\}$$

donde T_p es la temperatura de los productos, Q es el calor de la reacción por kilogramo de la especie A, y las demás variables ya han sido definidas.

Una ecuación de transporte no es estrictamente necesaria ya que si definimos la fracción de masa reducida del reactivo A como

$$y_{Ar} = \frac{y_A}{y_{AA}}, \quad \{4.34\}$$

es inmediato que, para el caso adiabático,

$$\Theta + y_{Ar} = 1, \quad \{4.35\}$$

por lo que sabiendo la fracción de masa se obtiene el avance de reacción. No obstante, para el caso general, se puede plantear la ecuación de transporte como:

$$\frac{\partial(\bar{\rho} \tilde{\Theta})}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{\Theta})}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho} D_\Theta \frac{\partial \tilde{\Theta}}{\partial x_j} \right) + \bar{w}_\Theta. \quad \{4.36\}$$

La aplicación del avance de reacción para sistemas premezclados en química rápida y lenta se verá más adelante.

4.7 Resumen de las ecuaciones de transporte

Las ecuaciones de transporte, incluyendo la de conservación de la masa, pueden escribirse en forma general como

$$\frac{\partial(\bar{\rho} \tilde{\phi})}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{\phi})}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho} D_\phi \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial x_j} \right) + \bar{S}^\phi, \quad \{4.37\}$$

donde la variable ϕ , el término de fuente y el número de Schmidt son:

Ecuación	ϕ	$\overline{S^\phi}$	Sc
Masa	1	0	-
Navier-Stokes	u_i	$\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\overline{\rho} D_u \left(\frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \right) \right)$	1
Energía	h	0	0.7
Mezcla	f	0	0.7
Especies	y_i	$W_i \overline{w}_i$	ver
Avance	Θ	\overline{w}_Θ	ver

Para las especies químicas en estado gaseoso el número de Prandtl vale aproximadamente 0.75; el número de Lewis, sin embargo, varía considerablemente, y por consiguiente también varía el número de Schmidt, $Sc=Le$ Pr. Algunos valores recomendados son:

Especie	Le
CH ₄	0.97
O ₂	1.11
H ₂ O	0.83
CO ₂	1.39
H	0.18
O	0.70
OH	0.73

HO_2	1.10
H_2	0.3
CO	1.10
H_2O_2	1.12
HCO	1.27
CH_2O	1.28
CH_3	1.0
CH_3O	1.3
N_2	1.0

4.8 Relaciones algebraicas

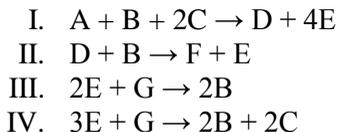
De las i especies presentes en el sistema de reacciones químicas un número s puede obtenerse por medio de relaciones algebraicas utilizando escalares conservados, mientras que las $(i-s)$ restantes deberán obtenerse de ecuaciones de transporte.

Es importante entonces determinar cuántos escalares conservados podrán generarse a fin de reducir el número de ecuaciones diferenciales a resolver.

En principio hay por lo menos tantos escalares conservados como especies atómicas en las corrientes de entrada, ya que los números de átomos se conservan. Sin embargo, puede haber más escalares conservados, y la definición del escalar conservado más ventajosa no es necesariamente la obvia del número de átomos.

El procedimiento que sigue es sólo un ejemplo; no se conoce una teoría general del tema.

Consideremos un sistema de reacciones I-IV con siete especies químicas A-G:



La velocidades de creación/destrucción son:

- $w_A = -w_I$
- $w_B = -w_I - w_{II} + 2w_{III} + 2w_{IV}$
- $w_C = -2w_I + 2w_{IV}$
- $w_D = w_I - w_{II}$
- $w_E = 4w_I + w_{II} - 2w_{III} - 3w_{IV}$
- $w_F = w_{II}$
- $w_G = -w_{II} - w_{IV}$

Ordenamos los segundos miembros como una matriz de 4x7:

+	w_{II}	w_{III}	w_{IV}	
-1	0	0	0	a
-1	-1	2	2	b
-2	0	0	2	c
1	-1	0	0	d
4	1	-2	-3	e
0	1	0	0	f
0	0	1	1	g

El rango de esta matriz es 4, lo que indica que 4 especies son independientes (y deben ser halladas resolviendo ecuaciones de transporte) y 3 son combinaciones lineales de las otras, y pueden ser halladas utilizando escalares conservados.

Para hallar las ecuaciones independientes debemos encontrar los grupos de 4 ecuaciones con determinante cero. Hay

$\frac{7!}{(7-4)!4!} = 35$ grupos posibles de 4 ecuaciones, y de ellos 8 tienen determinante cero. Las ocho combinaciones son:

a, b, d, g	especies	A, B, D, G
a, b, f, g		A, B, F, G
a, d, f, g		A, D, F, G
a, b, c, e		A, B, C, E
a, d, e, f		A, D, E, F
a, b, d, f		A, B, D, F
a, c, d, f		A, C, D, F
a, d, f, g		B, D, F, G

Se han anotado las especies involucradas pero esto no implica que todas aparezcan en el escalar. Por ejemplo, las notas (*) y (**) indican que las especies E y C no aparecen en el resultado. Esto implica que, al menos, uno de los dos (E o C) deberá computarse por medio de una ecuación de transporte, ya que habrá un solo escalar (el cuarto) que los involucra a ambos.

Para generar los escalares tomamos cualquier menor (determinante) que dé cero y buscamos la combinación lineal que tiene segundo término nulo. Por ejemplo, tomando (a), (b), (c) y (e):

1		a)
1	1	b)
2		c)

2 3 e)

Es inmediato que $4(a) + 2(e) + 2(b) + (c) = 0$

Luego, una especie tal que su abundancia específica sea $4\Gamma_A + 2\Gamma_B + \Gamma_C + 2\Gamma_E$ tendrá $w=0$, o sea, será un escalar conservado:

$$\beta = C(4\Gamma_A + 2\Gamma_B + \Gamma_C + 2\Gamma_E). \quad \{4.38\}$$

De este modo podemos generar escalares conservados para las 8 combinaciones cuyos menores son nulos.

De los 8 escalares conservados debemos elegir 3 para calcular tres especies, y las 4 restantes se calcularán por ecuaciones de transporte. La selección de cuál especie obtener de escalares conservados y cuál por ecuaciones de transporte depende de la especie. En general se prefiere obtener de ecuaciones de transporte aquellas especies que estén en concentraciones muy bajas, para evitar calcularlas por diferencia entre concentraciones de especies principales, lo que incrementaría el error numérico.

Para utilizar un escalar en el cómputo de una especie nos basamos en la fracción de mezcla:

$$f = \frac{\beta - \beta_2}{\beta_1 - \beta_2}, \quad \{4.39\}$$

y luego, por ejemplo,

$$\beta = f(\beta_1 - \beta_2) + \beta_2 = 4\Gamma_A + 2\Gamma_B + \Gamma_C + 2\Gamma_E, \quad \{4.40\}$$

con lo que, conociendo f y los valores del escalar β en las corrientes de entrada 1 y 2 podemos calcular una de las especies A, B, C o E a partir de las otras tres.

4.9 Cierre del modelo

Las ecuaciones de transporte de las medias Favre proporcionan las soluciones requeridas para computar los parámetros principales, a saber, u_i , \bar{p} , $\bar{\rho}$, \tilde{T} , \tilde{h} , \tilde{y}_i .

Restan algunas dificultades aún no resueltas para cerrar el modelo. Por ejemplo, la computación de la masa molecular de la mezcla de

$$\frac{1}{W} = \sum_i \frac{y_i}{W_i}, \quad \{4.41\}$$

o bien

$$W = \sum_i W_i x_i. \quad \{4.42\}$$

Suponiendo disponibles \tilde{y}_i o \tilde{x}_i podemos calcular

$$\tilde{W} = \sum_i W_i \tilde{x}_i, \quad \{4.43\}$$

o bien

$$\left(\frac{1}{W} \right) = \sum_i \frac{\tilde{y}_i}{W_i}. \quad \{4.44\}$$

Ninguna de estas dos expresiones nos es útil para la ecuación de estado,

$$p = \rho \frac{\mathfrak{R}}{W} T, \quad \{4.45\}$$

$$\bar{p} = \bar{\rho} \mathfrak{R} \left(\frac{T}{W} \right). \quad \{4.46\}$$

Una forma usual de resolver este problema es escribir

$$p\bar{W} = \rho \mathfrak{R} T, \quad \{4.47\}$$

$$\overline{p\bar{W}} = \bar{\rho} \mathfrak{R} \tilde{T}, \quad \{4.48\}$$

y luego hacer $\overline{p\bar{W}} \cong \bar{p}\bar{W}$, ya que la masa molecular no es una función muy fuerte de la presión. Necesitamos ahora modelar \bar{W} , y hacemos

$$\sum_i \frac{\tilde{y}_i}{\tilde{W}_i} = \left(\frac{1}{\tilde{W}} \right) = \left(\frac{1}{\bar{W} + W'} \right) \cong \frac{1}{\bar{W}} \left(1 - \frac{W'}{\bar{W}} \right) \cong \frac{1}{\bar{W}}, \quad \{4.49\}$$

con lo que la ecuación de estado queda

$$\bar{p} = \bar{\rho} \frac{\Re}{\bar{W}} \tilde{T}, \quad \{4.50\}$$

$$\frac{1}{\bar{W}} = \sum_i \frac{\tilde{y}_i}{\tilde{W}_i}. \quad \{4.51\}$$

Otra dificultad se presenta al calcular T a partir de la entalpía ya que

$$h = \sum_i h_i y_i, \quad \{4.52\}$$

$$h_i = h_{0i} + \sum_j a_{ji} T^j, \quad \{4.53\}$$

por lo que

$$h = \sum_i h_{0i} y_i + \sum_i \sum_j a_{ij} y_i T^j, \quad \{4.54\}$$

$$\tilde{h} = \sum_i h_{0i} \tilde{y}_i + \sum_i \sum_j a_{ij} (y_i T^j). \quad \{4.55\}$$

Es sabido que descartar las correlaciones que aparecen entre la composición y la temperatura causa errores no despreciables, del orden del 10% en T . Sin embargo, y a falta de mejores modelos, se adopta

$$\tilde{h} = \sum_i h_{0i} \tilde{y}_i + \sum_i \sum_j a_{ij} \tilde{y}_i \tilde{T}^j. \quad \{4.56\}$$

Con respecto a la presión, en la mayoría de los casos se la puede considerar constante, por lo que sólo es necesario efectuar correcciones originadas en las fuerzas de masa, por el escurrimiento o por efectos térmicos. Más adelante se trata la ecuación de corrección de la presión.

Finalmente resta el problema de modelar el coeficiente de difusión turbulenta μ_t con lo que el sistema de ecuaciones diferenciales y algebraicas quedaría completo o “cerrado”.

Referencias al Capítulo 4

- Favre, A.; *Equations des gaz turbulents compressibles*, J. Mecanique 4 :361
- Kuo, K. K. ; Principles of Combustion, Wiley, 1986.
- Anderson, D. A., Tannehill, J. C., and Pletcher, R. H.; Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer, Hemisphere, 1984

CAPÍTULO 5:

Modelos de turbulencia

5.1 Modelo de transporte de tensiones de Reynolds

El modelo elegido al desarrollar las ecuaciones de transporte fue de modelar las correlaciones según el principio de difusión con el gradiente, o ley de Fick:

$$-\bar{\rho} u_j \phi = \bar{\rho} \Gamma_{i\phi} \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial x_j}; \Gamma_{i\phi} = \frac{\mu_i}{\bar{\rho} Sc_{i\phi}}, \quad \{5.1\}$$

modificado para la ecuación de Navier-Stokes por la traza $u_i u_i$ como

$$-\bar{\rho} u_i u_j = \bar{\rho} \Gamma_w \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \bar{\rho} \hat{\kappa}; Sc_w = 1, \quad \{5.2\}$$

Generalmente se retiene el modelo de Fick para las ecuaciones de transporte de los escalares como la entalpía o las fracciones de masa, pero el modelado de la correlación de velocidades puede hacerse de diversas formas.

Una técnica consiste en obtener ecuaciones de transporte para las correlaciones $u_i u_j$ a partir de manipulaciones de las ecuaciones de Navier-Stokes y de continuidad. La forma general de las ecuaciones así obtenidas es la ya vista, con términos de fuente que contienen correlaciones dobles y triples entre densidad y velocidad. Este es el método de transporte de las tensiones de Reynolds, la que las correlaciones $-\bar{\rho} u_i u_j$ son las tensiones de Reynolds.

Los términos de fuente pueden modelarse por repetida aplicación de la ley de Fick, o bien utilizando formas algebraicas

para representar las correlaciones (modelo algebraico). Hay un número de variantes de la ecuación básica

$$\mathcal{L}(u_i u_j) = \overline{S_{ij}''}. \quad \{5.3\}$$

que difieren en la forma del término de fuente S .

Estos métodos de ecuaciones de transporte de las tensiones de Reynolds proporcionan los términos $\bar{\rho} u_i u_j$ a reemplazar en la ecuación de Navier-Stokes promediada y, por otra parte, permiten obtener μ_t mediante la ley de Fick para ser utilizada en las otras ecuaciones de transporte.

Si bien estos métodos son muy difundidos y dan muy buenos resultados en ciertos casos de flujo, dan como resultado sistemas de ecuaciones lineales muy rígidos, difíciles de resolver por métodos numéricos (pobre convergencia). Conceptualmente, además, no es clara la ventaja de modelar la ecuación de transporte de una correlación doble que contiene una correlación triple. Si se intentara modelar las correlaciones triples se encontrarían correlaciones cuádruples $\rho u_i u_j u_k$, y así siguiendo. Esta es la raíz del problema de cierre de la turbulencia.

5.2 Modelos de cero y una ecuación

Dado lo anterior es más usual adoptar modelos de turbulencia basados en escalas de turbulencia y sus respectivas ecuaciones de modelado. Hay modelos de cero ecuaciones (donde μ_t se modela con una expresión algebraica empírica o basada en experimento), de una ecuación y el más popular, el de dos ecuaciones.

En el modelo de una ecuación se resuelve una ecuación de transporte para la energía cinética de la turbulencia κ (que se verá en lo que sigue) y luego se computa

$$\mu_t = C'_\mu \bar{\rho} \sqrt{\kappa} L, \quad \{5.4\}$$

con L una escala predeterminada y C'_μ una constante.

5.3 El modelo de dos ecuaciones

En este modelo se generan dos ecuaciones de transporte para dos escalares, κ y ε o bien κ y Ω , donde

$$\kappa: \text{energía cinética de la turbulencia: } \frac{1}{2} u''_i u''_i, \quad \{5.5\}$$

$$\varepsilon: \text{disipación de } \kappa: \frac{\mu_l}{\rho} \frac{1}{2} \left(S''_{ij} \frac{\partial u_i''}{\partial x_j} + S''_{ji} \frac{\partial u_j''}{\partial x_i} \right), \quad \{5.6\}$$

$$\Omega: \text{vorticidad (un vector)}, \quad \{5.7\}$$

$$\Omega_j = \frac{\partial u_i}{\partial x_k} \zeta_{ijk} : \text{componente de } \Omega \text{ en la dirección } j, \quad \{5.8\}$$

donde el tensor ζ_{ijk} tiene los valores

$$\zeta_{123} = \zeta_{312} = \zeta_{231} = 1, \quad \{5.9\}$$

$$\zeta_{321} = \zeta_{213} = \zeta_{132} = -1, \quad \{5.10\}$$

y los demás $\zeta_{ijk} = 0$.

En coordenadas cartesianas ortogonales,

$$\Omega_x = \frac{\partial u}{\partial y} - \frac{\partial v}{\partial x}, \quad \{5.11\}$$

$$\Omega_y = \frac{\partial v}{\partial x} - \frac{\partial w}{\partial y}, \quad \{5.12\}$$

$$\Omega_z = \frac{\partial w}{\partial x} - \frac{\partial u}{\partial z}. \quad \{5.13\}$$

Las ecuaciones de transporte se generan por manipulación de las ecuaciones de Navier-Stokes y la de continuidad, tomando la forma conocida y difiriendo en el término de fuente.

Para la ecuación de κ se obtiene el término de fuente exacto

$$\overline{S^\kappa} = \overline{G} - \overline{\rho \tilde{\varepsilon}} - \overline{u_i''} \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_i} - \overline{u_j''} \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_j}, \quad \{5.14\}$$

donde

$$\tilde{G} = \mu_i \tilde{S}_{ij} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} - \frac{2}{3} \bar{\rho} \tilde{\kappa} \tilde{\theta}. \quad \{5.15\}$$

El término G, llamado de generación o de producción de κ toma diversas formas en los distintos sistemas de coordenadas, como se muestra (sólo se indica la expresión $S_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j}$):

- Coordenadas cartesianas ortogonales

$$\begin{aligned} S_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = & 2 \left[\left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial w}{\partial z} \right)^2 \right] + \\ & \left[\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right]^2 + \left[\frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z} \right]^2 + \left[\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right]^2 - \\ & \frac{2}{3} \left[\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right]^2, \quad \{5.16\} \end{aligned}$$

- Coordenadas cilíndricas r, φ, z

$$\begin{aligned} S_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = & 2 \left[\left(\frac{\partial u}{\partial r} \right)^2 + \left(\frac{1}{r} \frac{\partial v}{\partial \varphi} + \frac{v}{r} \right)^2 + \left(\frac{\partial w}{\partial z} \right)^2 \right] + \\ & \left[r \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{v}{r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial u}{\partial \varphi} \right]^2 + \\ & \left[\frac{1}{r} \frac{\partial w}{\partial \varphi} + \frac{\partial v}{\partial z} \right]^2 + \left[\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial r} \right]^2 - \\ & \frac{2}{3} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (ru) + \frac{1}{r} \frac{\partial v}{\partial \varphi} + \frac{\partial w}{\partial z} \right]^2, \quad \{5.17\} \end{aligned}$$

La ecuación de transporte de ε también puede obtenerse a partir de las ecuaciones de Navier-Stokes, pero resulta en un término de fuente que contiene numerosos términos, incluyendo

correlaciones dobles y triples que no se han modelado hasta el momento. En su lugar se adopta el término de fuente

$$\overline{S^\varepsilon} = \left[C_1 \left(\tilde{G} - \overline{u_i}'' \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_i} \right) - C_2 \overline{\rho} \tilde{\varepsilon} \right] \frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{\kappa}}, \quad \{5.18\}$$

con $C_1 = 1.44$, $C_2 = 1.92$.

En lo que respecta a la ecuación de transporte de la vorticidad, la ecuación instantánea para la componente i se obtiene por manipulación de la ecuación de Navier-Stokes como

$$\frac{\partial \rho \Omega_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j \Omega_i}{\partial x_j} = \rho \left(\Omega_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \Omega_i \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \varepsilon_{ilm} \left[\frac{\partial^2 S_{lj}}{\partial x_m \partial x_j} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial x_m} \left(\frac{\partial p}{\partial x_i} - \frac{\partial S_{lj}}{\partial x_j} \right) \right] \quad \{5.19\}$$

Esta ecuación debe ser primeramente promediada en promedio Favre.

El término de fuente que así resulta contiene varios términos que requieren modelado, especialmente cerca de paredes sólidas, más complejos que los de la ecuación de ε , lo que hace que esta ecuación no sea muy utilizada.

Suponiendo que las ecuaciones de transporte de las Ω_i han sido resueltas se puede formar el módulo de la vorticidad:

$$|\Omega| = \Omega_i \Omega_i = \left[\left(\frac{\partial u}{\partial y} - \frac{\partial v}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial z} - \frac{\partial w}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial w}{\partial x} - \frac{\partial u}{\partial z} \right)^2 \right]^{1/2}. \quad \{5.20\}$$

Obtenidos los valores de κ - ε o de κ - Ω se puede formular una expresión para la viscosidad turbulenta μ_t .

La base de la formulación es la hipótesis de longitud de mezcla de Prandtl:

$$v = l_m \left| \frac{\partial u}{\partial y} \right|. \quad \{5.21\}$$

En una capa límite, u otra situación cuasi-bidimensional, l_m es la distancia en la dirección y a la cual la turbulencia transporta un cambio de velocidad ∂u , que aparece como una velocidad turbulenta v_t .

El próximo paso es asumir que el número de Reynolds turbulento

$$\text{Re}_t = \frac{v l_m}{\nu_t} \quad \{5.22\}$$

es constante, con lo que

$$v_t \propto \nu l_m = l_m^2 \left| \frac{\partial u}{\partial y} \right|. \quad \{5.23\}$$

En el modelo κ - Ω se adopta

$$v \cong l |\Omega|, \text{ y} \quad \{5.24\}$$

$$l \cong \frac{\sqrt{\kappa}}{|\Omega|}, \quad \{5.25\}$$

con lo que resulta

$$\mu_t = \rho v_t \propto l \frac{\kappa}{|\Omega|}. \quad \{5.26\}$$

Este modelo no es muy utilizado debido a las dificultades mencionadas.

En el modelo κ - ε se adopta la escala de tiempo

$$\tau = \frac{\kappa}{\varepsilon}, \quad \{5.27\}$$

que es el tiempo en que se disipa un torbellino. La escala de longitud es

$$L \propto v \tau = v \frac{\kappa}{\varepsilon}, \quad \{5.28\}$$

y se adopta $v = \sqrt{\kappa}$, con lo que, introduciendo una constante C_D

$$L = C_D \frac{\kappa^{3/2}}{\varepsilon}. \quad \{5.29\}$$

De aquí resulta

$$\boxed{\mu_t = C_\mu \rho \frac{\kappa^2}{\varepsilon}} \quad \{5.30\}$$

La relación entre C_D y C_μ la hallamos asumiendo turbulencia estable en el tiempo y despreciando la influencia de la convección y difusión en la ecuación de ε , con lo que la producción iguala la destrucción, o bien

$$\text{Producción: } \nu_t \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right) \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right) \quad \{5.31\}$$

$$\text{Destrucción: } \varepsilon = C_D \frac{\kappa^{3/2}}{L} \quad \{5.32\}$$

de donde

$$\nu_t \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)^2 = C_D \frac{\kappa^{3/2}}{L} \quad \{5.33\}$$

Además podemos escribir

$$\nu_t = C_\mu \frac{\kappa^2}{\varepsilon} = C'_\mu \sqrt{\kappa} L, \quad \{5.34\}$$

Manipulando estas relaciones obtenemos

$$l_m = \left(\frac{C_\mu^3}{C_D} \right)^{1/4} L, \quad \{5.35\}$$

$$C_\mu = C'_\mu C_D, \quad \{5.36\}$$

$$C_D = C_\mu^{3/4}, \quad \{5.37\}$$

$$C'_\mu = C_\mu^{1/4} = C_D^{1/3}, \quad \{5.38\}$$

$$L = (C_\mu)^{3/4} \frac{\kappa^{3/2}}{\varepsilon}, \quad \{5.39\}$$

$$\mu_t = (C_\mu)^{1/4} \rho \sqrt{\kappa} L. \quad \{5.40\}$$

Un valor usual es $C_\mu = 0.09$ con lo que queda completo el modelo de turbulencia de dos ecuaciones.

5.4 Mejoras al modelo κ - ε

El modelo κ - ε es el más utilizado porque es relativamente sencillo de implementar (sólo dos ecuaciones de transporte) y no da peores resultados que otros modelos más complejos (por ejemplo, transporte de tensiones de Reynolds). Sin embargo, el modelo κ - ε tiene serias deficiencias entre las que se cuentan

- Rigidez
- Insensibilidad a la curvatura de la corriente
- Insensibilidad a las grandes estructuras

La rigidez, o dificultad en alcanzar la convergencia, proviene de la forma ad-hoc del término de fuente de ε , ya que si omitimos C_1 y C_2 , que son de orden unitario, resulta

$$S^\kappa = G - \rho\varepsilon \equiv \Delta\kappa/\Delta t, \quad \{5.41\}$$

$$S^\varepsilon = (G - \rho\varepsilon) \frac{\varepsilon}{\kappa} \equiv \Delta\varepsilon/\Delta t, \quad \{5.42\}$$

de donde

$$\frac{\Delta\varepsilon}{\varepsilon} \cong \frac{\Delta\kappa}{\kappa} \rightarrow \kappa \propto \varepsilon. \quad \{5.43\}$$

Luego, las soluciones de las ecuaciones de κ y ε son casi proporcionales, y la intersección (solución) no está fuertemente definida; en un plano x-y serían curvas casi paralelas. La solución existe porque las constantes son distintas.

Una manera de mejorar esto consiste en la aplicación de la Teoría de Grupos de Renormalización de Yakhot y Ország. La teoría es demasiado compleja para resumirla aquí; al aplicarla al modelo κ - ε resulta en una modificación al coeficiente C_1 tal que

$$C_1 = 1.42 - \frac{\eta \left(1 - \frac{\eta}{\eta_0}\right)}{1 + \beta\eta^3}, \quad \{5.44\}$$

donde

$$\eta = S \frac{\kappa}{\varepsilon}; S = \left(2S_{ij}S_{ij}\right)^{1/2}, \quad \{5.45\}$$

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right), \quad \{5.46\}$$

y las constantes valen $\beta = 0.012$ y $\eta_0 = 4.38$.

El parámetro η es esencialmente un cociente de escalas de tiempo de la turbulencia (κ/ε) y del flujo medio (S). Cuando $\eta \rightarrow 0$ o bien $\eta \rightarrow \infty$, $C_I \rightarrow 1.42$. Igualmente, $C_I = 1.42$ cuando $\eta = \eta_0$.

Para valores de η algo inferiores o algo superiores a η_0 la fórmula reduce o incrementa C_I aproximadamente en un 50%. Vale decir, si la escala de tiempo de la turbulencia (la “vida” de un torbellino) es baja, se reduce la creación de ε , y si aumenta por encima de η_0 se aumenta la creación de ε .

Se han reportado resultados algo contradictorios respecto al uso del método RNG. Si bien no se cuestiona la base teórica, algunos investigadores reportan excelentes resultados en flujos separados (codos, escalones) mientras que otros no hallan diferencia.

Respecto a la performance con fuertes curvaturas, el modelo $\kappa-\varepsilon$ es notoriamente insensible a la curvatura de la línea de corriente, lo que hace que dé pobres resultados en flujos con fuerte recirculación.

Una posible mejora consistiría en la computación de los términos $-\overline{u''}_i \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i}$ que, transformación de coordenadas mediante,

pueden interpretarse como correcciones al término de generación G en base a gradientes de presión radial y tangencial (principalmente los primeros) en una zona de recirculación, como indica la figura:

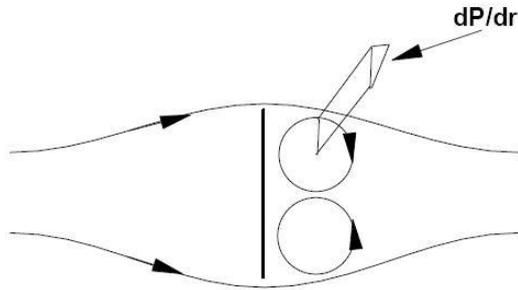


Figura 5.1: Gradientes de presión en recirculación

Para computar estos términos es necesario modelar la correlación

$$-\overline{u'''} = \overline{\rho' u''} / \bar{\rho}. \quad \{5.47\}$$

Estas correlaciones se pueden obtener de ecuaciones de transporte (tres, para u'' , v'' y w'') a partir de las ecuaciones de Navier-Stokes. Los términos de fuente son bastante complejos y requieren modelos para correlaciones triples, etc.

Esta técnica aún no ha sido probada, al menos no en forma Favre y completa (se han hecho intentos en flujos cuasi-bidimensionales).

También se han intentado numerosas modificaciones al modelo κ - ε en base a la curvatura de la línea de corriente, a números de Richardson, a fuerzas de Coriolis, etc., sin obtener una mejora ni sustancial ni general.

Con respecto al comportamiento en presencia de grandes estructuras, el modelo κ - ε implica considerar turbulencia isotrópica (ver el término en $\frac{2}{3} \kappa$), lo que descarta estructuras tridimensionales tales como vórtices y engolfamientos. Por otro lado la “viscosidad turbulenta” o “coeficiente de difusión turbulenta” μ_t , que es la

medida de la influencia de la turbulencia en la mezcla, es computada con dos valores locales, κ y ε , y es por lo tanto insensible a lo que sucede, por ejemplo, aguas arriba.

Por consiguiente el modelo no puede reproducir regímenes de turbulencia “gruesa”, en el régimen inercial o de grandes estructuras, y está limitado a modelar turbulencia “fina”, en la región de disipación viscosa del espectro de turbulencia.

Puede argumentarse que este defecto se corrige con una malla más fina a fin de computar y no modelar los movimientos “gruesos”. Este razonamiento por supuesto lleva a la computación de las ecuaciones instantáneas (Simulación Numérica Directa) cuyo costo computacional, para casos prácticos, es prohibitivo.

Una solución posible a este dilema es un mejor modelo del término de fuente de ε que incluya a la vorticidad y posiblemente una más completa definición de la ley de Fick para $u_i u_j$ que también incluya la vorticidad.

Referencias al Capítulo 5

- Yakhot, V., Orszag, S. A., Thangam, S., Gatski, T. B., and Speziale, C. G.; Development of turbulence models for shear flows by a double expansion technique, Phys. Fluids A 4(7), July 1992.

CAPÍTULO 6

Condiciones de borde e iniciales

6.1 Condiciones de borde

La solución de un problema de flujos reactivos consiste en satisfacer las ecuaciones de transporte sujetas a las condiciones de borde.

Luego, es vital especificar correctamente las condiciones de borde para asegurar la existencia de una solución al problema.

Es de hacer notar que no se ha desarrollado completamente la teoría de las condiciones de borde. En las entradas de flujo, por ejemplo, se sabe qué condiciones son necesarias pero no cuáles son suficientes. Existe el riesgo de sobre-especificar las condiciones de borde y por lo tanto impedir el alcanzar una solución.

La mejor condición de borde, al decir de Elaine Oran del Naval Research Laboratory de Washington es no tener ninguna. De ser posible los bordes deben especificarse como regiones de flujo en las que se conocen todos los parámetros del flujo y por lo tanto las ecuaciones de transporte pueden extenderse a ellas sin modificación. Esto sin embargo no es siempre posible y se verán algunas condiciones típicas.

6.2 Clases de fronteras

Las fronteras del caso de flujo pueden ser

- Entradas
- Salidas
- Paredes, permeables o impermeables
- Superficies libres
- Superficies de simetría, incluyendo ejes de simetría
- Interfases

Las fronteras de superficie libre e interfase no son aplicables a flujos en fase gaseosa, y no se tratarán en este trabajo.

Una entrada es aquella porción de frontera en la que el flujo ingresa al campo de cálculo. Esto no es tan trivial como pareciera ya que hay ocasiones en que existe recirculación en la boca de entrada y el flujo puede revertirse en parte de la entrada.

La regla básica para elegir una entrada es que las líneas de corriente sean lo más paralelas posible. Si es necesario se debe extender el campo corriente arriba, incluso por medios artificiales, para lograrlo; la figura siguiente ilustra algunos casos:

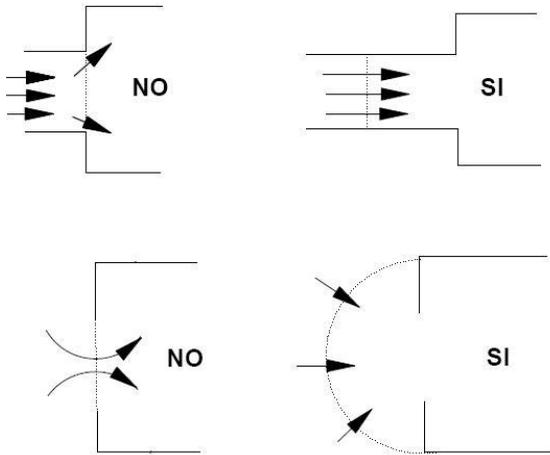


Figura 6.1: Entradas

Si no se pueden lograr líneas de corriente paralelas se pueden probar fronteras en las que se conozca otra propiedad, por ejemplo, líneas de corriente radiales, como muestra la figura.

Una salida es una porción de frontera en la que el flujo egresa del campo. Son válidas las mismas observaciones que para la entrada, dando preferencia a salidas con conductos de sección uniforme:

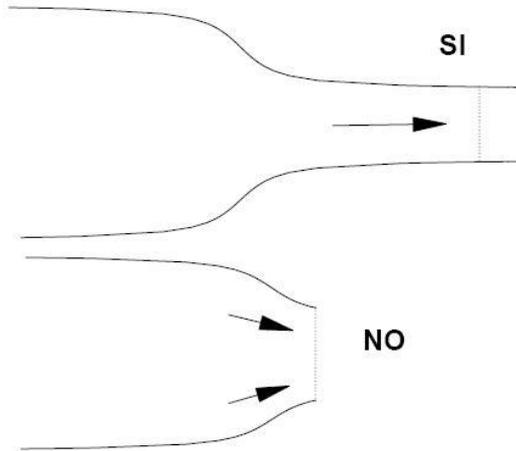


Figura 6.2: Salidas

Las paredes son aquellas fronteras que son impermeables al flujo, aunque se debe distinguir entre las que son impermeables al flujo másico y al flujo calórico. También pueden ser parcialmente permeables o porosas, para ambos tipos de flujos.

Las superficies de simetría son las que dividen al campo en dos imágenes especulares. Los ejes de simetría se presentan normalmente en geometrías axisimétricas o esféricas.

Un caso especial de frontera es aquel en que una superficie de simetría atraviesa una entrada o salida, ya que requiere revisar las condiciones en las bocas para asegurar las condiciones de simetría.

6.3 Clases de condiciones de borde

En una frontera se puede especificar

- el valor de un parámetro, o
- el gradiente del parámetro normal a la frontera, o
- el flujo del parámetro normal a la frontera.

Las primeras son llamadas condiciones tipo Dirichlet y las segundas tipo Neumann; las últimas no tienen denominación individual.

Como se verá hay casos más complejos, combinación de los de más arriba.

6.4 Entradas

En las entradas normalmente se especifica todo lo conocido, es decir, p, ρ, T, y_i, u_j, h , etc. Se debe cuidar que se cumplan las leyes y relaciones matemáticas que las involucran.

La velocidad normal a la entrada es comúnmente uniforme. Si se trata de un conducto circular se puede aplicar la ley de la potencia $1/n$, con n generalmente igual a 7.

Si el conducto tiene radio R y el caudal volumétrico Q es conocido, la velocidad nominal U_0 se obtiene de

$$Q = \pi R^2 U_0. \quad \{6.1\}$$

Para cada radio r la velocidad axial u vendrá dada por la ley de potencia

$$u = Cte. \left(1 - \frac{r}{R}\right)^{1/7}, \quad \{6.2\}$$

por lo que, integrando e igualando

$$u = \frac{120}{98} \left(1 - \frac{r}{R}\right)^{1/7} U_0. \quad \{6.3\}$$

Esta ley es válida hasta el límite de la ley universal de la pared que se verá más adelante.

La energía cinética de la turbulencia κ se supone conocida. Si no lo es se suele asumir un nivel proporcional a u (por ejemplo, 5% de u), con lo que

$$k = \frac{3}{2} (0.05u)^2. \quad \{6.4\}$$

Para establecer un valor de ε , si no es conocido, se puede adoptar un valor para la escala L (por ejemplo, 1 mm, o 1% del radio del conducto), y obtener ε de

$$\varepsilon = C_{\mu}^{3/4} \frac{\kappa^{3/2}}{L}. \quad \{6.5\}$$

Alternativamente, se puede asumir un número de Reynolds turbulento (digamos, 10000) y de

$$\text{Re} = \frac{\rho u D}{\mu_t} \quad \{6.6\}$$

obtener μ_t y luego ε de

$$\mu_t = C_{\mu} \rho \frac{\kappa^2}{\varepsilon}. \quad \{6.7\}$$

Las componentes de velocidad transversales debieran normalmente ser cero si la entrada fue bien elegida. Un caso particular es el de flujos con rotación, en que la velocidad tangencial puede estar especificada. Si no se poseen valores experimentales es común asumir rotación de cuerpo sólido, $w \propto r$, también válida hasta la ley de la pared.

6.5 Salidas

Si la salida está bien elegida las condiciones de borde para todos los parámetros son gradiente en la dirección del flujo igual a cero y flujos en la dirección normal (o sea, paralela a la cara de salida) igual a cero.

6.6 Paredes

Para paredes impermeables al flujo másico las condiciones de borde para la velocidad son $u_i = 0$ en la pared, y gradientes de

presión, temperatura y entalpía nulos en la dirección normal a la pared.

El flujo cerca de la pared obedece a la ley universal de la pared, entre ciertos límites en la dirección normal. Inmediatamente cerca de la pared el flujo puede considerarse laminar, y más allá del límite externo de la ley de la pared puede considerarse flujo libre:

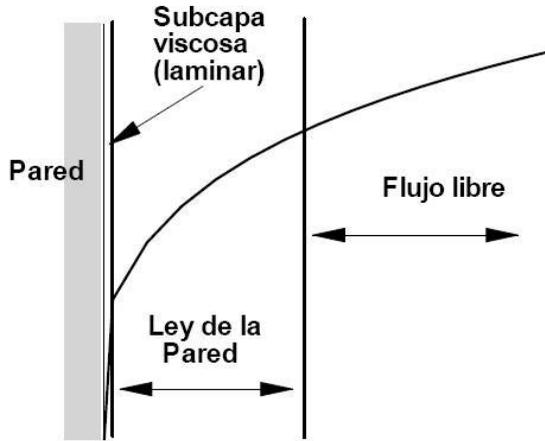


Figura 6.3: Ley de la pared

Para encontrar las condiciones de borde de κ y ε de acuerdo a la ley de la pared, definimos el número de Reynolds local y^+ como

$$y^+ = \frac{\rho y u_\tau}{\mu}, \quad \{6.8\}$$

donde

- y : distancia a la pared
- μ : viscosidad laminar
- u_τ : velocidad de fricción

La velocidad de fricción está definida como

$$u_\tau = \sqrt{\frac{\tau}{\rho}}, \quad \{6.9\}$$

donde τ es la tensión de corte en la pared.

Para valores de $y^+ \leq 11.63$ se asume una subcapa viscosa donde se cumple que $\tau = Const. y$

$$\frac{u}{u_\tau} = y^+. \quad \{6.10\}$$

En esta región la velocidad paralela a la pared varía entre cero y $11.63 u_\tau$, con τ y u_τ los correspondientes a la próxima capa.

Para aproximadamente $11.63 \leq y^+ \leq 100$ tomamos la ecuación de transporte de κ , despreciando convección y difusión y reteniendo del término de generación G la derivada normal a la pared, con lo que queda:

$$\mu_t \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 - \rho \varepsilon = 0. \quad \{6.11\}$$

Con la expresión de μ_t

$$\mu_t = C_\mu \rho K^2 / \varepsilon, \quad \{6.12\}$$

y la aproximación

$$\tau = \mu_t \frac{\partial u}{\partial y} \quad \{6.13\}$$

obtenemos

$$\tau = C_\mu^{1/2} \rho \kappa. \quad \{6.14\}$$

Luego,

$$u_\tau = (C_\mu)^{1/4} \kappa^{1/2}. \quad \{6.15\}$$

En esta región la Ley Universal de la Pared es

$$\frac{u}{u_\tau} = \frac{1}{k} \ln(y^+ E), \quad \{6.16\}$$

donde

- k : constante de von Kármán: 0.4187
- E : constante; para paredes lisas, 9.793

De esta ecuación obtenemos la derivada

$$\frac{\partial u}{\partial y} = \frac{u_\tau}{ky}. \quad \{6.17\}$$

Para hallar el valor de ε añadimos a esta la ecuación simplificada de κ (Ecuación 6.11) y la ecuación 6.12 y operamos para hallar

$$\varepsilon^2 = C_\mu \kappa^2 \left(\frac{u_\tau}{ky} \right)^2. \quad \{6.18\}$$

Reemplazamos las Ecuaciones 6.9 y 6.14 para obtener

$$\varepsilon = \frac{C_\mu^{3/4} \kappa^{3/2}}{ky}. \quad \{6.19\}$$

El procedimiento es el siguiente: las ecuaciones de transporte se satisfacen desde el interior hasta un punto alejado de la pared una distancia y^+ del orden de 100 a 200. De allí hasta la pared se adoptan dos puntos más de cálculo, uno en la pared y otro a media distancia.

La condición de borde de κ y ε se fija, no en la pared, sino en el punto de media distancia. La turbulencia κ se extrapola desde los puntos interiores, asumiendo $\kappa = 0$ en la pared, y se obtiene así κ en el punto intermedio. Con la última fórmula se obtiene ε en el punto medio. Quedan así fijados κ y ε en el punto medio y en la pared.

Los términos de fuente para las ecuaciones de transporte en el punto medio se construyen como sigue:

- Para κ : $G - \rho\varepsilon = \tau \frac{u}{y} - \rho \frac{C_\mu^{3/4} \kappa^{3/2}}{ky},$

$$\{6.20\}$$

- Para ε : $(C_1 G - C_2 \rho\varepsilon) \frac{\varepsilon}{\kappa} = \frac{10^{10} C_\mu^{3/4} \kappa^{3/2}}{ky} - 10^{10} \varepsilon.$

$$\{6.21\}$$

La razón del término de ε se verá cuando se trate la discretización de la ecuación de transporte.

Las condiciones de borde para la fracción de mezcla f y para las especies químicas y_i son que el gradiente normal a la pared sea cero.

Para la ecuación de energía hay varios tipos de condiciones de pared. Si la pared es adiabática la condición es gradiente cero.

Si se especifica la temperatura de la pared se debe computar el coeficiente de conductividad λ de la mezcla y calcular el flujo de calor

$$Q = -\lambda A \frac{\partial T}{\partial y} = -\lambda \frac{A}{\Delta y} \frac{\Delta h}{c_p}. \quad \{6.22\}$$

Alternativamente se puede utilizar el coeficiente de transmisión total $\alpha = \lambda / \Delta y$ y calcular

$$Q = -\alpha A \frac{\partial T}{\partial y} = -\alpha A \frac{\Delta h}{c_p}. \quad \{6.23\}$$

Si la distancia y desde el último punto a la pared es relativamente grande ($y^+ > 30$) se puede utilizar la ley de la pared y escribir, asumiendo que el último punto tiene las mismas condiciones que a $y^+ = 11.63$,

$$Q = -\lambda A \frac{\Delta T}{y} = -\frac{c_p \mu}{Pr} A \frac{\Delta T}{y}; \left(Pr = \frac{c_p \mu}{\lambda} \right). \quad \{6.24\}$$

Sustituyendo Ecuaciones 6.10, 6.15 y 6.16 obtenemos

$$Q = -\frac{\rho C_\mu^{1/4} \kappa^{1/2} k}{Pr \ln(y^+ E)} A \Delta h. \quad \{6.25\}$$

El flujo de calor Q [W] así obtenido es el término de fuente correcto para la ecuación de transporte de la entalpía en volúmenes finitos ya que, si consideramos el primer término

$$\frac{\partial(\bar{\rho h})}{\partial t} \cdot \text{Volumen} = \frac{1}{\text{tiempo}} \frac{\text{masa}}{\text{volumen}} \frac{\text{energía}}{\text{masa}} \text{volumen} = . \quad \{6.26\}$$

$$\frac{\text{energía}}{\text{tiempo}} = \text{Watts}$$

Las ecuaciones de Navier-Stokes no tienen término de fuente propiamente dicho salvo por $\frac{dp}{\partial x}$. Lo que sí se modifica por la ley de la pared es el término de difusión de las velocidades paralelas a la pared en la dirección normal. El término es $\frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial y} \right)$, el que reemplazamos por (en volúmenes finitos)

$$\mu \frac{1}{y} \frac{u}{y} Ay, \quad \{6.27\}$$

siendo Ay el volumen. Reemplazamos

$$\frac{u}{u_\tau} \equiv y^+ \equiv \frac{\ln(Ey^+)}{k}, \text{ y} \quad \{6.28\}$$

$$u_\tau = C^{1/4} \kappa^{1/2} \quad \{6.29\}$$

para obtener el término de fuente

$$\frac{\rho \sqrt{\kappa} k C^{1/4}}{\ln(Ey^+)} Au, \quad \{6.30\}$$

y si estamos en el régimen de la subcapa viscosa ($y^+ < 11.63$):

$$\frac{\mu_l}{y} Au. \quad \{6.31\}$$

El término de generación G de las ecuaciones de κ y ϵ se corrige añadiendo

$$\mu \left(\frac{u}{y} \right)^2 \cdot \text{volumen} = \frac{\rho \sqrt{\kappa} k C^{1/4}}{\ln(Ey^+)} Au^2. \quad \{6.32\}$$

Las paredes permeables al flujo másico son equivalentes a las paredes no adiabáticas con respecto al flujo calórico. Es necesario generar funciones de pared para todas las ecuaciones de transporte, por lo que comúnmente se las estudia como salidas con un flujo másico ajustable de acuerdo a las condiciones interiores.

Los modelos utilizables varían mucho con el tipo de pared permeable y de campo de flujo.

6.7 Condiciones iniciales

Para comenzar la resolución numérica de un problema es necesario asignar valores a cada una de las variables en cada punto de cálculo. Esto se denomina fijar las condiciones iniciales.

La elección adecuada de las condiciones iniciales es muy importante ya que una gran parte del tiempo de cómputo se emplea en aproximar los valores de las variables a un 90% de su valor final. Una mala selección de condiciones iniciales puede incluso causar el colapso del programa de cálculo.

En general se debe evitar dar el valor cero a todas las variables. En caso de ser necesario se aconseja dar un valor pequeño pero finito como ser $y_i = 10^{-20}$ para todo i , salvo que a las especies mayores se le asignarán valores empíricos tales que $\sum_i y_i = 1$.

Una buena distribución de temperaturas puede acelerar mucho la solución. Vale la pena extrapolar otros resultados o incluso asignar valores estimados de temperatura, interpolados a los puntos de cálculo.

También es aconsejable comenzar la solución con el campo de temperatura, presión y composición iniciales y hacer un pre-cálculo de variables termodinámicas tales como entalpía, calor específico, densidad, masa molecular, etc. para asignar valores iniciales.

Para las velocidades vale lo dicho para la temperatura, una buena distribución inicial, aunque sea estimada, es mucho mejor que comenzar con $u_i = 1$ o con $u_i = 10^{-20}$.

La distribución inicial de κ y ε puede hacerse asignando a todos los puntos de cálculo los valores de κ y ε de la entrada; aunque el par κ - ε forma un sistema rígido (tarda en converger), es rápido en alcanzar una distribución cercana a la convergencia y no es común que diverja.

Referencias al Capítulo 6

- Oran, E. S., and Boris, J. P.; Numerical simulation of reactive flow; Cambridge University Press, 2001

CAPÍTULO 7

Diferencias y volúmenes finitos

7.1 Discretización de las ecuaciones de transporte

Para la solución numérica de las ecuaciones diferenciales de transporte se las discretiza, es decir, se eligen un número de puntos en los que se satisface la ecuación y los valores en puntos intermedios se obtienen por interpolación.

Para la mecánica de los fluidos, particularmente los de densidad variable, el método tradicionalmente más popular es el de diferencias finitas, en su versión de volúmenes finitos. El método de elementos finitos es también popular aunque carece del desarrollo y del apoyo masivo del anterior.

Por otra parte el método de volúmenes finitos utiliza grillas cada vez más sofisticadas, incluyendo grillas no estructuradas como las de elementos finitos, y modelos de discretización más complejos, mientras que el método de elementos finitos utiliza elementos cada vez más simples, por lo que la formulación de ambos es casi idéntica en la práctica.

En el método de diferencias finitas se aproxima una derivada parcial por medio de las diferencias finitas:

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{u(x + \Delta x) - u(x)}{\Delta x}. \quad \{7.1\}$$

Para aplicar este principio se divide el campo de flujo en zonas o elementos, usualmente cuadriláteros en dos dimensiones o hexaedros en tres dimensiones, que serán los volúmenes de control. Las variables de flujo se consideran concentradas o medidas en un punto del volumen de control (usualmente el centro) o bien en las caras. Se asume que la variable posee el mismo valor en todo el volumen de control aunque en algunos casos, como se verá, se utilizan leyes de interpolación entre volúmenes de control.

En los métodos de diferencias finitas que se desarrollaron en un principio se presentaba una dificultad en que, al considerarse la variable constante dentro del volumen de control, ocasionalmente no se cumplía alguna de las ecuaciones en forma global. Por ejemplo, si se tomaba una sección transversal del conducto de flujo podía suceder que la suma de los flujos de masa ρuA no fuera igual al flujo total de masa.

Para corregir esto se desarrollaron los métodos de volúmenes finitos, en que esencialmente se integra la ecuación de transporte sobre el volumen de control, con lo que la ecuación de continuidad queda implícitamente satisfecha en forma global.

7.2 Celdas y volúmenes de control

Dado el campo de flujo es necesario elegir una división del mismo en volúmenes de control y una disposición de las caras y los centros de los volúmenes.

Hay varias maneras de generar la grilla de volúmenes de control, y se puede encontrar una discusión del tema en el libro de Patankar. En conclusión se recomienda comenzar por dividir el campo en volúmenes y asignar los puntos de cálculo a los centros geométricos de los volúmenes, y no a la inversa, distribuir los puntos de cálculo y luego construir los volúmenes, Por ejemplo, el primer método daría como resultado:

*	*	*	*
*	*	*	*
*	*	*	*
*	*	*	*

Figura 7.1: Grilla aceptable

Mientras que el segundo procedimiento podría resultar en una grilla como

*	*	*	*
*	*	*	*
*	*	*	*
*	*	*	*

Figura 7.2: Grilla no aceptable

donde los puntos de cálculo pueden estar muy cerca o muy lejos de las caras del volumen de control, requiriendo técnicas de interpolación más sofisticadas y arriesgando no cumplir con la ecuación de continuidad.

Con respecto a los bordes, es aconsejable en lo posible utilizar coordenadas ajustadas al contorno para evitar numerosas condiciones de borde y mejorar la precisión del cálculo:

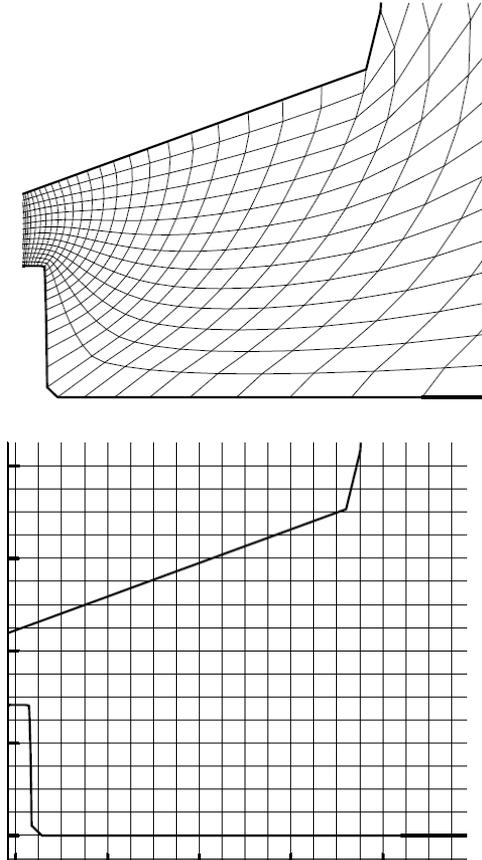


Figura 7.3: Grilla ajustada al contorno y grilla cartesiana ortogonal

7.3 Alternativas de discretización

Dado un punto P de la grilla es usual designar sus vecinos con los puntos cardinales:

NO *	N *	NE *
O *	P *	E *
SO *	S *	SE *

Figura 7.4: Nomenclatura de celdas vecinas

Para discretizar una derivada podemos hacer

$$\frac{\partial \varphi}{\partial x} \cong \frac{\varphi_E - \varphi_O}{\Delta x_{OP} + \Delta x_{PE}}, \text{ o bien} \quad \{7.2\}$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial x} \cong \frac{\varphi_P - \varphi_O}{\Delta x_{OP}}, \text{ o bien} \quad \{7.3\}$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial x} \cong \frac{\varphi_E - \varphi_P}{\Delta x_{PE}}, \text{ o bien} \quad \{7.4\}$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial x} \cong \frac{1}{2} \left(\frac{\varphi_P - \varphi_O}{\Delta x_{OP}} + \frac{\varphi_E - \varphi_P}{\Delta x_{PE}} \right). \quad \{7.5\}$$

La precisión de estas expresiones no es la misma para todas; las {7.2} y {7.5} son de orden Δx^2 mientras que las demás son de orden Δx .

Para las derivadas segundas podemos plantear, con espaciado uniforme por brevedad,

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} = \frac{\varphi_E + \varphi_O - 2\varphi_P}{\Delta x^2}, \text{ (orden } \Delta x^2, \text{ centrada), } \{7.6\}$$

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} = \frac{\varphi_P + \varphi_{EE} - 2\varphi_E}{\Delta x^2}, \text{ (orden } \Delta x, \text{ "corriente abajo"),} \{7.7\}$$

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} = \frac{\varphi_P + \varphi_{OO} - 2\varphi_O}{\Delta x^2}, \text{ (orden } \Delta x, \text{ "corriente arriba"),} \{7.8\}$$

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x \partial y} = \frac{1}{2\Delta x} \left(\frac{\varphi_{NE} - \varphi_{SE}}{2\Delta y} - \frac{\varphi_{NO} - \varphi_{SO}}{2\Delta y} \right), \{7.9\}$$

(orden $\Delta x^2, \Delta y^2$, centrada)

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x \partial y} = \frac{1}{\Delta x} \left(\frac{\varphi_E - \varphi_{SE}}{\Delta y} - \frac{\varphi_P - \varphi_S}{\Delta y} \right), \{7.10\}$$

(orden $\Delta x, \Delta y$, "corriente abajo")

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x \partial y} = \frac{1}{\Delta x} \left(\frac{\varphi_N - \varphi_P}{\Delta y} - \frac{\varphi_{NO} - \varphi_O}{\Delta y} \right), \{7.11\}$$

(orden $\Delta x, \Delta y$, "corriente arriba")

y otras formas.

Existen otras alternativas tales como hacer pasar una parábola cúbica o de segundo grado por tres o más puntos y hallar su derivada, etc.

Para hacer un planteo más general consideramos la ecuación de conducción del calor

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right). \{7.12\}$$

Consideramos ρ , c y k constantes y utilizamos subíndices para la ubicación y superíndices 0 y 1 para el paso de tiempo.

Integramos esta ecuación entre los puntos E y O y entre t y $t + \Delta t$. El primer miembro resulta

$$\rho c \int_0^E \int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial T}{\partial t} dt dx = \rho c \Delta x (T_p^1 - T_p^0), \quad \{7.13\}$$

donde $\Delta x = \Delta x_{OP} + \Delta x_{PE}$ es la distancia entre E y O.

Para el segundo miembro la integración según x puede hacerse primero, resultando en:

$$\int_t^{t+\Delta t} k \left(\frac{T_E - T_P}{\Delta x_{PE}} - \frac{T_P - T_O}{\Delta x_{OP}} \right) dt. \quad \{7.14\}$$

Para integrar respecto a t asumimos que el valor de T está comprendido entre T^0 y T^1 según una función f que varía entre cero y uno, o sea,

$$\int_t^{t+\Delta t} T dt = f T^1 + (1-f) T^0. \quad \{7.15\}$$

Luego, obtenemos

$$\begin{aligned} \rho c \Delta x (T_p^1 - T_p^0) &= \int_t^{t+\Delta t} k \left(\frac{T_E - T_P}{\Delta x_{PE}} - \frac{T_P - T_O}{\Delta x_{OP}} \right) dt \\ &= \Delta t \left\{ k \left[f \left(\frac{T_E^1 - T_P^1}{\Delta x_{PE}} - \frac{T_P^1 - T_O^1}{\Delta x_{OP}} \right) + (1-f) \left(\frac{T_E^0 - T_P^0}{\Delta x_{PE}} - \frac{T_P^0 - T_O^0}{\Delta x_{OP}} \right) \right] \right\}. \quad \{7.16\} \end{aligned}$$

Definimos

$$a_E = \frac{k}{\Delta x_{PE}}, \quad \{7.17\}$$

$$a_O = \frac{k}{\Delta x_{OP}}, \quad \{7.18\}$$

$$a_p^0 = \rho c \frac{\Delta x}{\Delta t}, \quad \{7.19\}$$

$$a_p^1 = f a_E^1 + f a_O^1 + a_p^0, \quad \{7.20\}$$

y reordenamos para obtener

lo que limita el paso de tiempo Δt en que se puede avanzar la iteración. Similar condición se puede hacer en el método de Crank-Nicholson.

El método implícito, por su parte, no está limitado en el paso de tiempo.

7.4 La ecuación de transporte en diferencias y volúmenes finitos

Sea la ecuación de transporte

$$\frac{\partial(\rho\varphi)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j \varphi) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma \frac{\partial \varphi}{\partial x_j} \right) + S^\varphi, \{7.27\}$$

donde $\Gamma = \rho D$ (no confundir con la abundancia específica Γ).

Primeramente escribimos

$$S^\varphi = S_u^\varphi + \varphi S_p^\varphi, \quad \{7.28\}$$

siendo S_u y S_p las partes no proporcional y proporcional a φ de S^φ . Esto lo hacemos para evitar que, si S^φ contiene un término proporcional a φ (o a una potencia de φ) y con signo negativo, la ecuación diverja por la razón antes mencionada (cada nuevo valor de φ reduce el valor del mismo).

Añadimos ahora los puntos del cuadrante T y B (Top y Bottom, arriba y abajo) a los cuatro anteriores (N, S, E y O) para casos tridimensionales.

Discretizamos utilizando las formas implícitas de primer orden, y multiplicamos (integramos) por el volumen $\Delta V = \Delta x \Delta y \Delta z$ y por Δt . Se definen los coeficientes de convección C y de difusión D tales que

$$C \equiv \frac{\rho u}{\Delta} \Delta V, \quad \{7.29\}$$

$$D \equiv \frac{\Gamma}{\Delta^2} \Delta V, \quad \{7.30\}$$

con lo que los coeficientes son

$$C_E = \frac{(\rho u)_E}{\Delta x} \Delta V = (\rho u)_E \Delta y \Delta z, \quad \{7.31\}$$

$$C_N = \frac{(\rho u)_N}{\Delta y} \Delta V = (\rho u)_N \Delta x \Delta z, \text{ etc.}, \quad \{7.32\}$$

que podemos abreviar como

$$C_i = (\rho u)_i A_i, \quad \{7.33\}$$

siendo A_i el área normal a u_i .

Los coeficientes del término de difusión son

$$D_E = \frac{\Gamma_E}{\Delta x^2} \Delta V = \frac{\Gamma_E}{\Delta x} \Delta y \Delta z, \quad \{7.34\}$$

$$D_N = \frac{\Gamma_N}{\Delta y^2} \Delta V = \frac{\Gamma_N}{\Delta y} \Delta x \Delta z, \text{ etc.}, \quad \{7.35\}$$

que podemos abreviar como

$$D_i = \frac{\Gamma_i}{\Delta x_i} A_i, \quad \{7.36\}$$

siendo Δx_i la distancia entre P y el punto i (N, S, E, O, T o B) y A_i el área normal a Δx_i .

Construimos entonces los coeficientes de los vecinos

$$a_E = D_E - C_E / 2 \quad \{7.37\}$$

$$a_O = D_O + C_O / 2 \quad \{7.38\}$$

$$a_N = D_N - C_N / 2 \quad \{7.39\}$$

$$a_S = D_S + C_S / 2 \quad \{7.40\}$$

$$a_T = D_T - C_T / 2 \quad \{7.41\}$$

$$a_B = D_B + C_B / 2 \quad \{7.42\}$$

$$a_P = a_E + a_O + a_N + a_S + a_T + a_B + a_P^0 - S_P^\varphi \Delta V \quad \{7.43\}$$

$$a_P^0 = \frac{\rho_P^0}{\Delta t} \Delta V, \quad \{7.44\}$$

$$b = S_u^\varphi \Delta V + a_P^0 \varphi_P^0, \quad \{7.45\}$$

y nuestra ecuación discretizada queda en forma de una ecuación lineal en φ :

$$\boxed{a_p \varphi_p = a_E \varphi_E + \dots + a_B \varphi_B + b.} \quad \{7.46\}$$

Para flujos estables en el tiempo, $a_p^0 = 0$.

Para acelerar la convergencia se suele probar el signo de $-S_p^\varphi$ y de a_p^0 de modo que si son negativos pasen al primer miembro y si son positivos al segundo.

7.5 Las condiciones de frontera

En las cercanías de una frontera no habrá celdas para completar el stencil de discretización, y es necesario generar algoritmos especiales (extrapolación). En general, y siguiendo la recomendación de Oran y Boris (Capítulo 6) se recomienda crear una línea de celdas virtuales por fuera de la frontera, lo que permitirá tratar, por ejemplo, los gradientes sin necesidad de algoritmos especiales por la falta de una celda. En los casos en que la condición de pared es cero (velocidad) a la celda exterior se le adjudicará el valor de la primera celda interior cambiado de signo, lo que asegura que el valor de frontera sea cero.

Para aquellas variables cuyo valor de frontera no sea trivial como cero o uno, como en el caso de la disipación ε , se puede incluir un término de fuente como

$$S^\varepsilon = S_u^\varepsilon - S_p^\varepsilon \varepsilon = 10^{10} \frac{C_\mu^{3/4} \kappa^{3/2}}{ky} - 10^{10} \varepsilon. \quad \{7.47\}$$

Al ser los coeficientes mucho mayores que los demás coeficientes de la ecuación discretizada, la solución es forzada a

$$\varepsilon = \frac{C_\mu^{3/4} \kappa^{3/2}}{ky}, \quad \{7.48\}$$

que es el valor de pared deseado.

7.6 El número de Peclet

El número de Peclet de la celda se define como

$$Pe = \frac{C}{D} \quad \{7.49\}$$

y, con las definiciones de C y D resulta ser el número de Reynolds de la celda o volumen de control.

Para un caso unidimensional sin término de fuente la ecuación de transporte queda

$$a_P \varphi_P = a_E \varphi_E + a_O \varphi_O. \quad \{7.50\}$$

Si fuera $D = 1$ y $C = 8$ tendríamos

$$a_E = D - C / 2 = -3$$

$$a_O = D + C / 2 = 5$$

$$a_P = a_E + a_O = 2$$

Luego $2\varphi_P = -3\varphi_E + 5\varphi_O$. Damos algunos valores:

φ_E	φ_O	φ_P
200	100	-50
100	200	350

Los resultados son incorrectos: una interpolación lineal no puede dar valores más altos ni más bajos que los extremos.

La condición para que esto no ocurra es que a_E sea positivo, $D \geq C / 2$, o sea

$$Pe \leq 2. \quad \{7.51\}$$

De lo contrario deberemos utilizar la discretización corriente arriba.

Hay varios métodos para asegurar esto. Uno es el *método híbrido*, en el que los coeficientes se eligen de acuerdo al número de Peclet para que resulte o bien discretización implícita centrada o bien explícita corriente arriba, haciendo

$$\begin{aligned}
 a_E &= \text{MAX}(-C, D - C/2, 0)_E \\
 a_O &= \text{MAX}(C, D + C/2, 0)_O \\
 a_N &= \text{MAX}(-C, D - C/2, 0)_N \\
 a_S &= \text{MAX}(C, D + C/2, 0)_S, \text{ etc.} \quad \{7.52\}
 \end{aligned}$$

Otro método es el de la Ley de Potencias. En este se define la función

$$A(|Pe|) = \text{MAX} \left[0, \left(1 - \frac{|Pe|}{10} \right)^5 \right], \{7.53\}$$

y los coeficientes se forman como

$$\begin{aligned}
 a_E &= D_E A_E + \text{MAX}(-C, 0)_E \\
 a_O &= D_O A_O + \text{MAX}(C, 0)_O \\
 a_N &= D_N A_N + \text{MAX}(-C, 0)_N, \text{ etc.} \quad \{7.54\}
 \end{aligned}$$

Esta función genera una transición suave entre las discretizaciones centrada y corriente arriba.

Los métodos híbrido y de ley de potencia son los más usuales y recomendados para generar los coeficientes de la ecuación discretizada.

7.7 Otros métodos

Existen otros métodos para corregir el problema del número de Peclet. Entre ellos se puede mencionar el de McCormack, en el que se aplican dos pasos de tiempo iguales, uno “predictor” y el otro “corrector”. En el primero se utilizan fórmulas de discretización “corriente abajo”, y se obtiene un juego de valores; luego se aplica una discretización “corriente arriba” con los parámetros antes calculados como valores vecinos.

En el método de “corriente arriba – segundo orden” se utiliza la estimación

$$\left. \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right|_e \cong \frac{\varphi_P - \varphi_O}{\Delta x}, \quad \{7.55\}$$

donde el subíndice e indica la cara entre P y E.

En el método QUICK se utilizan $\frac{3}{4}$ de la discretización centrada y $\frac{1}{4}$ de la anterior, con lo que

$$\left. \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right|_e \cong \frac{1}{4\Delta x} (3\varphi_E - 2\varphi_P - \varphi_O). \quad \{7.56\}$$

7.8 Ubicación de las variables

Hasta aquí hemos considerado todas las variables localizadas en el centro del volumen de control P.

Se presenta una dificultad cuando evaluamos el término de fuente de la ecuación de Navier-Stokes, $-\hat{\partial p} / \partial x$. Supongamos el volumen de control de la figura:

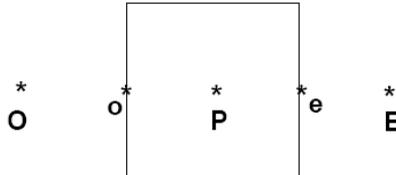


Figura 7.5: Volumen de control

Escribimos el término de fuente discretizado:

$$-\frac{\partial p}{\partial x} \cong \frac{p_o - p_e}{\Delta x} = \frac{p_P + p_O}{2\Delta x} - \frac{p_P + p_E}{2\Delta x} = \frac{p_O - p_E}{2\Delta x}. \quad \{7.57\}$$

Luego, el término de fuente introduce una relación entre los centros de las celdas adyacentes y no entra el valor de la presión en las caras de la celda. Si así fuera una distribución de presión como la de la figura:

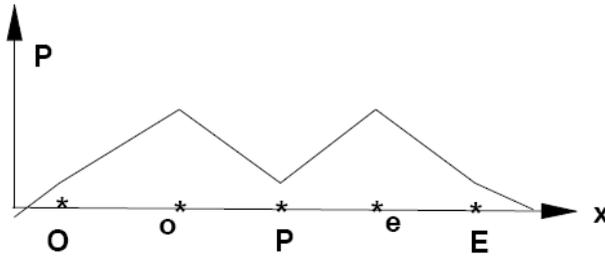


Figura 7.6: Distribución de presión

daría el mismo resultado que una presión uniforme, lo que es incorrecto.

Similar dificultad se presenta cuando integramos la ecuación de continuidad sobre el volumen de control. Suponiendo flujo estable en el tiempo y densidad constante,

$$\frac{\partial u}{\partial x} = 0. \quad \{7.58\}$$

Con el procedimiento anterior llegamos a

$$u_e - u_o = u_E - u_O, \quad \{7.59\}$$

y nuevamente llegamos a la conclusión que una distribución en diente de sierra es igual a una distribución uniforme.

La solución a este problema es la grilla alternada, que consiste en ubicar las velocidades en las caras del volumen de control y no en el centro:

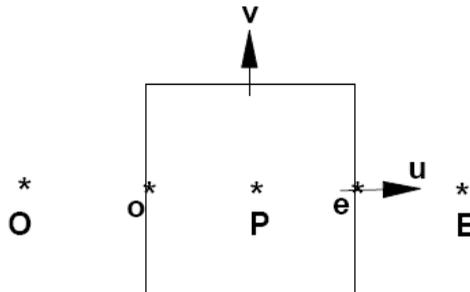


Figura 7.7: Grilla alternada

La ecuación de Navier-Stokes, discretizada e integrada y aplicada al punto e resulta:

$$a_e u_e = \sum (au)_{vecinos} + b_e + \frac{(p_P - p_E)}{\Delta x} \Delta Vol. \quad \{7.60\}$$

Para la dirección y , aplicada al punto n :

$$a_n u_n = \sum (au)_{vecinos} + b_n + \frac{(p_P - p_N)}{\Delta y} \Delta Vol. \quad \{7.61\}$$

De este modo el valor de u (digamos u_e) queda relacionado a las presiones que lo rodean (p_P y p_E) lo cual es físicamente correcto.

7.9 La corrección de presión

Partimos de la suposición que existe un juego completo de parámetros obtenidos en una iteración anterior de la solución. Supongamos que los valores de presión así obtenidos son p^* y deseamos corregirlos al valor p añadiendo una corrección p' . Esto causará correcciones u' a las velocidades u^* .

La ecuación de Navier-Stokes discretizada era, por ejemplo,

$$a_e u_e = \sum (au)_{vecinos} + b_e + (p_P - p_E) A_e, \quad \{7.62\}$$

donde $A_e = \Delta Vol / \Delta x$ es el área de la cara e .

Con los valores de la última iteración

$$a_e u_e^* = \sum (au^*)_{vecinos} + b_e + (p_P^* - p_E^*) A_e, \quad \{7.63\}$$

(b , si existe, no cambia).

Restando obtenemos la ecuación en correcciones

$$a_e u'_e = \sum (au')_{vecinos} + (p'_P - p'_E) A_e, \quad \{7.64\}$$

Despreciamos el término $\sum (au')_{vecinos}$ para generar el método SIMPLE. Luego, nos queda

$$a_e u'_e = (p'_P - p'_E) A_e, \quad \{7.65\}$$

o sea

$$u_e = u_e^* + \frac{A_e}{a_e} (p'_P - p'_E). \quad \{7.66\}$$

Ecuaciones similares se pueden escribir para las otras componentes de velocidad.

Para obtener la ecuación de corrección de la presión, comenzamos con la ecuación de continuidad

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} = 0, \quad \{7.67\}$$

y la discretizamos en volúmenes finitos

$$\begin{aligned} & \frac{(\rho_P - \rho_P^0)}{\Delta t} \Delta Vol + [(\rho u)_e - (\rho u)_o] \frac{\Delta Vol}{\Delta x} + \\ & [(\rho u)_n - (\rho u)_s] \frac{\Delta Vol}{\Delta y} \\ & + [(\rho u)_t - (\rho u)_b] \frac{\Delta Vol}{\Delta z} = 0 \end{aligned} \quad \{7.68\}$$

Sustituimos ahora las expresiones de u , v y w halladas antes y reordenamos para escribir

$$a_P p'_P = B, \quad \{7.69\}$$

donde

$$\begin{aligned} a_E &= \rho_e \frac{A_e}{a_e} \frac{\Delta Vol}{\Delta x} \\ a_O &= \rho_o \frac{A_o}{a_o} \frac{\Delta Vol}{\Delta x} \\ a_N &= \rho_n \frac{A_n}{a_n} \frac{\Delta Vol}{\Delta y}, \text{ etc.} \end{aligned} \quad \{7.70\}$$

y el término de fuente B contiene todo los sobrantes:

$$\begin{aligned}
B = & \frac{(\rho_p^0 - \rho_p)}{\Delta t} \Delta Vol + [(\rho u^*)_o - (\rho u^*)_e] \frac{\Delta Vol}{\Delta x} \\
& + [(\rho u^*)_s - (\rho u^*)_n] \frac{\Delta Vol}{\Delta y} \quad . \{7.71\} \\
& + [(\rho u^*)_b - (\rho u^*)_t] \frac{\Delta Vol}{\Delta z}
\end{aligned}$$

Notamos que se debe interpolar la densidad ya que normalmente sólo tenemos los valores en los centros de los volúmenes de control y no en las caras.

La solución de la ecuación de p' produce una corrección que, sumada a p^* produce la presión corregida. Mediante las ecuaciones de corrección {7.62} también corregimos las velocidades, y con la presión y temperatura recalculamos la densidad y procedemos a iterar.

El haber descartado el término $\sum (au')_{vecinos}$ no afecta la solución ya que, al avanzar en la iteración, todos los valores prima deben tender a cero.

Si no despreciamos el término $\sum (au')_{vecinos}$ sino que lo calculamos con los valores disponibles en esta iteración obtenemos el método SIMPLER.

En el método SIMPLEC se resta a la ecuación de corrección de velocidad el término $u' \sum (a)_{vecinos}$, con lo que queda, para la cara e :

$$\begin{aligned}
(a_e - \sum a_{vecinos}) u'_e = \\
\sum [a_{vecinos} (u'_{vecinos} - u'_e)] + (p'_P - p'_E) A_e, \quad \{7.72\}
\end{aligned}$$

y ahora se descarta la sumatoria del segundo miembro ya que dá aproximadamente cero. Luego, la ecuación de corrección de la velocidad queda:

$$u'_e = \frac{A_e}{a_e - \sum a_{vecinos}} (p'_P - p'_E), \quad \{7.73\}$$

y la ecuación de corrección de p es la misma que para SIMPLER.

Referencias al Capítulo 7

- Leonard, B.P., (1979), "A stable and accurate convective modelling procedure based on quadratic upstream interpolation", *Comp. Meth. in Appl. Mech. and Engrng.*, vol. 19, pp. 59-98.
- MacCormack, R. W., The Effect of viscosity in hypervelocity impact cratering, AIAA Paper, 69-354 (1969).

CAPÍTULO 8

La grilla de cálculo

8.1 Tipos de grillas

Para proceder a resolver las ecuaciones discretizadas es necesario dividir el área o volumen de flujo en celdas, generando una grilla de cálculo.

Las grillas pueden ser estructuradas o no-estructuradas, indicando con esto si son cuadriláteros (o hexaedros en 3D) o bien si son triángulos (o tetraedros en 3D). Trataremos primero las grillas estructuradas.

La grilla puede estar referida a ejes cartesianos, ya sean coordenadas cartesianas ortogonales (x, y, z) ú otro sistema más adecuado al problema (cilíndricas, esféricas).

Las grillas cartesianas tienen la propiedad de ser ortogonales, lo que simplifica la evaluación de las áreas normales a las velocidades, y los volúmenes de control. Por otra parte presentan serias dificultades para discretizar fronteras inclinadas o curvas:

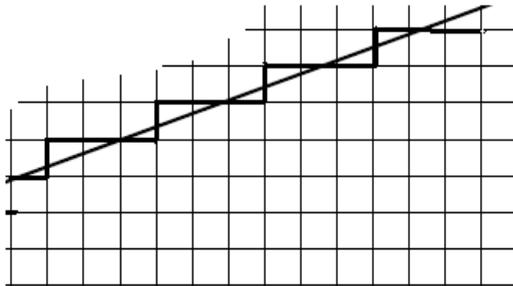


Figura 8.1: Frontera inclinada

A menos que la región de flujo esté formada por paralelepípedos es siempre aconsejable utilizar grillas ajustadas al contorno:

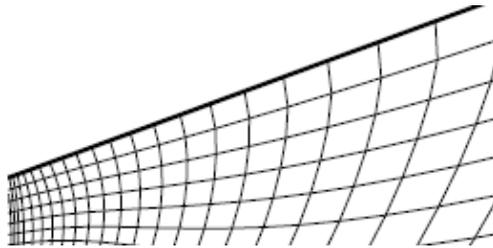


Figura 8.2: Grilla ajustada al contorno

En todos los casos es necesario que las grillas sean ortogonales para evitar complicaciones al calcular flujos de entrada y salida del volumen de control.

La generación de grillas estructuradas ajustadas al contorno tridimensionales normalmente se realiza generando grillas bidimensionales sobre las caras más complejas y completando la tercera dimensión por unión de puntos correspondientes. Esto hace que sea necesario que cada cara bidimensional tenga el mismo número de puntos.

De acuerdo a lo ya visto es aconsejable generar la grilla de caras de los volúmenes de control y colocar los centros en el centro geométrico del cuerpo de seis caras resultante. Sin embargo, en ciertos casos se generan grillas de centros, colocando las caras a media distancia entre centros. Esto hace necesario calcular y almacenar la ubicación de los centros, como se verá.

8.2 Grillas cartesianas ortogonales

Dada una región (x, y, z) que incluya todo el campo de flujo, los segmentos $(0-x)$, $(0-y)$ y $(0-z)$ se dividen en (n_x, n_y, n_z) partes con lo que la grilla de caras queda generada.

La división puede ser uniforme o variada, en series aritméticas, geométricas o arbitrarias. Se suele utilizar un espaciado

no-uniforme para reducir el tamaño del volumen de control en zonas donde se sospeche que el número de Peclet excederá el valor 2, o donde simplemente se desea refinar el cálculo:

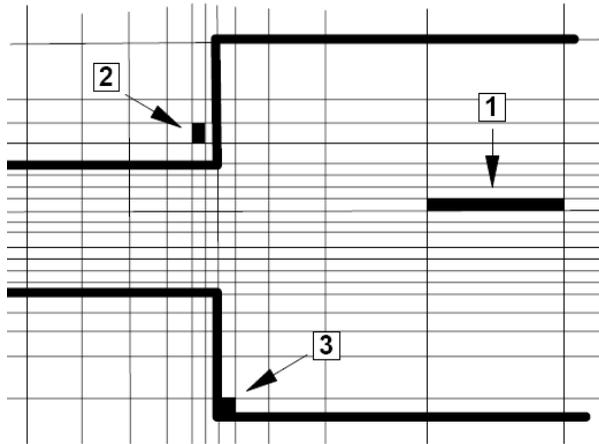


Figura 8.3: Grilla cartesiana variada

Este procedimiento tiene dos defectos: uno que se corre el riesgo de producir celdas con elevadas relaciones de aspecto (largo/ancho) como la indicada en (1); esto puede provocar que la discretización en una dirección sea implícita centrada y en la otra corriente arriba, lo que causará dificultad en la convergencia. El segundo defecto es que se generan celdas muy finas en zonas fuera del flujo (2) o en regiones sin interés (3), causando computaciones innecesarias.

Una solución a este problema es el uso de grillas refinadas localmente, que, si bien ahorran espacio de almacenamiento, retardan el cálculo por causa de los procesos de pasaje de la grilla gruesa a la fina:

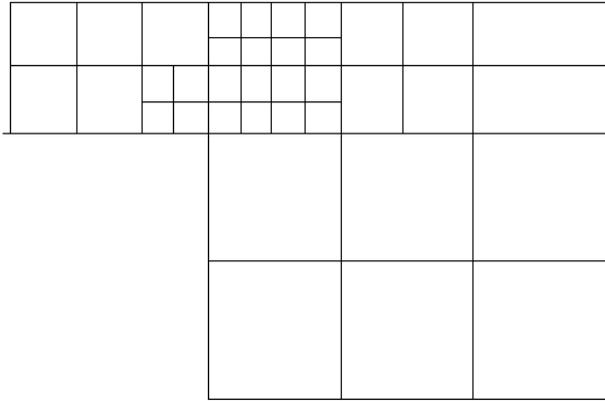


Figura 8.4: Grilla refinada localmente

Por simplicidad las grillas se refinan dividiendo por dos en cada dirección, y nuevamente por dos si es necesario otro nivel de refinación.

El pasaje de una grilla fina a una gruesa se realiza por procesos lineales:

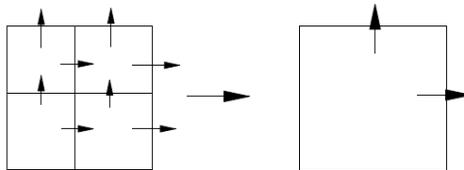


Figura 8.5: Pasaje de fina a gruesa

Las velocidades en la grilla gruesa se hallan balanceando flujos en las caras. Los escalares en la grilla gruesa por integración (con el área de la celda).

Para pasar de la grilla gruesa a la fina las velocidades se interpolan linealmente:

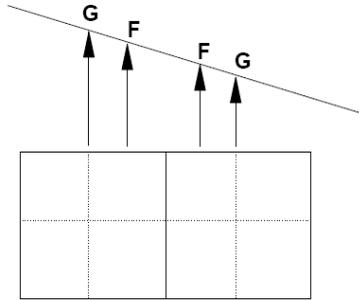


Figura 8.6: Interpolación de velocidades

Los escalares centrados, por interpolación bilineal entre cuatro celdas gruesas:

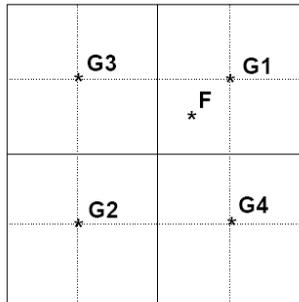


Figura 8.7: Pasaje de escalares

En este caso, asumiendo áreas iguales:

$$F = \frac{1}{16} (9G_1 + G_2 + 3G_3 + 3G_4) . \{8.1\}$$

En este último caso será necesario modificar esta fórmula si el espaciado no es uniforme (los coeficientes 9, 1, 3 y 3 salen de la interpolación bilineal).

Es necesario generar un número de esquemas especiales para grillas finas cerca de las fronteras, donde puede no haber suficientes celdas gruesas en derredor para usar los procedimientos indicados.

La solución numérica se hace en la grilla gruesa, pasándose a la grilla fina cuando se han resuelto las adyacentes gruesas.

El uso de grillas refinadas, si bien reduce considerablemente el número total de celdas, obliga a usar una cantidad de puntos de decisión que retardan notablemente la ejecución del programa de cálculo, con lo que su uso no es siempre aconsejable.

Si se adopta el método de generar grillas de centros es necesario almacenar la posición de los centros respecto a los vértices:

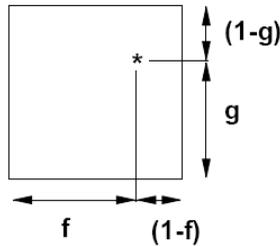


Figura 8.8: Localización de centros

Comúnmente esto se hace almacenando las fracciones (llamadas f y g en la figura) de la longitud de cara en la dirección creciente de la ordenada.

Las fórmulas de pasaje de grilla fina a gruesa y viceversa deben modificarse como corresponda. Por ejemplo, el flujo sobre una cara ($\rho u A$) requiere interpolar la densidad ya que no puede asumirse la densidad en el centro como válida en el centro de la cara:

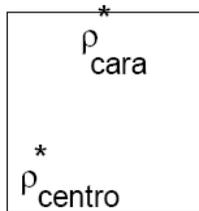


Figura 8.9: Escalares no centrados

Las coordenadas cilíndricas normalmente se usan sólo para casos axisimétricos, vale decir, bidimensionales. En este caso se

resuelve sólo una cuña de apertura 1 radián. Se debe evitar utilizar aberturas menores (digamos, un grado sexagesimal), ya que esto genera celdas con mala relación de aspecto:

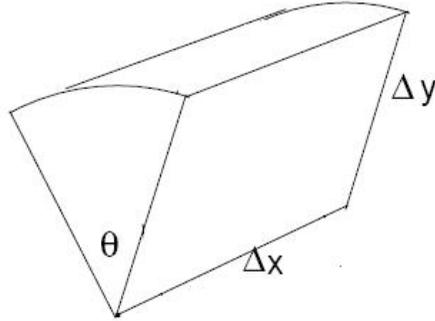


Figura 8.10: Celda en coordenadas cilíndricas

El área en el plano xy es $\Delta x \Delta y$ mientras que el área yz es $\theta \Delta y^2$. Si hacemos $\Delta x \cong \Delta y$ para tener una buena relación de aspecto en el plano xy , en el plano yz deberá ser $\theta = 1$.

8.3 Grillas ajustadas al contorno (BFC)

La experiencia indica que la mejor grilla es aquella que es lo más paralela posible al flujo. Como el flujo normalmente sigue los contornos del conducto, las grillas ajustadas al contorno son preferibles a las cartesianas. Por otro lado, con su uso se ahorra en espacio de almacenamiento y en algoritmos especiales para celdas de frontera.

La generación de grillas ajustadas al contorno consiste esencialmente en un mapeo del plano (x, y, z, t) al plano (ξ, η, ν, τ) , aunque normalmente el tiempo no se transforma, y como se dijo, se

generan grillas ajustadas al contorno en planos y se concluye la grilla uniendo los puntos correspondientes en la tercera dimensión.

El requisito es que la grilla sea ortogonal para poder separar las componentes de velocidad u y v y computar los flujos ρuA . Igualmente se requiere que la grilla sea normal a las fronteras.

Es poco común que estos requisitos se cumplan exactamente en casos prácticos. Salvo situaciones elementales (paralelepípedos en coordenadas cartesianas, cilindros en coordenadas cilíndricas) no es matemáticamente posible generar una grilla perfectamente ortogonal. Por otro lado no es estrictamente necesario que la grilla sea perfectamente ortogonal ya que la curvatura de las líneas de grilla no se toma en cuenta al computar, por ejemplo, las áreas:

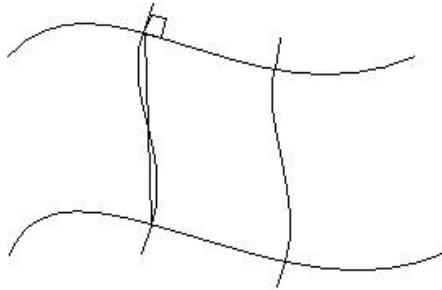


Figura 8.11: Líneas de grilla

La generación de grillas ajustadas al contorno puede hacerse por resolución de ecuaciones diferenciales parciales o por medios algebraicos. En ambos casos la grilla transformada es una grilla rectangular, ya que las variables transformadas (ξ, η) tienen el mismo rango de variación en dos fronteras opuestas. Por comodidad se suele adoptar el índice de la celda (variando de 1 a NI y de 1 a NJ) como la variable transformada, ya que entonces $\Delta\xi = \Delta\eta = 1$; $A = 1$.

8.4 BFC, métodos diferenciales

Las grillas ajustadas al contorno pueden generarse por medio de ecuaciones diferenciales elípticas, parabólicas e hiperbólicas.

Las elípticas son preferidas por producir grillas más uniformes, porque no producen líneas que se crucen, no propagan (más bien amortiguan) las discontinuidades o quiebres de las fronteras, ofrecen control sobre el grado de ortogonalidad y concentración de líneas y son las más versátiles y adaptables. Sin embargo, requieren métodos de solución más sofisticados y excelentes condiciones iniciales.

Las hiperbólicas son más eficientes y de solución más sencilla pero pueden propagar las discontinuidades al interior y sólo son aplicables donde una dirección de flujo es predominante.

Las grillas parabólicas son también de eficiente solución y amortiguan discontinuidades. Sin embargo, son menos utilizadas que las elípticas.

Veremos la generación de grillas elípticas.

Partimos del mapeado de $(x, y) \rightarrow (\xi, \eta)$, con $0 \leq \xi \leq 1$, y $0 \leq \eta \leq 1$, donde $x = x(\xi, \eta)$ e $y = y(\xi, \eta)$, con el Jacobiano de la transformación

$$J = x_\xi y_\eta - x_\eta y_\xi; \left(x_\xi = \frac{\partial x}{\partial \xi}, \text{ etc.} \right). \quad \{8.2\}$$

Hay tres propiedades del mapeado que nos interesan: la gradualidad del cambio de espaciado, la ortogonalidad y la variación de área o volumen.

La primera la evaluamos por medio de

$$I_1 = \iint \left((\Delta \xi)^2 + (\Delta \eta)^2 \right) dx dy. \quad \{8.3\}$$

La segunda por medio de

$$I_2 = \iint (\Delta \xi \Delta \eta)^2 dx dy, \quad \{8.4\}$$

y la tercera por

$$I_3 = \iint J dx dy. \quad \{8.5\}$$

El mínimo de la segunda debiera ser cero mientras que las otras dos debieran tener un mínimo. Es posible minimizar el conjunto utilizando multiplicadores de Lagrange:

$$I = I_1 + \lambda_2 I_2 + \lambda_3 I_3. \quad \{8.6\}$$

Por simplicidad veremos el caso de minimizar el cambio de tamaño, o sea, I_1 .

Para introducir la ortogonalidad consideramos una línea de $\xi = \text{const}$. Luego,

$$d\xi = \frac{\partial \xi}{\partial x} dx + \frac{\partial \xi}{\partial y} dy = 0, \quad \{8.7\}$$

de donde

$$\left. \frac{dy}{dx} \right|_{\xi = \text{const}} = - \frac{\xi_x}{\xi_y}. \quad \{8.8\}$$

Escribimos

$$\left. \frac{dy}{dx} \right|_{\xi = \text{const}} = \frac{dy/\partial \eta}{\partial x / \partial \eta}, \quad \{8.9\}$$

y reemplazando

$$x_\eta \xi_x + y_\eta \xi_y = 0, \quad \{8.10\}$$

y con el Jacobiano obtenemos

$$x_\eta = - \frac{J \xi_y}{\xi_x x_\xi + \xi_y y_\xi}, \quad \{8.11\}$$

$$y_\eta = \frac{J \xi_x}{\xi_x x_\xi + \xi_y y_\xi}, \quad \{8.12\}$$

El denominador es

$$\xi_x x_\xi + \xi_y y_\xi = \left(\frac{\partial \xi}{\partial x} dx + \frac{\partial \xi}{\partial y} dy \right) \frac{1}{\partial \xi} = \frac{\partial \xi}{\partial \xi} = 1. \quad \{8.13\}$$

Luego, quedan

$$\xi_y = - \frac{x_\eta}{J}; \quad \xi_x = \frac{y_\eta}{J}. \quad \{8.14\}$$

Igualmente, considerando líneas de $\eta=const$ obtenemos

$$\eta_y = \frac{x_\xi}{J}; \eta_x = -\frac{y_\xi}{J}. \quad \{8.15\}$$

Con $dx dy = J d\xi d\eta$ reemplazamos en {7.74} para obtener

$$I_1 = \int_0^1 \int_0^1 \left(x_\xi^2 + x_\eta^2 + y_\xi^2 + y_\eta^2 \right) \frac{1}{J} d\xi d\eta. \quad \{8.16\}$$

Esta integral es una medida de los gradientes de la grilla. Se puede demostrar que es minimizada por las expresiones

$$\begin{cases} \alpha x_{\xi\xi} - 2\beta x_{\xi\eta} + \gamma x_{\eta\eta} = 0 \\ \alpha y_{\xi\xi} - 2\beta y_{\xi\eta} + \gamma y_{\eta\eta} = 0; \end{cases} \quad \{8.17\}$$

donde los coeficientes son

$$\begin{cases} \alpha = \frac{x_\eta^2 + y_\eta^2}{J^3} \\ \beta = \frac{x_\eta x_\xi + y_\eta y_\xi}{J^3} \\ \gamma = \frac{x_\xi^2 + y_\xi^2}{J^3}; \end{cases} \quad \{8.18\}$$

Si la grilla fuera ortogonal se cumplen las condiciones de Cauchy-Riemann

$$x_\eta = y_\xi; x_\xi = -y_\eta \text{ y el sistema anterior se reduce a}$$

$$\nabla^2 x + \nabla^2 y = 0, \quad \{8.19\}$$

con lo que la grilla queda definida por la ecuación de Laplace.

Para dar mayor flexibilidad al método e introducir condiciones de borde se adopta la forma

$$\begin{cases} \alpha x_{\xi\xi} - 2\beta x_{\xi\eta} + \gamma x_{\eta\eta} = -J^2 (Px_\xi + Qx_\eta) \\ \alpha y_{\xi\xi} - 2\beta y_{\xi\eta} + \gamma y_{\eta\eta} = -J^2 (Py_\xi + Qy_\eta); \end{cases} \{8.20\}$$

donde P y Q son dos funciones que pueden utilizarse para generar las condiciones de borde. Por ejemplo, Sorensen elige

$$\begin{cases} P(\xi, \eta) = p(\xi)e^{-a\eta} + r(\xi)e^{-c(\eta_{\max} - \eta)} \\ Q(\xi, \eta) = q(\xi)e^{-b\eta} + s(\xi)e^{-d(\eta_{\max} - \eta)} \end{cases}; \{8.21\}$$

con a , b , c y d constantes positivas; a y b controlan el decaimiento exponencial del valor de frontera p o q hacia el interior sobre líneas de $\eta = \text{const}$; c y d controlan el decaimiento exponencial del valor de frontera r o s hacia el interior sobre líneas de $\xi = \text{const}$.

El método de generación de la grilla consiste en resolver las ecuaciones {7.91} por diferencias finitas, satisfaciendo la ecuación en el interior y ajustando el valor en las fronteras. Por ejemplo, para la frontera $\eta = \eta_{\max}$ P y Q toman valores solamente con ξ .

Las ecuaciones {7.91} son un sistema de ecuaciones de Poisson en las que se puede controlar tanto el espaciado como la ortogonalidad de la grilla. Un control completo del espaciado y del grado de ortogonalidad también puede obtenerse resolviendo ecuaciones biarmónicas

$$\nabla^4 \xi + \nabla^4 \eta = 0, \quad \{8.22\}$$

pero la solución puede no ser biunívoca y deben extremarse los cuidados al utilizarla.

8.5 BFC, métodos algebraicos

También se pueden generar grillas cuasi-ortogonales por medios algebraicos, básicamente por interpolación. La interpolación lineal entre fronteras no puede producir grillas cuasi-ortogonales ni ofrecer control sobre el ángulo de las líneas de grilla en la frontera; es necesario utilizar funciones de interpolación especiales.

Para el caso de un campo con cuatro fronteras $\xi = 0$, $\xi = 1$, $\eta = 0$, $\eta = 1$, se puede utilizar el método de los polinomios de Hermite, escribiendo por ejemplo, para las líneas de $\xi = \text{const}$

$$\left\{ \begin{array}{l} x(\xi, \eta) = x(\xi, 0)h_1 + x(\xi, 1)h_2 + \frac{\partial x}{\partial \eta} \Big|_{\eta=0} h_3 + \frac{\partial x}{\partial \eta} \Big|_{\eta=1} h_4 \\ y(\xi, \eta) = y(\xi, 0)h_1 + y(\xi, 1)h_2 + \frac{\partial y}{\partial \eta} \Big|_{\eta=0} h_3 + \frac{\partial y}{\partial \eta} \Big|_{\eta=1} h_4; \\ \{8.23\} \end{array} \right.$$

Los polinomios de Hermite son:

$$\left\{ \begin{array}{l} h_1 = 2\eta^3 - 3\eta^2 + 1 \\ h_2 = -2\eta^3 + 3\eta^2 \\ h_3 = \eta^3 - 2\eta^2 + \eta \\ h_4 = \eta^3 - \eta^2 \end{array} \right. ; \quad \{8.24\}$$

Se pueden plantear funciones similares para las líneas de $\eta = \text{const}$.

La ortogonalidad en las fronteras se puede asegurar haciendo, para $\eta=0$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial x}{\partial \eta} \Big|_{\eta=0} = -k_1(\xi) \frac{dy}{d\xi} \Big|_{\eta=0} \\ \frac{\partial y}{\partial \eta} \Big|_{\eta=0} = k_1(\xi) \frac{dx}{d\xi} \Big|_{\eta=0} \end{array} \right. ; \quad \{8.25\}$$

y para $\eta=1$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial x}{\partial \eta} \Big|_{\eta=1} = -k_2(\xi) \frac{dy}{d\xi} \Big|_{\eta=1} \\ \frac{\partial y}{\partial \eta} \Big|_{\eta=1} = k_2(\xi) \frac{dx}{d\xi} \Big|_{\eta=1} \end{array} \right. ; \quad \{8.26\}$$

donde $k_1(\xi)$ y $k_2(\xi)$ son funciones arbitrarias de ξ en las fronteras $\eta=0$ y $\eta=1$.

8.6 Transformación de las ecuaciones de transporte

Las ecuaciones de transporte pueden ser reescritas en las coordenadas (ξ, η) utilizando las siguientes transformaciones

$$\begin{cases} x \rightarrow \xi \\ y \rightarrow \eta \\ u \rightarrow U \\ v \rightarrow V; \end{cases} \quad \{8.27\}$$

$$\begin{cases} U = uy_\eta - vx_\eta \\ V = -uy_\xi + vx_\eta; \end{cases} \quad \{8.28\}$$

$$\begin{cases} u = \frac{Ux_\xi + Vx_\eta}{J} \\ v = \frac{Uy_\xi + Vy_\eta}{J}; \end{cases} \quad \{8.29\}$$

Las derivadas cruzadas son nulas:

$$\begin{cases} x_{\xi x} = x_{\eta x} = x_{x\xi} = x_{x\eta} = 0 \\ x_{\xi y} = x_{\eta y} = x_{y\xi} = x_{y\eta} = 0, \text{ etc.} \end{cases} \quad \{8.30\}$$

por lo que resulta

$$\begin{cases} u_x = \frac{U_x x_\xi + V_x x_\eta}{J} \\ v_x = \frac{U_x y_\xi + V_x y_\eta}{J} \\ u_y = \frac{U_y x_\xi + V_y x_\eta}{J} \\ v_y = \frac{U_y y_\xi + V_y y_\eta}{J}; \end{cases} \quad \{8.31\}$$

$$\begin{cases} U_x = u_x y_\eta - v_x x_\eta \\ U_y = u_y y_\eta - v_y x_\eta \\ V_x = -u_x y_\xi + v_x x_\xi \\ V_y = -u_y y_\xi + v_y x_\xi; \end{cases} \quad \{8.32\}$$

El elemento de volumen se transforma como $dV = dx dy dz = J d\eta d\xi dz$

Un punto importante a recordar es que las métricas (x_ξ , y_η , J , etc.) deben discretizarse en los mismos lugares y por el mismo método que las variables; de lo contrario se introducirán errores numéricos.

8.7 Grillas no estructuradas

Las grillas cartesianas y ajustadas al contorno ya vistas son grillas *estructuradas*, indicando con esto que son formadas por cuadriláteros en el plano o hexaedros en el espacio, de modo que un índice constante identifica un lado o cara.

El desarrollo de los métodos de elementos finitos ha proporcionado algoritmos y software muy eficientes, aptos para generar grillas *no-estructuradas*, formadas por triángulos o tetraedros. Estas grillas tienen la ventaja de permitir un fácil refinamiento local y pueden adaptarse al contorno tan bien o mejor que las estructuradas.

En el trabajo de Mavriplis se halla una completa revisión de las técnicas para generar y utilizar estas grillas para el modelado de escurrimientos. Una breve descripción se da en lo siguiente.

Para generar grillas no estructuradas existen dos métodos principales, el avance del frente y el método de Delaunay.

En ambos casos se dividen los bordes de frontera en segmentos; si se trata de un caso tridimensional, la grilla se genera inicialmente en la superficie de frontera, es decir, se comienza con un problema bidimensional, e igualmente se dividen los bordes de la superficie de frontera en segmentos.

En el método de avance del frente frente a cada segmento de frontera se ubica un punto y se traza el triángulo correspondiente. Hecho esto se elimina del conjunto el segmento de frontera que se ha utilizado y se añaden a la frontera los dos nuevos lados del nuevo triángulo:

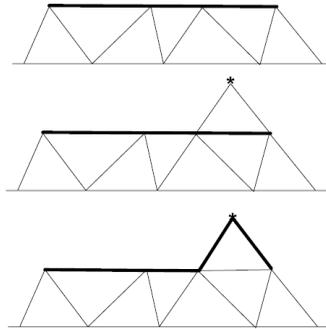


Figura 8.12: Método de avance de frente

El método es muy sencillo pero tiene un problema en que no hay un algoritmo robusto para decidir la ubicación del nuevo vértice; puede suceder que el nuevo vértice resulte ubicado demasiado cercano a otro vértice, generando un triángulo con pobre relación de aspecto (uno o más ángulos demasiado agudos). También puede suceder que el nuevo vértice resulte ubicado dentro de otro triángulo ya existente.

En el método de Delaunay se crea inicialmente una grilla gruesa (manualmente o con un algoritmo de avance de frente sencillo) y luego se añaden elementos refinando la grilla.

El principio se ejemplifica como sigue: dados tres triángulos consecutivos se trazan los círculos que los circunscriben. En la zona donde los tres círculos se superponen se ubica un punto, y luego se eliminan los tres triángulos; notar que, si los tres triángulos eran parte de la malla gruesa, sólo se eliminan algunos de los lados, ya que otros lados pertenecen a otros triángulos. Hecho esto con el nuevo punto se trazan cinco nuevos triángulos a los vértices que quedaron libres:

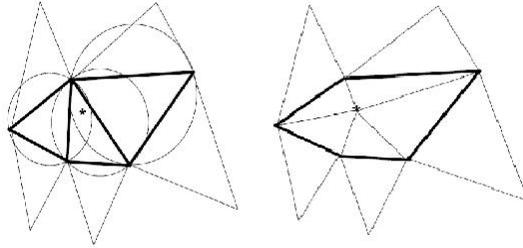


Figura 8.13: Método de Delaunay

Una vez generada la grilla sobre las superficies de frontera la grilla tridimensional de interior se puede generar por un procedimiento similar, si por el método de avance, ubicando un punto en el interior, creando el tetraedro correspondiente y avanzando la superficie de frontera, si por el método de Delaunay, con una grilla interior gruesa, creando las superficies esféricas que circunscriben a los tetraedros, etc.

Una desventaja de las grillas no estructuradas es que requieren generar tablas y algoritmos para identificar sus partes, proceso denominado definir la conectividad. Es necesario identificar y detallar para cada celda sus vértices, su centro, sus áreas, el largo de sus aristas, la orientación espacial de caras y aristas, con qué otras celdas se conecta y qué elementos (vértices, aristas, caras) comparte.

La colocación de las variables, como en el caso de las grillas estructuradas, puede hacerse en el centro de la celda o en los vértices.

La discretización de las ecuaciones de transporte se puede realizar de manera similar a la ya vista, identificando un volumen de control y realizando las integrales de flujos sobre las áreas del volumen de control, como se indica en la figura:

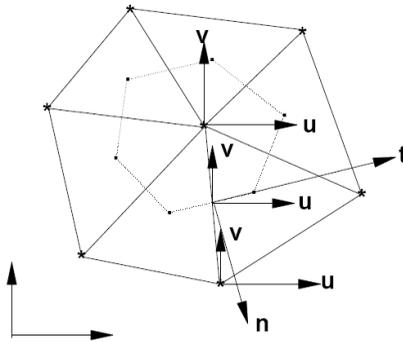


Figura 8.14: Grilla de vértices

El valor de una variable sobre la cara del volumen de control se obtiene por interpolación lineal, en el caso de la figura entre vértices. Si se utiliza el principio de colocar las variables en el centroide de las celdas el volumen de control puede coincidir con las caras de las celdas:

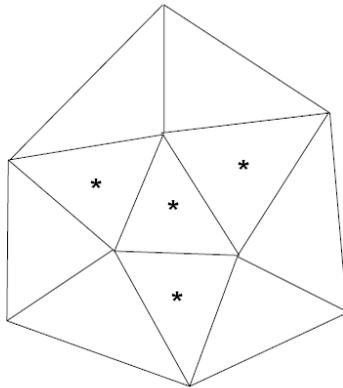


Figura 8.15: Grilla de centroides

Como se aprecia, las componentes de la velocidad en general no coinciden con las direcciones normales y/o tangentes a las caras del volumen de control lo que obliga a generar algoritmos para

obtener los vectores normal y tangente y proyectar los flujos sobre éstos para proceder a integrar con las áreas. La discretización de los gradientes y en especial de los términos disipativos (derivadas segundas) puede resultar muy compleja.

La ecuación discretizada es muy similar a las ya vistas, salvo que ahora el número de vecinos varía según la plantilla de discretización que se utilice, y si se utiliza la colocación en vértices o centroides.

Referencias al Capítulo 8

- Sorenson, R. L.; A computer program to generate two-dimensional grids about airfoils and other shapes by the use of Poisson equation, NASA TM-81198, 1980
- Mavriplis, D. J.; Unstructured Grid Techniques; Annual Review of Fluid Mechanics, Vol. 29: 473-514, 1997

CAPÍTULO 9

Solución del sistema de ecuaciones

9.1 General

El conjunto de ecuaciones de transporte discretizadas forma un sistema de ecuaciones lineales donde las incógnitas son los valores de los parámetros en cada celda. Los parámetros a computar son u_i (3 componentes), p , κ , ε , y_i (n especies), f , h , etc., o sea, con un mínimo de cuatro especies principales, aproximadamente 12 parámetros. Si no se utiliza un sistema de reacciones reducido n puede alcanzar valores de 100 a 200.

Hay un juego de ecuaciones lineales por cada celda, por lo que el total de ecuaciones lineales es $N_x N_y N_z$ ($10 \rightarrow 200$).

Con 100 celdas en cada dirección se alcanzan números de ecuaciones en el orden de 10^7 - 10^8 . Como los coeficientes de difusión están afectados del número de Prandtl/Schmidt que no es necesariamente el mismo para todas las variables, los coeficientes son en general todos distintos.

La ecuación general se escribe

$$a_p \phi_p = \sum (a\phi)_{\text{vecinos}} + S_u, \quad \{9.1\}$$

donde $a_p \equiv a_p - \sum a_{\text{vecinos}} - S_p$, y los vecinos son en general E, O, N, S, T y B. Luego, son aproximadamente 10 coeficientes por ecuación, lo que implica un total de 10^8 - 10^9 coeficientes y resultados a almacenar.

Estos números son demasiado altos para las capacidades de memoria de las computadoras de escritorio y por lo tanto no es común que se resuelvan todas las variables simultáneamente. Los resolvedores que así lo hacen se denominan resolvedores simultáneos, y los más usuales resolvedores secuenciales. En el segundo caso se resuelven las ecuaciones de transporte de un

parámetro a la vez y se itera el conjunto. La secuencia más usual es $u, v, w, p, \kappa, \varepsilon, f, h, y_i$.

Luego se recomputan las variables algebraicas (W, ρ , otras especies, μ_t , etc) y los coeficientes de las ecuaciones de transporte C, D, S_u, S_p , y se itera.

En ciertos casos es posible resolver simultáneamente las ecuaciones de Navier-Stokes y de continuidad (u, v, w y p) y a estos resolvidores se los denomina de Bloque Implícito.

La resolución del sistema de ecuaciones para un parámetro solo en todo el campo de flujo (N_x, N_y, N_z) puede hacerse en forma Directa o Iterativa, y las soluciones pueden ser Sobre o Sub-Relajadas.

9.2 Resolvedores directos

El sistema de ecuaciones lineales puede ser resuelto por el método de eliminación de Gauss, el algoritmo de Thomas (TDMA), la factorización LU y otros.

El *método de eliminación de Gauss* es el más sencillo aunque es computacionalmente costoso ya que requiere aproximadamente N^3 operaciones para resolver un sistema de N ecuaciones.

Dado el sistema

$$\{a_{ij}\}[\phi_i] = [c_i], \quad \{9.2\}$$

el procedimiento consiste en restar a la fila i la primera fila multiplicada por a_{i1} / a_{11} , con lo que se elimina ϕ_1 de la columna 1. Luego se resta a la fila i la segunda multiplicada por a_{i2} / a_{22} (los nuevos valores de a_{i2} y a_{22}) para eliminar ϕ_2 de la columna 2, y así siguiendo.

El método resulta en un sistema triangular:

$$\begin{aligned}
 a_{11}\phi_1 + a_{12}\phi_2 + \dots + a_{1n}\phi_n &= c_1 \\
 a'_{22}\phi_2 + \dots + a'_{2n}\phi_n &= c'_2 \\
 &\dots\dots\dots \\
 a'_{nn}\phi_n &= c'_n. \quad \{9.3\}
 \end{aligned}$$

Se obtiene ϕ_n de la última ecuación y se calculan los ϕ sustituyendo progresivamente hacia arriba los valores calculados.

El método de Gauss no es recomendable para grandes sistemas ya que se acumulan errores de truncado, reduciendo la precisión. La precisión se puede mejorar algo reordenando el sistema para que la diagonal a_{ii} sea predominante.

El *algoritmo de Thomas* es una variante del método de Gauss que se aplica si consideramos conocidos los valores laterales. Por ejemplo, en dos dimensiones,

$$a_P\phi_P = a_E\phi_E + a_O\phi_O + a_N\phi_N + a_S\phi_S + S_u. \{9.4\}$$

Asumimos que los valores N y S son conocidos por el momento y escribimos la ecuación como

$$b\phi_O + d\phi_P + a\phi_E = c. \quad \{9.5\}$$

Al recorrer la línea Oeste-Este en cuestión, el valor ϕ_O de la primera celda y el valor ϕ_E de la última celda son valores de frontera, conocidos, que podemos resumir en el término independiente del segundo término.

Queda entonces un sistema tri-diagonal:

$$\left\{ \begin{array}{cccccccc}
 d_1 & a_1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\
 b_2 & d_2 & a_2 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\
 0 & b_3 & d_3 & a_3 & 0 & \dots & 0 & 0 \\
 \dots & \dots \\
 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & b_{NN} & d_{NN} & 0
 \end{array} \right\} \left[\begin{array}{c} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \phi_3 \\ \dots \\ \phi_N \end{array} \right] = \left[\begin{array}{c} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ \dots \\ c_N \end{array} \right]. \quad \{9.6\}$$

La matriz de coeficientes puede llevarse a la forma triangular derecha de Gauss con la substitución

$$d_j = d_j - \frac{b_j}{d_{j-1}} a_{j-1}, \quad \{9.7\}$$

$$c_j = c_j - \frac{b_j}{d_{j-1}} c_{j-1}, \quad \{9.8\}$$

y las incógnitas se calculan por substitución de abajo hacia arriba como en el último paso del método de Gauss:

$$\phi_k = \frac{c_k - a_k \phi_{k+1}}{d_k}. \quad \{9.9\}$$

El *método LU* consiste en dividir la matriz de los coeficientes a , llamada A_{ij} en dos matrices L y U tales que

$$A = LU, \quad \{9.10\}$$

siendo L la matriz diagonal inferior y U la matriz diagonal superior.

Luego, abreviando la notación matricial,

$$LU\phi = c, \quad \{9.11\}$$

$$U\phi = L^{-1}c, \quad \{9.12\}$$

y obtenemos inmediatamente la forma final del método de Gauss

Los métodos para dividir la matriz A en dos matrices triangulares y para invertir L están disponibles en libros de texto y software por lo que se obvian.

En el *método de Bloque Implícito*, debido a Vanka, se aplican las ecuaciones de Navier-Stokes a las cuatro caras de la celda, con lo que las incógnitas son u_O, u_P, u_S, u_N y p_P :

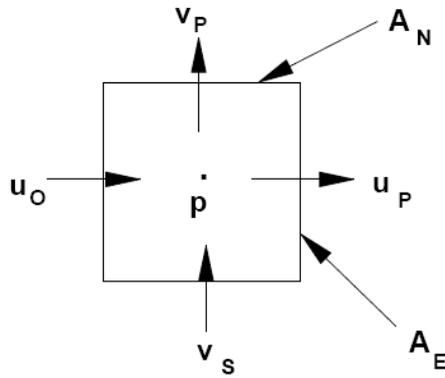


Figura 9.1: Bloque Implícito

A estas cuatro ecuaciones se añade la de continuidad escrita como

$$-\rho_O u_O A_O + \rho_P u_P A_E - \rho_S v_S A_S + \rho_P v_P A_N = 0. \quad \{9.13\}$$

El sistema que queda es de 5x5, de la forma:

u_i	u_j	v_s	v_l	p	
a_1	0	0	0	a_1	c_1
0	a_2	0	0	a_2	c_2
0	0	a_3	0	a_3	c_3
0	0	0	a_4	a_4	c_4
a_5	a_5	a_5	a_5	0	0

Este sistema se resuelve rápidamente haciendo

$$r_i = \frac{a_{5i}}{a_{ii}}; \quad i = 1-4, \quad \{9.14\}$$

con lo cual

$$p_p = -\frac{c_5 - c_1 r_1 - c_2 r_2 - c_3 r_3 - c_4 r_4}{a_{15} r_1 + a_{25} r_2 + a_{35} r_3 + a_{45} r_4}. \quad \{9.15\}$$

Luego,

$$v_p = \frac{c_4 - p_p a_{45}}{a_{44}}, \text{ etc.} \quad \{9.16\}$$

La ventaja del sistema de bloque implícito es que computa las velocidades y la presión satisfaciendo simultáneamente las ecuaciones de Navier-Stokes y la de continuidad.

El método no se aplica a las variables primitivas como se ha descripto sino a las correcciones a la iteración anterior. Si escribimos para la iteración $n+1$:

$$x^{n+1} = x^n + x', \quad \{9.17\}$$

y substituímos, obtenemos el mismo sistema con diferentes segundos términos; en particular, $c_5 \neq 0$.

9.3 Resolvedores iterativos

El más común de los resolvedores iterativos es el de Gauss-Seidel, que se ejemplifica con un sistema de 3×3 :

$$\begin{aligned} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 &= c_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 &= c_2 \\ a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + a_{33}x_3 &= c_3; \end{aligned} \quad \{9.18\}$$

que podemos reordenar como

$$\begin{aligned}
 x_1 &= \frac{c_1 - a_{12}x_2 - a_{13}x_3}{a_{11}} \\
 x_2 &= \frac{c_2 - a_{21}x_1 - a_{23}x_3}{a_{22}} \\
 x_3 &= \frac{c_3 - a_{31}x_1 - a_{32}x_2}{a_{33}}; \quad \{9.19\}
 \end{aligned}$$

Comenzando con un par de valores supuestos (x_2, x_3) , iteramos hasta obtener x_1, x_2 y x_3 con la precisión deseada.

El método de Gauss-Seidel puede ser mejorado mediante la sobre- o sub-relajación.

La sobre-relajación es un método de aceleración de la convergencia. Supongamos que el valor previo de ϕ era ϕ^n y el nuevo será ϕ^{n+1} . Luego, ϕ^n ha sido corregido en una cantidad $(\phi^{n+1} - \phi^n)$. Es entonces lógico suponer que un valor más apropiado para ϕ^{n+1} sería $\phi^{(n+1)'}$ tal que

$$\phi^{(n+1)'} = \phi^n + r(\phi^{n+1} - \phi^n); \quad 1 \leq r \leq 2. \quad \{9.20\}$$

Si $r = 1$ no hay sobre-relajación. Para $1 \leq r \leq 2$ estamos sobre-corrigiendo ϕ^n en la dirección correcta:

$$\phi^{(n+1)'} = \phi^n + r(\phi^{n+1} - \phi^n) = \phi^{n+1} + (r-1)(\phi^{n+1} - \phi^n). \quad \{9.21\}$$

vale decir, agregamos al nuevo valor ϕ^{n+1} un extra de la corrección $(\phi^{n+1} - \phi^n)$, siendo el coeficiente de sobrecorrección $(r-1)$, que vale entre 0 y 1.

Si r fuera mayor que 2 el cambio en una iteración

$$\phi^{(n+1)'} - \phi^{n+1} = (r-1)(\phi^{n+1} - \phi^n). \quad \{9.22\}$$

iría aumentando en cada iteración lo que haría divergente al problema.

El uso de sobre-relajación puede acelerar la solución un orden de magnitud o más, por lo que es muy aconsejable. El valor óptimo de r no es en general calculable, pero valores de 1.5 a 2 son usuales.

Si el valor de r fuera menor que 1 el resultado es corregido en menos que la cantidad $(\phi^{n+1} - \phi^n)$, procedimiento conocido como sub-relajación. Este método puede ser necesario para reducir las oscilaciones de la solución en las primeras iteraciones, en particular si las condiciones iniciales no son muy adecuadas.

En general conviene comenzar a iterar con sub-relajación, pasando a sobre-relajación cuando la solución comienza a estabilizarse hacia la convergencia.

Con respecto al barrido de las celdas, asumimos que los índices (i,j) identifican filas y columnas de la grilla bidimensional. El método de Gauss-Seidel puede aplicarse barriendo i y j en cualquier orden. Sin embargo, normalmente se barre un índice primero y luego se incrementa el otro. Esto se conoce como barrido por líneas.

En este caso, si se utiliza el stencil de cinco puntos:

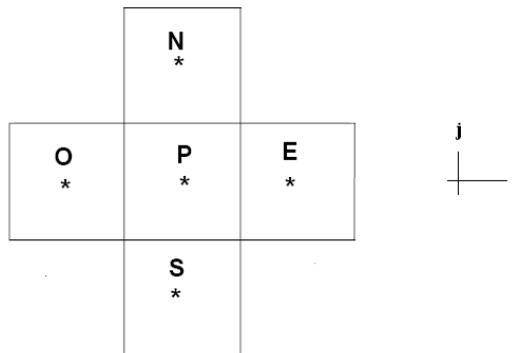


Figura 9.2: Stencil de cinco puntos

Cada ecuación sólo involucra tres incógnitas (P, E y N), ya que O se habría obtenido de la ecuación en $(i-1)$ y S de la línea en $(j-1)$.

Luego, la línea i puede ser resuelta por TDMA o por Gauss-Seidel. En ambos casos puede aplicarse un factor de relajación.

Alternativamente puede resolverse primero una línea y luego la columna que la intercepta en P. Para ahorrar espacio de almacenamiento el método más común es el Implícito de Dirección Alternada (ADI), en el que primero se barren todas las filas y se almacenan las soluciones. Luego se barren las columnas utilizando las soluciones anteriores para las incógnitas (N y E) y los valores recién calculados para las conocidas (O y S). Es decir,

- Resolver por iteración barriendo por línea i . Los valores así obtenidos son $\phi^{k'}$. Los anteriores, ϕ^k . En esta pasada, S y O son $\phi^{k'}$, N y E son ϕ^k .
- Resolver por iteración barriendo por columnas j . Los valores así obtenidos son ϕ^{k+1} . Los anteriores, $\phi^{k'}$. En esta pasada, S y O son ϕ^{k+1} , N y E son $\phi^{k'}$.

Igualmente puede utilizarse un factor de relajación en líneas o columnas.

9.4 Método the Runge-Kutta

Para flujos en desarrollo en el tiempo el resolvidor iterativo más usual es el método de Runge-Kutta, aunque es igualmente utilizable para flujos estables en el tiempo.

La ecuación general de transporte se escribe:

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{\phi})}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_j\tilde{\phi})}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho}D_\phi \frac{\partial\tilde{\phi}}{\partial x_j} \right) + \overline{S^\phi}, \quad \{9.23\}$$

que también podemos escribir

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{\phi})}{\partial t} = f(\bar{\rho}\tilde{\phi}, t). \quad \{9.24\}$$

El método de Runge-Kutta se aplica a la ecuación general

$$\frac{\partial x}{\partial t} = f(x, t). \quad \{9.25\}$$

Si bien se puede plantear el método en un número variable de pasos y en forma explícita o implícita, la forma más usual es la explícita de cuatro pasos.

Sea x^n el valor actual de la función; el valor x^{n+1} luego de un paso de tiempo h viene dado por

$$x^{n+1} = x^n + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4), \quad \{9.26\}$$

donde los valores intermedios se calculan como

$$k_1 = hf(x^n, t), \quad \{9.27\}$$

$$k_2 = hf\left(x^n + \frac{1}{2}k_1, t + \frac{1}{2}h\right), \quad \{9.28\}$$

$$k_3 = hf\left(x^n + \frac{1}{2}k_2, t + \frac{1}{2}h\right), \quad \{9.29\}$$

$$k_4 = hf(x^n + k_3, t + h). \quad \{9.30\}$$

Por ejemplo, tomemos la ecuación diferencial

$$\frac{dx}{dt} = xt \quad \{9.31\}$$

$$t^0 = 0 \quad \{9.32\}$$

$$x^0 = 1 \quad \{9.33\}$$

cuya solución es

$$x = e^{t^2/2}, \quad \{9.34\}$$

y hallemos su valor para $h=0.1$.

$$k_1 = hf(x^0, t^0) = 0, \quad \{9.35\}$$

$$k_2 = hf\left(x^n + \frac{1}{2}k_1, t + \frac{1}{2}h\right) = .005, \quad \{9.36\}$$

$$k_3 = hf\left(x^n + \frac{1}{2}k_2, t + \frac{1}{2}h\right) = 0.0050125, \quad \{9.37\}$$

$$k_4 = hf(x^n + k_3, t + h) = 0.010050125. \quad \{9.38\}$$

Luego,

$$x^{n+1} = x^n + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) = 1.00501252. \quad \{9.39\}$$

El valor exacto es 1.00501252.

Para flujos estacionarios el valor de la ecuación (9.23), vale decir, k_j , debe ser cero. El paso de tiempo h puede ser variable para cada celda.

Para flujos no estacionarios empleando esquemas explícitos el paso de tiempo Δt debe ser el mismo en todas las celdas de cálculo y debe cumplir con la condición de Courant-Friedrich-Levy

$$\frac{u\Delta t}{\Delta x} \leq 1, \quad \{9.40\}$$

u otra condición de estabilidad; el método de Runge-Kutta se emplea iterativamente dividiendo Δt en un número entero de partes de tamaño h .

9.5 Convergencia, residuos

En una resolución iterativa, o incluso en un paso de una resolución iterativa que incluya un resolvidor directo, las soluciones ϕ^k que se obtengan no satisfarán las ecuaciones lineales perfectamente, ya sea porque la solución sólo incluye un número finito de pasos, o por errores de truncado.

La diferencia entre el valor del segundo y primer miembros de la ecuación lineal es el residuo de esa celda:

$$R(i, i, k) = \sum (a\phi)_{\text{vecinos}} + S_u - a_p\phi_p. \quad \{9.41\}$$

La convergencia es el proceso por el cual la solución de las ecuaciones discretizadas se aproxima a la solución de las ecuaciones de transporte. Es posible demostrar que ambas soluciones tienden a confundirse para una grilla infinitamente fina. Sin embargo, para una grilla finita la solución de las ecuaciones discretizadas, por más que

el residuo sea cero en todos los puntos, no será igual a la solución de las ecuaciones de transporte.

Hecha esta salvedad, se denomina más prácticamente convergencia a la reducción monotónica de residuos, lo que indica la bondad del conjunto de valores de las variables como solución del sistema de ecuaciones lineales.

La forma habitual de juzgar la convergencia es adoptar un valor absoluto de los residuos y observar su disminución, calculando

$$\frac{\sum_{i,j,k} |R(i, j, k)|}{N \text{ Ref}} \quad \{9.42\}$$

El valor de referencia *Ref* puede ser un valor significativo de ϕ (máximo, mínimo, valor de entrada)

Usualmente la evolución del residuo total $\sum_{i,j,k} |R(i, j, k)|$ con el número de iteraciones varía como lo ejemplifica la figura:

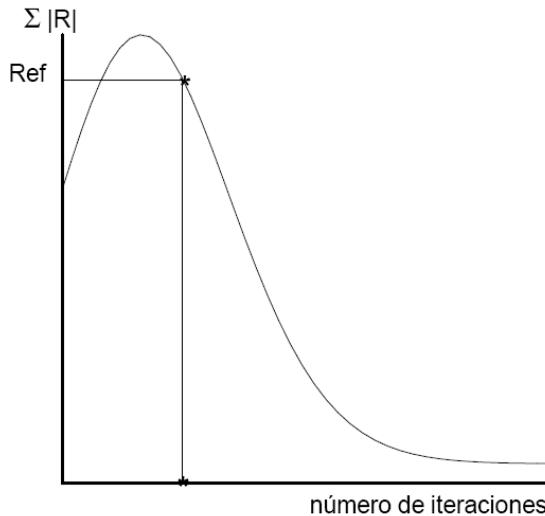


Figura 9.3: Residuos y convergencia

Si el programa de cálculo permite arrancar y parar, o bien si se almacena el residuo total, es aconsejable utilizar como valor de

referencia el primer residuo de la curva descendente, como indica la figura.

La curva debiera tender a cero. Si no lo hace (residuo irreducible) usualmente se debe a una o más de tres razones:

- Hay un error de programación
- Valores de frontera mal elegidos
- No se ha respetado el principio de consistencia, que indica que a ambos lados de una cara de la celda debe utilizarse el mismo modelo de discretización

Si la curva desciende monotónicamente se continúa iterando

hasta que el valor de $\frac{\sum_{i,j,k} |R(i,j,k)|}{N \text{ Ref}}$ haya descendido hasta un nivel preestablecido (10^{-4} o 10^{-5}), cuando se considerará alcanzada la convergencia.

No obstante lo anterior es conveniente analizar los residuos individuales, al menos visualmente, para asegurar que no haya una o más celdas con residuos significativos o irreducibles.

Esto puede hacerse graficando a intervalos regulares el residuo por planos como superficie tridimensional:

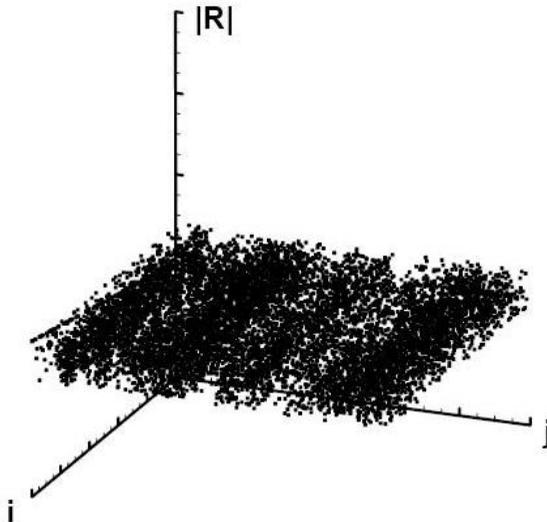


Figura 9.4: Residuos en un plano

Durante el proceso de solución es común observar oscilaciones en los residuos, que debieran amortiguarse con la aproximación a la convergencia. Estas oscilaciones son normales y se deben a la naturaleza de las ecuaciones de transporte.

Por ejemplo, si se adopta la grilla de 3×3 , la ecuación diferencial de transporte queda discretizada en una ecuación lineal que, a lo sumo, conecta los valores de tres celdas contiguas.

Luego, una corrección en una celda no afecta más allá de las dos adyacentes, hasta el próximo paso de iteración.

Si se barre por líneas y columnas, el residuo de una celda se va transfiriendo a razón de una línea/columna por iteración, proceso que puede observarse claramente en un gráfico por planos como el de la figura anterior. La figura siguiente ejemplifica esto:

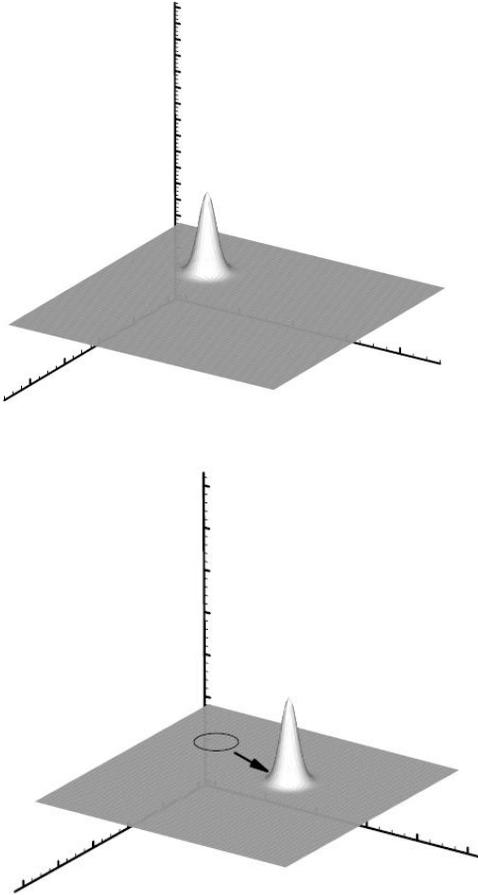


Figura 9.5: Residuos en dos pasos de iteración

Este proceso de barrido del error continúa (y se inicia) en las fronteras y sólo se reduce con el número de iteraciones a medida que disminuyen los residuos en general.

Sin embargo, es importante observar la evolución de los residuos para asegurarse que estos picos de error sean acotados y vayan siendo reducidos.

En otros términos, el sistema de ecuaciones discretizadas actúa como un filtro pasabajos, atenuando rápidamente los errores de alta frecuencia (celda a celda) y mucho más lentamente los de baja frecuencia, mayor longitud de onda (varias celdas).

El error de más baja frecuencia (un valor de residuo constante en toda la grilla) sólo puede deberse a inconsistencia en las condiciones de frontera, y no debiera existir.

Los residuos de más baja frecuencia son los que más tardan en reducirse y consumen la mayor parte del esfuerzo de computación. Para reducirlos puede hacerse una de dos opciones:

- Usar una grilla más gruesa
- Usar un stencil más extenso

Ambas son indeseables, la primera porque atenta contra la exactitud de la solución, y la segunda porque requiere un mayor esfuerzo computacional y complica las condiciones de borde.

Sin embargo ambas opciones se utilizan normalmente. La primera, aplicando el método multigrilla ya visto, por el cual cada cierto número de iteraciones en la grilla fina se pasan todos los resultados a una grilla más gruesa y se realiza otro número de pases de iteración para reducir los residuos de baja frecuencia. Luego se vuelven a pasar todos los resultados a la grilla fina y se continúa resolviendo.

La segunda opción consiste en el uso de métodos de discretización de orden superior que involucran stenciles de 5x5, 7x7, etc., a veces combinados con métodos como Predictor/Corrector, FCT, etc.

No es seguro que estos métodos reduzcan el esfuerzo computacional requerido, aunque pueden producir reducciones sustanciales del tiempo total de cómputo.

Referencias al Capítulo 9

- Chapra, S. C., and Canale, R. P.; Métodos numéricos para ingenieros; McGraw-Hill, 1992
- Vanka, S. P., “Block-Implicit Calculation of Steady Turbulent Recirculating Flows,” International Journal of Heat and Mass Transfer, 28:11, 2093-2103, 1985.

CAPÍTULO 10

Velocidades de reacción dominadas por la cinética y por la mezcla

10.1 Reactantes no premezclados

10.1.1 Cinética dominante:

Vimos en el Capítulo 4 que la ecuación de transporte de la especie química Y_i era:

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{y}_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_j\tilde{y}_i)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho}D_i \frac{\partial\tilde{y}_i}{\partial x_j} \right) + W_i\bar{w}_i, \quad \{10.1\}$$

donde

$$\bar{w}_i = (\nu'_i - \nu_i)\bar{w}, \text{ y} \quad \{10.2\}$$

$$\bar{w} \cong k(\tilde{T})\bar{\rho}^{\sum \nu_i} \frac{\prod_i \tilde{y}_i^{\nu_i}}{\prod_i W_i^{\nu_i}}. \quad \{10.3\}$$

La velocidad de reacción puede utilizarse para estimar un tiempo característico de la química τ_c ; si también definimos un tiempo característico de la mezcla τ_m podemos definir un número de Damkohler

$$Da = \tau_m / \tau_c \quad \{10.4\}$$

de tal modo que si $Da \ll 1$ el tiempo $\tau_c \ll \tau_m$ y la velocidad de reacción es la que domina por ser más lenta que la mezcla.

En otras palabras, si $Da \ll 1$ tenemos el caso en que la cinética es dominante.

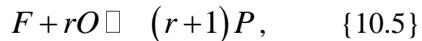
10.1.2 Mezcla dominante

Si la cinética es mucho más rápida que la mezcla, el estado instantáneo de la mezcla estará totalmente determinado por la composición original, es decir, por la fracción de mezcla f .

En el caso de flujo turbulento, la reacción de mezcla f estará descrita por una función aleatoria, y se conocerá su forma y sus momentos de primero, segundo, etc, órdenes.

10.1.3 Modelo de mezcla rápida

Para el caso de mezcla dominante (mezcla lenta respecto a la cinética), basamos el análisis en la ecuación de un solo paso introducido en el Capítulo 2. Consideremos la reacción



donde

F: “fuel”, uno de los reactantes, el que corresponde a $f=1$

O: “oxidante”, el reactante que corresponde a $f=0$

r: factor estequiométrico, kg de oxidante por kg de F

P: productos

La reacción está escrita en forma estequiométrica, y sin balasto o especies inertes (ej: N_2)

En este caso deducimos inmediatamente que hay dos zonas, $f \geq f_s$ y $f \leq f_s$, donde f_s es el valor estequiométrico de f .

Para $f \geq f_s$

$$\begin{cases} y_F = y_B (f - f_s) \\ y_O = 0 \\ y_P = (1+r) y_B f_s (1-f) \end{cases}, \{10.6\}$$

y para $f \leq f_s$

$$\begin{cases} y_F = 0 \\ y_O = ry_B (f_s - f) \\ y_P = (1+r)y_B f (1-f_s) \end{cases}, \{10.7\}$$

donde

$$\begin{cases} y_B = \frac{y_{F,1}}{1-f_s} = \frac{y_{O,2}}{rf_s} \\ f_s = \frac{y_{O,2}}{ry_{F,1} + y_{O,2}} \end{cases}, \{10.8\}$$

siendo

$$\begin{cases} y_{F,1} = y_F \text{ en el chorro 1} \\ y_{O,2} = y_O \text{ en el chorro 2} \end{cases}. \{10.9\}$$

Esto produce el gráfico y-f típico de la reacción de un solo paso visto en (2.2).

La fracción de mezcla promedio responde a la ecuación de transporte

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{f})}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_j\tilde{f})}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho}D_f \frac{\partial\tilde{f}}{\partial x_j} \right). \{10.10\}$$

Más adelante se verán las posibilidades de modelar otros momentos de f a fin de definir la ecuación de distribución de f en flujo turbulento. Por el momento definimos la ecuación de distribución turbulenta

$$P = P(\rho, f, \vec{x}) \quad \{10.11\}$$

que nos determina la probabilidad de encontrar simultáneamente los valores instantáneos de ρ y f en el punto $\vec{x} \equiv x, y, z$.

De aquí definimos la función Favre de distribución

$$\tilde{P}(f, \bar{x}) = \frac{1}{\bar{\rho}} \int_0^\infty \rho P(\rho, f, \bar{x}) d\rho, \quad \{10.12\}$$

de modo que si $Q=Q(f)$

$$\tilde{Q} = \int_0^1 Q(f) \tilde{P} df, \text{ etc.} \quad \{10.13\}$$

En el caso de cinética rápida podemos considerar que las concentraciones son las de equilibrio (a esa temperatura y presión), por lo que

$$y_i = y_i^e(f). \quad \{10.14\}$$

Luego,

$$y_i(\bar{x}) = \int_0^1 y_i^e(f) \tilde{P} df, \quad \{10.15\}$$

$$\tilde{T}(\bar{x}) = \int_0^1 T^e(f) \tilde{P} df, \quad \{10.16\}$$

$$\bar{\rho}(\bar{x}) = \frac{\int_0^\infty \rho^e(f) P(\rho^e(f), f, \bar{x}) d\rho}{\tilde{P}(f, \bar{x})} = \frac{\rho^e(f) P(f, \bar{x})}{\tilde{P}(f, \bar{x})}. \quad \{10.17\}$$

En la última

$$\bar{\rho}(\bar{x}) \tilde{P}(f, \bar{x}) = \rho^e(f) P(f, \bar{x}), \quad \{10.18\}$$

$$\bar{\rho}(\bar{x}) \frac{\tilde{P}(f, \bar{x})}{\rho^e(f)} = P(f, \bar{x}). \quad \{10.19\}$$

Integrando con respecto a f

$$\bar{\rho}(\bar{x}) = \frac{1}{\int_0^1 \frac{\tilde{P}(f, \bar{x})}{\rho^e(f)} df}, \quad \{10.20\}$$

es decir

$$\frac{1}{\bar{\rho}} = \int_0^1 \frac{\tilde{P}(f)}{\rho^e(f)} df, \quad \{10.21\}$$

o bien

$$\bar{\rho} = \int_0^1 \rho^e(f) P(f) df. \quad \{10.22\}$$

Con estas definiciones podemos integrar las expresiones instantáneas de y_F , y_O e y_P para hallar los promedios:

$$\tilde{y}_F = y_B \int_{f_s}^1 (f - f_s) \tilde{P} df, \quad \{10.23\}$$

$$\tilde{y}_O = r y_B \int_0^{f_s} (f_s - f) \tilde{P} df, \quad \{10.24\}$$

$$\tilde{y}_P = (r+1) y_B \left[(1 - f_s) \int_0^{f_s} f \tilde{P} df + f_s \int_{f_s}^1 (1 - f) \tilde{P} df \right], \quad \{10.25\}$$

donde hemos omitido \vec{x} ya que estas expresiones se aplican a un punto $\vec{x} \equiv x, y, z$

El cambio de expresiones entre la zona pobre ($f \leq f_s$) y rica ($f \geq f_s$) puede obviarse utilizando las expresiones

$$\tilde{y}_F = y_F^e(\tilde{f}) + \alpha y_B g^{1/2} J_1 \left(\frac{f_s - \tilde{f}}{g^{1/2}} \right), \quad \{10.26\}$$

$$\tilde{y}_O = y_{FO}^e(\tilde{f}) + \alpha r y_B g^{1/2} J_1 \left(\frac{f_s - \tilde{f}}{g^{1/2}} \right), \quad \{10.27\}$$

$$\tilde{y}_P = y_P^e(\tilde{f}) - \alpha (r+1) y_B g^{1/2} J_1 \left(\frac{f_s - \tilde{f}}{g^{1/2}} \right), \quad \{10.28\}$$

donde $g = f'^2$ es la varianza o segundo momento de f , y

$$J_1 \left(\frac{f_s - \tilde{f}}{g^{1/2}} \right) = \int_0^{f_s} \frac{f_s - \tilde{f}}{g^{1/2}} \tilde{P} df - H(f_s - \tilde{f}) \frac{f_s - \tilde{f}}{g^{1/2}}, \quad \{10.29\}$$

siendo $H(f_s - \tilde{f})$ la función de Heaviside

$$\begin{aligned} H &= 1 \text{ para } f_s - \tilde{f} \geq 0 \\ H &= 0 \text{ para } f_s - \tilde{f} \leq 0 \end{aligned} \quad \{10.30\}$$

Los valores de equilibrio como $y_F^e(\tilde{f})$ se obtienen de programas de equilibrio como ya se vió, entrando con \tilde{f} y \tilde{T} . Para reacciones irreversibles de un solo paso $\alpha = 1$, y para otras, algo menor (digamos, 0.8).

J_1 es la integral de falta de mezclada, “unmixedness”, que sólo es función de la función de distribución \tilde{P} . En la variable reducida $z_s = \frac{f_s - \tilde{f}}{g^{1/2}}$:

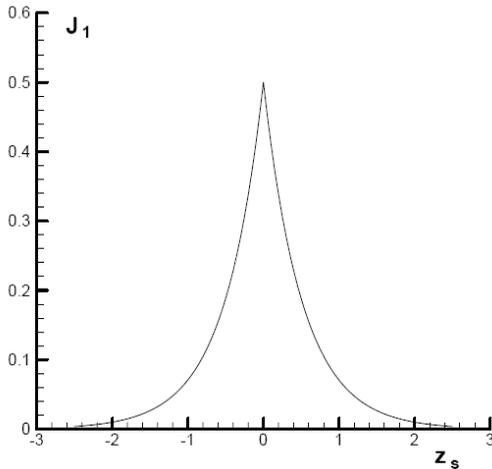


Figura 10.1: Función J_1

La forma de J_1 es bastante independiente de la función \tilde{P} , y puede ser simplemente aproximada por

$$J_1(z_s) = 0.45 e^{-|z_s|} \quad \{10.31\}$$

Finalmente, para $\bar{\rho}$ y \tilde{T} :

$$\frac{1}{\bar{\rho}} = \frac{1}{\rho(\tilde{f})} - \alpha \left[\frac{1}{\rho(f_s)} - \frac{1-f_s}{\rho(0)} + \frac{f_s}{\rho(1)} \right] J_1 g^{1/2}, \quad \{10.32\}$$

$$\tilde{T} = T(\tilde{f}) - \alpha \frac{[T(f_s) - (1-f_s)T(0) + f_s T(1)]}{f_s(1-f_s)} J_1 g^{1/2}, \quad \{10.33\}$$

donde $\rho(0) = \rho(f = 0, \text{ equilibrio})$,
 $T(1) = T(f = 1, \text{ equilibrio})$, etc.

Este modelo entonces permite calcular los promedios de concentraciones, densidad y temperatura conociendo los valores de \tilde{f} , \tilde{g} y el equilibrio químico. Como las condiciones de equilibrio químico son a su vez función de T, se requiere una solución iterativa. Más comúnmente se adoptan como valores de equilibrio los de la reacción instantánea, dada por las relaciones lineales.

$$y_F^e(\tilde{f}) = y_F(\tilde{f}) = y_B(\tilde{f} - f_s) \text{ para } f \geq f_s \quad \{10.34\}$$

$$= 0 \text{ para } f \leq f_s, \text{ etc.}$$

Queda por determinar la función de distribución

10.1.4 Funciones de distribución

Si representamos la probabilidad de f en función de f para distintos tipos de casos de mezcla obtenemos los diagramas típicos:

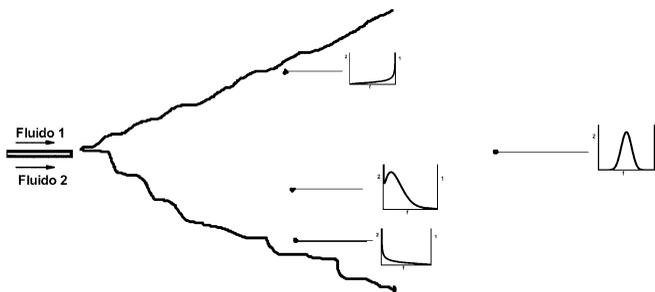


Figura 10.2: Distribuciones de probabilidades

Los picos en cero y uno indican que hay un número (alto) de casos de medición de fluido puro.

Una forma de modelar la función de distribución de f es asumir un grado de intermitencia \tilde{I} tal que si $\tilde{I} = 0$ estamos en uno de los fluidos puros, y si $\tilde{I} = 1$ estamos en el fluido mezcla. El fluido mezcla tiene una función de distribución de f $\tilde{P}_1(f)$, de media \tilde{f}_t y varianza $\tilde{g}_t = f_t'^2$, y definimos

$$\tilde{f} = \tilde{I} \tilde{f}_t, \quad \{10.35\}$$

$$\tilde{g} = \tilde{I} \left[\tilde{g}_t + (\tilde{f}_t - \tilde{f})^2 \right] + (1 - \tilde{I})(\tilde{f})^2, \quad \{10.36\}$$

$$\tilde{I} = \frac{1.25}{\frac{\tilde{g}}{(\tilde{f})^2} + 1}, \quad \{10.37\}$$

$$\tilde{g}_t = \frac{1}{2}(\tilde{f}_t)^2, \quad \{10.38\}$$

$$\tilde{P}_1(f) = \frac{1.023}{\sqrt{2\pi}} e^{-\left(\frac{(f - \tilde{f}_t)^2}{2\tilde{g}_t}\right)} \quad (\text{Gaussiana}), \quad \{10.39\}$$

y

$$\tilde{P}(f) = (1 - \tilde{I})\delta(f) + \tilde{I}\tilde{P}_1(f). \quad \{10.40\}$$

El procedimiento es como sigue:

- 1) Obtener \tilde{f} y \tilde{g} de ecuaciones de transporte.
- 2) Calcular \tilde{f}_t y \tilde{g}_t .
- 3) Calcular \tilde{I} , $0 \leq \tilde{I} \leq 1$.
- 4) Formar $\tilde{P}(f)$

Otro método consiste en obtener \tilde{f} y \tilde{g} y utilizar la función

Beta:

$$\tilde{P}(f) = \frac{\Gamma(\beta_1 + \beta_2)}{\Gamma(\beta_1)\Gamma(\beta_2)} f^{\beta_1-1} (1-f)^{\beta_2-1}, \quad \{10.41\}$$

donde

$$\Gamma(\beta) = \int_0^1 x^{\beta-1} e^{-x} dx, \quad \{10.42\}$$

$$\beta_1 = \tilde{f} \left[\frac{\tilde{f}(1-\tilde{f})}{\tilde{g}} - 1 \right], \quad \text{y} \quad \{10.43\}$$

$$\beta_2 = (1-\tilde{f}) \left[\frac{\tilde{f}(1-\tilde{f})}{\tilde{g}} - 1 \right], \quad \{10.44\}$$

cuya forma (para una media de 0.5) es:

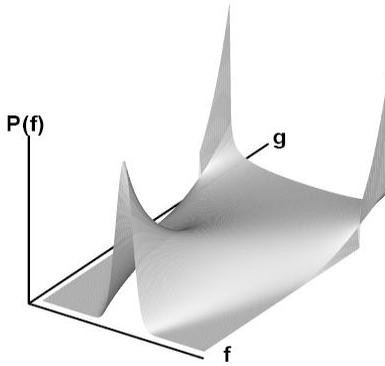


Figura 10.3: Función Beta

Es decir, aparenta ser adecuada para flujos de mezcla, con picos en $f=0$ y $f=1$ proporcionales a la posición de \tilde{f} .

10.1.5 El segundo momento de f

Una ecuación de transporte para $\tilde{g} = f^{n^2}$ puede obtenerse de la ecuación de f , resultando

$$\bar{\rho} \tilde{u}_j \frac{\partial \tilde{g}}{\partial x_j} = -2 \overline{\rho u_j f^n} \frac{\partial \tilde{f}}{\partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\overline{\rho u_j f^{n^2}} \right) - 2 \rho D \overline{\left(\frac{\partial f^n}{\partial x_j} \right)^2}. \quad \{10.45\}$$

Esta ecuación es modelada según Jones y Whitelaw como

$$\bar{\rho} \tilde{u}_j \frac{\partial \tilde{g}}{\partial x_j} = C_{D,1} \left(\frac{\partial \tilde{f}}{\partial x_j} \right)^2 + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_t}{\sigma_g} \frac{\partial \tilde{g}}{\partial x_j} \right) - C_{D,2} \frac{\bar{\rho} \tilde{\epsilon}}{\tilde{\kappa}} \tilde{g}. \quad \{10.46\}$$

donde $C_{D,1} = 2.8$ y $C_{D,2} = 2.0$.

Notar que $\left(\frac{\partial \tilde{f}}{\partial x_j}\right)^2$ es en realidad

$$\frac{\partial \tilde{f}}{\partial x_j} \frac{\partial \tilde{f}}{\partial x_j} \equiv \left(\frac{\partial \tilde{f}}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial \tilde{f}}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial \tilde{f}}{\partial z}\right)^2. \quad \{10.47\}$$

El término

$$\chi = 2D \frac{\partial f''}{\partial x_j} \frac{\partial f''}{\partial x_j} \quad \{10.48\}$$

es la disipación del escalar, y es la medida en que f'' desaparece, o bien en que desaparece la inhomogeneidad de la mezcla (aunque no la turbulencia). En el modelo de Jones y Whitelaw

$$\tilde{\chi} \approx 2\tilde{g} \frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{\kappa}}, \quad \{10.49\}$$

lo que implica relacionar la disipación escalar como el cociente de la dispersión \tilde{g} y la escala de tiempo de la turbulencia κ / ε .

Este modelo es muy importante ya que relaciona la mezcla (basada en el escalar conservado f) y su disipación u homogeneización con el nivel de turbulencia y su velocidad de disipación ε .

10.1.6 La velocidad de reacción

Bilger ha demostrado que

$$\omega_i = -\rho D \frac{\partial f}{\partial x_j} \frac{\partial f}{\partial x_j} \frac{d^2 y_i^e}{df^2}. \quad \{10.50\}$$

Tomando promedios, y con

$$\chi = 2D \frac{\partial f}{\partial x_j} \frac{\partial f}{\partial x_j} \quad \{10.51\}$$

$$\bar{\omega}_i = -\frac{1}{2} \bar{\rho} \int_0^1 \int_0^\infty \frac{d^2 y_i^e}{df^2} \tilde{P}(\chi, f) d\chi df, \quad \{10.52\}$$

siendo $\tilde{P}(\chi, f)$ la función de distribución Favre de χ y f conjuntas.

Para el combustible y para química rápida, la segunda derivada de y_F^e sólo existe cerca de f_s (el quiebre del diagrama). Luego, la integral respecto a f se simplifica y nos queda

$$\bar{\omega}_F = -\frac{1}{2} \bar{\rho} y_B \tilde{\chi}(f_s) \tilde{P}(f_s), \quad \{10.53\}$$

donde $\tilde{\chi}(f_s)$ es la media de χ en $f = f_s$.

Notar que esta fórmula relaciona la disipación del escalár, $\tilde{\chi}$, con la velocidad de reacción $\bar{\omega}_F$. Estamos considerando cinética rápida por lo que es razonable esperar que la velocidad de reacción dependa más de la mezcla que de la composición.

10.1.7 El método EBU

El modelo de Eddy Break-up (ruptura de torbellinos) se debe a Magnussen y otros. En esencia dice que la velocidad de reacción en el caso de cinética rápida es función de una concentración y un tiempo.

La concentración es la del componente deficiente, o de menor concentración. En nuestra nomenclatura, será y_F o bien y_O / r .

El tiempo es aquel de vida de un torbellino, ya que en una situación de mezcla turbulenta dos torbellinos, uno de F y otro de O deben destruirse para que las dos especies se mezclen hasta nivel molecular, y la reacción química pueda tener lugar. Un tiempo adecuado es κ / ε . Luego,

$$\bar{\omega}_F = -A_1 \bar{\rho} \frac{\varepsilon}{\kappa} \bar{y}_L, \quad \{10.54\}$$

$$\bar{y}_L \equiv \bar{y}_F; \bar{y}_O / r, \quad \{10.55\}$$

donde A_1 , es una constante empírica.

El valor de A_1 , es comúnmente 2 aunque varios autores han propuesto desde 0.4 hasta 7. Si adoptamos al modelo de Jones y Whitelaw, donde

$$\tilde{\chi}_s \square 2 \frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{\kappa}} \tilde{g}, \quad \{10.56\}$$

y sabiendo que, de (10.3)

$$\bar{y}_L = y_B \tilde{g}^{1/2} J_1(z_s), \quad \{10.57\}$$

resulta

$$A_1 = \frac{\tilde{P}(f_s)}{J_1(z_s)}. \quad \{10.58\}$$

Estos valores han sido calculados para la función Beta y Gaussiana, y sus gráficas son típicamente:

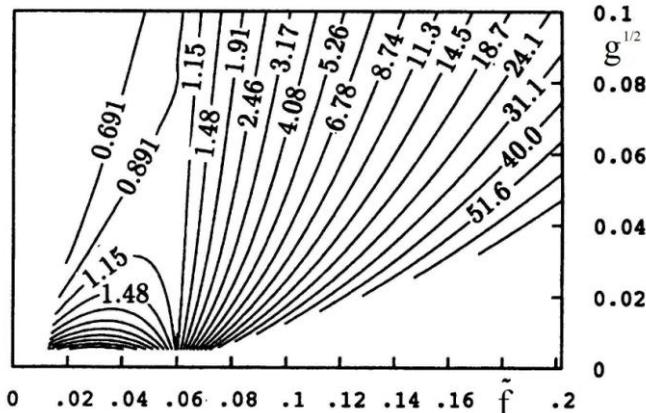


Figura 10.4: Parámetro A_1

Una forma empírica de A_1 es

$$\bar{\omega}_F = 4\bar{\rho} \frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{\kappa}} \frac{\bar{y}_F}{(1 + r\bar{y}_F / \bar{y}_O)} \sqrt{\frac{r\bar{y}_F}{\bar{y}_O}}. \quad \{10.59\}$$

En resumen, el modelo EBU de Spalding tiene una base teórica (con la hipótesis de Jones y Whitelaw), y se logran reproducir los valores de las constantes experimentales.

10.1.8 Velocidad de reacción

En el caso en que la velocidad de reacción esté dominada por la mezcla (cinética rápida) vimos que una expresión adecuada es la forma EBU

$$\bar{\omega}_{F,EBU} = -A_1 \bar{\rho} \frac{\mathcal{E}}{\kappa} \bar{y}_L, \quad \{10.60\}$$

Si la velocidad de reacción es dominada por la cinética, es decir, la cinética es mucho más lenta que la mezcla, las variaciones turbulentas en la composición media pueden ser despreciadas y escribir la velocidad de reacción, por ejemplo, para la reacción $F + rO \rightarrow (r+1)P$, como

$$\bar{\omega}_{F,C} = -\bar{\rho}^2 \bar{y}_F \bar{y}_O k e^{-E/RT}, \quad \{10.61\}$$

es decir, la expresión de Arrhenius con las concentraciones medias.

Para formar la expresión general la forma empírica más adecuada parece ser la media armónica, para dar preponderancia a la velocidad de reacción más lenta de las dos:

$$\bar{\omega}_F = \left(\frac{1}{\bar{\omega}_{F,EBU}} + \frac{1}{\bar{\omega}_{F,C}} \right)^{-1}. \quad \{10.62\}$$

10.2 Reactantes premezclados

En el apartado (4.6) hemos visto la ecuación de transporte del avance de reacción:

$$\frac{\partial(\bar{\rho} \tilde{\Theta})}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{\Theta})}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho} D_{\Theta} \frac{\partial \tilde{\Theta}}{\partial x_j} \right) + \bar{w}_{\Theta}. \quad \{10.63\}$$

Queda por definir el modelo de la velocidad de reacción \bar{w}_{Θ} .

10.2.1 Química rápida

Par el caso en que la zona de reacción es delgada, vale decir, química rápida, se puede aplicar el modelo EBU como

$$\bar{w}_{\Theta} \square C_{EBU} \bar{\rho} \frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{K}} \sqrt{\Theta}^{n^2}, \quad \{10.64\}$$

donde C_{EBU} es del orden de A_1 .

Si la zona de reacción es muy delgada el avance de reacción Θ toma solo dos valores, cero en los reactantes y 1 en los productos. Luego, podemos aproximar $\Theta^2 = \Theta$ y modelar

$$\bar{\rho} \Theta^{n^2} = \bar{\rho} \tilde{\Theta} (1 - \tilde{\Theta}), \quad \{10.65\}$$

con lo que queda

$$\bar{w}_{\Theta} \square C_{EBU} \bar{\rho} \frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{K}} \tilde{\Theta} (1 - \tilde{\Theta}). \quad \{10.66\}$$

10.2.2 Química lenta

En este caso modelamos en forma similar al caso no premezclado. Asumimos que existe un modelo de composición de la mezcla en función del avance de reacción, tal como fue descrito en el apartado (2.2) o bien cinético (por ejemplo, de equilibrio químico) por lo que, si definimos una función de distribución de probabilidades $P(\Theta)$ las fracciones de masa se podrán obtener de

$$\tilde{y}_i = \int_0^1 y_i(\Theta) \tilde{P}(\Theta) d\Theta. \quad \{10.67\}$$

Igualmente la velocidad de reacción se obtendrá como

$$\bar{\omega}_\Theta = \int_0^1 \omega(\Theta) \tilde{P}(\Theta) d\Theta. \quad \{10.68\}$$

Para continuar es necesario definir la función de distribución que usualmente se asume ser la función Beta. Esto requiere el cómputo de la varianza $\tilde{q} = \Theta^{n^2}$.

10.2.3 El segundo momento del avance de reacción

Una ecuación de transporte para la varianza del avance de reacción se puede deducir a partir de la de avance {10.63}, obteniéndose:

$$\begin{aligned} \bar{\rho} \tilde{u}_j \frac{\partial \tilde{q}}{\partial x_j} = \\ 2\bar{\rho} D \left(\frac{\partial \tilde{q}}{\partial x_j} \right)^2 + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho} D_{ef} \frac{\partial \tilde{q}}{\partial x_j} \right) - 2 \frac{\bar{\rho} \tilde{\varepsilon}}{\tilde{\kappa}} \tilde{q} + 2 \overline{\Theta^n \omega(\Theta)}. \end{aligned} \quad \{10.69\}$$

Se aprecia que es muy similar a la ecuación de la varianza de fracción de mezcla, salvo por el agregado de la última correlación, que se calcula como

$$\overline{\Theta^n \omega(\Theta)} = \int_0^1 (\Theta - \tilde{\Theta}) \omega(\Theta) \tilde{P}(\Theta) d\Theta. \quad \{10.70\}$$

10.2.4 La velocidad de reacción

Igualmente que en el caso de las reacciones no premezcladas, es aconsejable adoptar la media armónica de las velocidades de reacción EBU y cinéticas.

Referencias al Capítulo 10

- Jones, W. P., and Whitelaw, J. H.; Calculation methods for reacting turbulent flows; *Combustion and Flame* 48:1-26, 1982
- Bilger, R. W.; The structure of diffusion flames; *Combustion Science and Technology*, 13:155-170, 1976.
- Magnussen, B. F., and Hertzjager, B. H.; 16th. Symposium (International) on Combustion, Pittsburgh, 1977, page 719.

CAPÍTULO 11

Modelos de equilibrio y bases de datos

11.1 Bases de datos

Las propiedades físicas, químicas y de transporte de las sustancias gaseosas pueden hallarse en varias Bases de Datos.

La referencia básica la forman las tablas de JANAF (Joint Army- Navy – Air Force), originalmente compiladas en los laboratorios Dow en Michigan, USA. Estas tablas (y sus Addenda o añadidos) se obtienen del US Dept. of Commerce, National Bureau of Standards, Institute for Applied Technology.

En estas Tablas se listan, para un gran número de gases y algunos sólidos y líquidos, el calor específico, la entropía, la entalpía y la función de energía de libre de Gibbs en función de la temperatura. También se dan las constantes de equilibrio, los calores de formación y otras constantes.

Información más fácil de utilizar se encuentra en las bases de datos de la NASA, principalmente en dos publicaciones:

- Gordon, S. , and McBride, B.J., “Computer program for calculation of complex chemical equilibrium compositions, Rocket performance, incident and reflected shocks, and Chapman-Jouget detonations”, NASA Special Publication SP-273 (1971)
- McBride, B.J., Gordon, S., Reno, M. “Coefficients for calculating Thermodynamic and transport properties of individual species”, NASA Technical Memorandum 4513 (1993)

En la primera, el calor específico a volumen constante, la entalpía total y la entropía se han expresado como series de potencias de la temperatura:

$$\frac{C_p}{R} = a_1 + a_2T + a_3T^2 + a_4T^3 + a_5T^4, \quad \{11.1\}$$

$$\frac{H^0}{RT} = a_1 + \frac{a_2}{2}T + \frac{a_3}{3}T^2 + \frac{a_4}{4}T^3 + \frac{a_5}{5}T^4 + \frac{a_6}{T}, \quad \{11.2\}$$

$$\frac{S^0}{R} = a_1 \ln T + a_2T + \frac{a_3}{2}T^2 + \frac{a_4}{3}T^3 + \frac{a_5}{4}T^4 + a_7. \quad \{11.3\}$$

El superíndice 0 se refiere al estado estándar de 1atm, 0°C.

La información está dada en el siguiente formato:

	Registro 1
	Registro 2
	Registro 3
	Registro 4

Registro 1: Nombre de la especie (18A1), fecha (6A1), símbolos atómicos y fórmula (4(2A1,I3), fase (S,L,G) (A1), temperatura baja (E10.0), temperatura alta (E10.0) temperatura común (E8.0), más símbolos atómicos y fórmula (si es necesario) 2A1, I3, número 1.

Registro 2: coeficientes a_1 - a_5 , intervalo superior de temperatura (común → alta), (5E15.0), número 2

Registro 3: coeficientes, a_6 y a_7 del intervalo superior. Coeficientes a_1 - a_3 del intervalo inferior (5E15.0), número 3

Registro 4: coeficientes a_4 - a_7 , intervalo superior, número 4

En la versión revisada de 1993 se listan coeficientes y además, en el registro 4, último bloque, se da $H^0 / R(298)$.

En esta versión también se dan los parámetros de transporte viscosidad, conductividad térmica y un parámetro de interacción viscosa. Para los tres:

$$\left. \begin{array}{l} \ln \eta \\ \ln \lambda \\ \ln \eta_{ij} \end{array} \right\} = A \ln T + \frac{B}{T} + \frac{C}{T^2} + D. \quad \{11.4\}$$

La viscosidad resulta en micro Poise (μP), la conductividad en $\mu\text{W/cm/K}$, y las unidades de η_{ij} son las mismas que las de η .

La estructura es como la anterior pero con hasta 17 registros que contienen:

Registro 1: Nombre (A15), segunda especie (para η_{ij}) (A15), V(A1), número de intervalos de viscosidad (I1), C(A1), número de intervalos de conductividad (I1), comentarios (A40).

Registro 2: V ó C (A1), primera y última temperatura del intervalo (2F9.2), coeficientes A-D (4E15.8)

Registros 3-17: como el registro 2

Las η_{ij} sólo están dadas para He-Ar, Ar-Kr y $\text{CH}_4\text{-CF}_4$

11.2 Modelos de equilibrio

El más popular de los programas de equilibrio es CHEMKIN, listado y publicado en

- Kee, R.J.; Miller, J.A.; and Jefferson, T.H.; "CHEMKIN: a general-purpose, problem independent, transportable, fortran chemical kinetics code package"; Sandia National Laboratories Report SAND80-8003, March 1980

La versión PC de CHEMKIN (CHEMKIN-PC) está disponible para correr en 486 PC's con un compilador FORTRAN.

El programa CHEMKIN requiere dos archivos de entrada: xxxx.dat y xxxx.in

El archivo xxxx.dat debe copiarse al archivo INRATE y puede tener la estructura sencilla de:

```
ELEMENTS
C H O N
SPECIES
CH4 CO2 H2O CO H2 N2 CH3 H O OH HCO HO2 CH2O
O2 CH3O H2O2 C
END
```

o bien incluir reacciones con sus constantes A, β y E de

$$k = AT^{-\beta} e^{-E/RT} \quad \{11.5\}$$

El siguiente ejemplo es el archivo INRATE para la combustión del Propano en aire:

```
ELEMENTS
H O C N
END
SPECIES
CH4 O2 N2 H2O CO2 H O OH HO2 H2 CO HCO CH2O
CH3 C3H8 N*C3H7 I*C3H7 C3H6 C2H6 C2H5 CH3HCO C2H4
C2H3 CH2CO C2H2 HCCO C2H CH2 CH
END
REACTIONS
O2 + H=OH + O          1.200E17    -0.91    16530.
H2 + O=OH + H          1.5E7      2.0      7560.
H2 + OH=H2O + H       1.000E08    1.6      3300.
OH + OH=H2O + O       1.500E09    1.14     100.
H + O2 + M - HO2 + M   2.00E18    -0.8      0.
      H2O/18.6/ CO2/4.2/ H2/2.86/ CO/2.11/ O2/0.0/ N2/1.26/
HO2 +H-OH +OH          1.500E14    0.0      1000.
HO2 +H-H2 +O2          2.500E13    0.0      690.
HO2 +H-H2O +O          3.000E13    0.0      1720.
```

HO2 +OH-H2O +O2	2.000E13	0.0	0.0
CO +OH=CO2 +H	4.400E06	1.5	-740.
CH4 + H = H2 + CH3	2.200E04	3.0	8760.
CH4 + OH - H2O + CH3	1.600E06	2.1	2460.
CH3 + O - CH2O + H	7.000E13	0.	0.
CH3 + OH - CH2O + H + H	4.500E14	0.	15500.
CH3 + OH - CH2O + H2	8.000E12	0.	0.
CH3 + H - CH4	1.9E36	-7.0	9066.
CH2O +H-HCO +H2	2.500E13	0.	4000.
CH2O +OH - HCO +H2O	3.000E13	0.	1200.
HCO + H - CO + H2	2.0E14	0.	0.
HCO + OH - CO + H2O	1.0E14	0.	0.
HCO +O2- CO +HO2	3.000E12	0.	0.
HCO +M - CO+H+M	7.100E14	0.	16820.
CH3 + CH3 - C2H6	1.0E38	-7.66	9500.
C2H6 + H - H2 + C2H5	5.400E02	3.5	5215.
C2H6 + OH - H2O + C2H5	6.300E06	2.0	645.
C2H5 - C2H4 + H	1.0E38	-7.71	49000.
C2H5 + H - CH3 + CH3	3.000E13	0.	0.
C2H5 + O2 - HO2 + C2H4	2.000E12	0.	5000.
C2H4 + OH - C2H3 + H2O	7.000E13	0.	3000.
C2H3 = C2H2 + H	1.600E32	-5.5	46290.
C2H3 + O2 - CH2O + HCO	.500E12	0.	0.
C2H3 + O - CH2CO + H	3.000E13	0.	0.
CH2CO + H - CH3 + CO	7.000E12	0.	3000.
CH2CO + OH -CH2O + HCO	1.000E13	0.	0.
C2H2 + O - HCCO + H	4.300E14	0.	12130.
C2H2 + O - CH2 + CO	4.100E08	1.5	1700.
C2H2 + OH - H2O + C2H	1.000E13	0.	7000.
HCCO + H - CH2 + CO	3.000E13	0.	0.
HCCO + O - CO + CO +H	1.000E14	0.	0.
CH2 +O2 - CO2 +H +H	6.500E12	0.	1500.
CH2 +O2 - CO +OH +H	6.500E12	0.	1500.
CH2 +H=CH +H2	4.000E13	0.	0.
CH +O2 - HCO +O	3.000E13	0.0	0.
C2H + O2 - HCCO + O	5.000E13	0.	1500.
C2H + H2 - C2H2 + H	1.100E13	0.0	2870.
CH3 + H - CH2 + H2	1.800E14	0.	15070.
CH3 + OH - CH2 + H2O	1.5E13	0.	5000.
CH2 + OH - CH2O + H	2.5E13	0.	0.
CH2 + OH - CH + H2O	4.5E13	0.	3000.

CH + OH - HCO + H	3.0E13	0.	0.
C3H8 + H - N*C3H7 + H2	1.300E14	0.	9710.
C3H8 + OH - N*C3H7 + H2O	3.7E12	0.	1650.
C3H8 + H - I*C3H7 + H2	1.000E14	0.	8350.
C3H8 + OH - I*C3H7 + H2O	2.8E12	0.	860.
N*C3H7 + H - C3H8	2.000E13	0.	0.
I*C3H7 + H - C3H8	2.000E13	0.	0.
N*C3H7 - C2H4 + CH3	3.000E14	0.	33033.
N*C3H7 - C3H6 + H	1.000E14	0.0	37340.
N*C3H7 + O2 - C3H6 + HO2	1.000E12	0.	5000.
I*C3H7 - C3H6 + H	2.000E14	0.	38730.
I*C3H7 + O2 - C3H6 + HO2	1.000E12	0.	2990.
C3H6 + OH - CH3CO + CH3	1.0E13	0.	0.
CH3CO + H - CH3 + CO + H2	4.0E13	0.	4210.
CH3CO + OH - CH3 + CO + H2O	1.0E13	0.	0.
END			

Notar que para las reacciones en las que el “gas de baño” o “tercer cuerpo” M interviene, se dan los coeficientes catalíticos tal que:

$$[M] = \sum a_i [i]. \quad \{11.6\}$$

Las reacciones irreversibles se indican con el signo -, y las reversibles con =

Referencias al Capítulo 11

- NIST-JANAF Thermochemical Tables, 4th. Ed., Monograph No. 9 (Parts I & II), American Institute of Physics, 1998.

CAPÍTULO 12

Postprocesado

12.1 Graficadores

La resolución numérica de las ecuaciones de transporte y relaciones algebraicas dá como resultado matrices (en principio tridimensionales) donde a cada celda, identificada por sus índices (i,j,k) corresponden valores discretos de los parámetros calculados.

El número de estos parámetros es muy grande; mencionamos

- x,y,z del centro de la celda
- x,y,z del vértice P
- u, v, w
- h, T, Cp, v
- μ_T, k, ε
- $x_i[i], y_i, \Gamma_i$ (i puede ser varias decenas)

Para poder analizar este cúmulo de datos es necesario post-procesar la información y presentarla en forma gráfica. También es necesario poder manipular los datos para realizar interpolaciones (por ejemplo, a puntos de muestreo experimental) y cambios de unidades.

Los postprocesadores gráficos pueden ser de acceso libre (freeware) o comerciales. Entre los gratuitos se pueden mencionar XMGR (sólo bidimensional) y GNUPLOT. XMGR es un excelente generador de gráficos X-Y y de isolíneas, con gran variedad de fonts, símbolos y colores; la versión tridimensional, sin embargo es comercial.

GNUPLOT es producido por la Free Software Foundation, que también produce EMACS (editor), LEMACS, GHOSTVIEW (visor de gráficos postscript), GHOSTSCRIPT (visor de textos postscript).

GNUPLOT, en su versión PC, se obtiene de INTERNET. Produce gráficos en 2 y 3 dimensiones, isocurvas y de gráficos de puntos. Tiene un número reducido de fonts y alguna capacidad de gráficos en colores.

De los graficadores comerciales el más popular es TECPLOT-3D. Es un graficador muy versátil, que produce isosuperficies, sombreado, trayectorias, etc, con amplia gama de colores, superposición de gráficos, etc.

Tanto GNUPLOT como TECPLOT proveen el manipuleo de las variables para realizar cambios de unidades o creación de otras (ej: $T = t + v^2/2c_p$). GNUPLOT incorpora también funciones útiles como la función Gamma, funciones de Bessel, etc.

Tanto GNUPLOT como TECPLOT producen gráficos en varios estándares como Bitmap (BMP), TIFF, Postscript (PS), Postscript encapsulado en TIFF (EPS). Sin embargo, la baja confiabilidad de los estándares hace que rara vez un procesador, digamos de WINDOWS, puede aprovechar un gráfico BMP o TIFF producido por un procesador gráfico científico como GNUPLOT o TECPLOT. Es más seguro producir los gráficos como Postscript (PS o CPS, color postscript) e imprimirlos con un traductor que pueda enviar PS o CPS a un impresor WINDOWS. El traductor gratis (Freeware) es GHOSTVIEW, aunque no es muy confiable, y no es seguro que funcione en color. Un traductor comercial de muy bajo costo es USPC, que toma gráficos (y texto) postscript e imprime directamente en impresoras tipo deskjet y laserjet.

12.2 Postprocesado de especies menores

En ciertos casos hay especies químicas que aparecen en concentraciones tan bajas que las energías involucradas no afectan los balances, y tampoco a las concentraciones de las especies principales.

En este caso se pueden computar como un post-procesado.

Si las reacciones son rápidas esto puede hacerse con un programa de equilibrio como CHEMKIN, añadiendo las reacciones

relevantes. Por ejemplo, para la producción de óxidos de nitrógeno del aire, se agregaría al archivo m.dat las reacciones siguientes:

$N+NO \rightleftharpoons N_2+O$	3.500E+13	.000	330.00
$N+O_2 \rightleftharpoons NO+O$	2.650E+12	.000	6400.00
$N+OH \rightleftharpoons NO+H$	7.333E+13	.000	1120.00
$N_2O+O \rightleftharpoons N_2+O_2$	1.400E+12	.000	10810.00
$N_2O+O \rightleftharpoons 2NO$	2.900E+13	.000	23150.00
$N_2O+H \rightleftharpoons N_2+OH$	4.400E+14	.000	18880.00
$N_2O(+M) \rightleftharpoons N_2+O(+M)$	1.300E+11	.000	59620.00
$HO_2+NO \rightleftharpoons NO_2+OH$	2.110E+12	.000	-480.00
$NO+O+M \rightleftharpoons NO_2+M$	1.060E+20	-1.41	.00
$NO_2+O \rightleftharpoons NO+O_2$	3.900E+12	.000	-240.00
$NO_2+H \rightleftharpoons NO+OH$	1.320E+14	.000	360.00
$NH+O \rightleftharpoons NO+H$	5.000E+13	.000	.00
$NH+H \rightleftharpoons N+H_2$	3.200E+13	.000	330.00
$NH+OH \rightleftharpoons HNO+H$	2.000E+13	.000	.00
$NH+OH \rightleftharpoons N+H_2O$	2.000E+09	1.200	.00
$NH+O_2 \rightleftharpoons HNO+O$	4.610E+05	2.000	6500.00
$NH+O_2 \rightleftharpoons NO+OH$	1.280E+06	1.500	100.00
$NH+N \rightleftharpoons N_2+H$	1.500E+13	.000	.00
$NH+H_2O \rightleftharpoons HNO+H_2$	2.000E+13	.000	13850.00
$NH+NO \rightleftharpoons N_2+OH$	2.160E+13	-.230	.00
$NH+NO \rightleftharpoons N_2O+H$	4.160E+14	-.450	.00
$NH_2+O \rightleftharpoons OH+NH$	7.000E+12	.000	.00
$NH_2+O \rightleftharpoons H+HNO$	4.600E+13	.000	.00
$NH_2+H \rightleftharpoons NH+H_2$	4.000E+13	.000	3650.00
$NH_2+OH \rightleftharpoons NH+H_2O$	9.000E+07	1.500	-460.00
$NNH+M \rightleftharpoons N_2+H+M$	1.300E+14	-.110	4980.00
$NNH+O_2 \rightleftharpoons HO_2+N_2$	5.000E+12	.000	.00
$NNH+O \rightleftharpoons OH+N_2$	2.500E+13	.000	.00
$NNH+O \rightleftharpoons NH+NO$	7.000E+13	.000	.00
$NNH+H \rightleftharpoons H_2+N_2$	5.000E+13	.000	.00
$NNH+OH \rightleftharpoons H_2O+N_2$	2.000E+13	.000	.00
$NNH+CH_3 \rightleftharpoons CH_4+N_2$	2.500E+13	.000	.00
$H+NO+M \rightleftharpoons HNO+M$	8.950E+19	-1.32	740.00
$HNO+O \rightleftharpoons NO+OH$	2.500E+13	.000	.00
$HNO+H \rightleftharpoons H_2+NO$	4.500E+11	.720	660.00
$HNO+OH \rightleftharpoons NO+H_2O$	1.300E+07	1.900	-950.00

HNO+O2<=>HO2+NO	1.000E+13	.000	13000.00
CN+O<=>CO+N	7.700E+13	.000	.00
CN+OH<=>NCO+H	4.000E+13	.000	.00
CN+H2O<=>HCN+OH	8.000E+12	.000	7460.00
CN+O2<=>NCO+O	6.140E+12	.000	-440.00
CN+H2<=>HCN+H	2.100E+13	.000	4710.00
NCO+O<=>NO+CO	2.350E+13	.000	.00
NCO+H<=>NH+CO	5.400E+13	.000	.00
NCO+OH<=>NO+H+CO	2.500E+12	.000	.00
NCO+O2<=>NO+CO2	2.000E+12	.000	20000.00
NCO+M<=>N+CO+M	8.800E+16	-.500	48000.00
NCO+NO<=>N2O+CO	2.850E+17	-1.52	740.00
NCO+NO<=>N2+CO2	5.700E+18	-2.00	800.00
HCN+M<=>H+CN+M	1.040E+29	-3.30	126600.00
HCN+O<=>NCO+H	1.107E+04	2.640	4980.00
HCN+O<=>NH+CO	2.767E+03	2.640	4980.00
HCN+O<=>CN+OH	2.134E+09	1.580	26600.00
HCN+OH<=>HOCN+H	1.100E+06	2.030	13370.00
HCN+OH<=>HNCO+H	4.400E+03	2.260	6400.00
HCN+OH<=>NH2+CO	1.600E+02	2.560	9000.00
H+HCN+M<=>H2CN+M	1.400E+26	-3.40	1900.00
H2CN+N<=>N2+CH2	6.000E+13	.000	400.00
C+N2<=>CN+N	6.300E+13	.000	46020.00
CH+N2<=>HCN+N	2.857E+08	1.100	20400.00
CH+N2(+M)<=>HCNN(+M)	3.100E+12	.150	.00
CH2(S)+N2<=>NH+HCN	1.000E+11	.000	65000.00
C+NO<=>CN+O	1.900E+13	.000	.00
C+NO<=>CO+N	2.900E+13	.000	.00
CH+NO<=>HCN+O	5.000E+13	.000	.00
CH+NO<=>H+NCO	2.000E+13	.000	.00
CH+NO<=>N+HCO	3.000E+13	.000	.00
CH2+NO<=>H+HNCO	3.100E+17	-1.38	1270.00
CH2+NO<=>OH+HCN	2.900E+14	-.690	760.00
CH2+NO<=>H+HCNO	3.800E+13	-.360	580.00
CH2(S)+NO<=>H+HNCO	3.100E+17	-1.38	1270.00
CH2(S)+NO<=>OH+HCN	2.900E+14	-.690	760.00
CH2(S)+NO<=>H+HCNO	3.800E+13	-.360	580.00
CH3+NO<=>HCN+H2O	9.600E+13	.000	28800.00
CH3+NO<=>H2CN+OH	1.000E+12	.000	21750.00
HCNN+O<=>CO+H+N2	2.200E+13	.000	.00

HCNN+O<=>HCN+NO	2.000E+12	.000	.00
HCNN+O2<=>O+HCO+N2	1.200E+13	.000	.00
HCNN+OH<=>H+HCO+N2	1.200E+13	.000	.00
HCNN+H<=>CH2+N2	1.000E+14	.000	.00
HNCO+O<=>NH+CO2	9.800E+07	1.410	8500.00
HNCO+O<=>HNO+CO	1.500E+08	1.570	44000.00
HNCO+O<=>NCO+OH	2.200E+06	2.110	11400.00
HCNN+O<=>CO+H+N2	2.200E+13	.000	.00
HCNN+O<=>HCN+NO	2.000E+12	.000	.00
HCNN+O2<=>O+HCO+N2	1.200E+13	.000	.00
HCNN+OH<=>H+HCO+N2	1.200E+13	.000	.00
HCNN+H<=>CH2+N2	1.000E+14	.000	.00
HNCO+O<=>NH+CO2	9.800E+07	1.410	8500.00
HNCO+O<=>HNO+CO	1.500E+08	1.570	44000.00
HNCO+O<=>NCO+OH	2.200E+06	2.110	11400.00
HNCO+H<=>H2+NCO	1.050E+05	2.500	13300.00
HNCO+OH<=>NCO+H2O	4.650E+12	.000	6850.00
HNCO+OH<=>NH2+CO2	1.550E+12	.000	6850.00
HNCO+M<=>NH+CO+M	1.180E+16	.000	84720.00
HCNO+H<=>H+HNCO	2.100E+15	-.690	2850.00
HCNO+H<=>OH+HCN	2.700E+11	.180	2120.00
HCNO+H<=>NH2+CO	1.700E+14	-.750	2890.00
HOCN+H<=>H+HNCO	2.000E+07	2.000	2000.00
HCCO+NO<=>HCNO+CO	2.350E+13	.000	.00
CH3+N<=>H2CN+H	6.100E+14	-.310	290.00
CH3+N<=>HCN+H2	3.700E+12	.150	-90.00
NH3+H<=>NH2+H2	5.400E+05	2.400	9915.00
NH3+OH<=>NH2+H2O	5.000E+07	1.600	955.00
NH3+O<=>NH2+OH	9.400E+06	1.940	6460.00

(Las unidades son moles, cm³, seg, Kelvin, calorías/mol)

Las concentraciones así obtenidas serían las de equilibrio [NO]^o. Sin embargo, en el caso del Nitrógeno, las concentraciones de NO en el escape son menores que las de equilibrio en la llama, aunque mucho mayores que las de equilibrio a la temperatura de escape.

Para corregir estos se puede utilizar un parámetro λ_s [velocidad al equilibrio, en seg^{-1}] que, para una llama de hidrocarburos estequiométrica se ilustra en la figura:

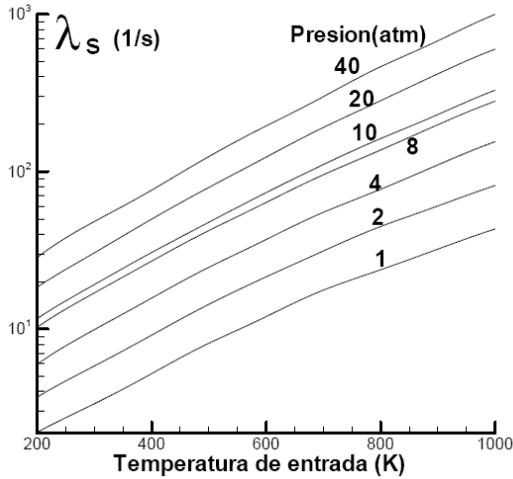


Figura 12.1: Factor de velocidad al equilibrio

Por ejemplo, para llamas a presión ambiente y 400K de entrada al combuster, $\lambda_s \approx 5 s^{-1}$.

Si la llama no fuera estequiométrica se corrige λ_s con la gráfica siguiente:

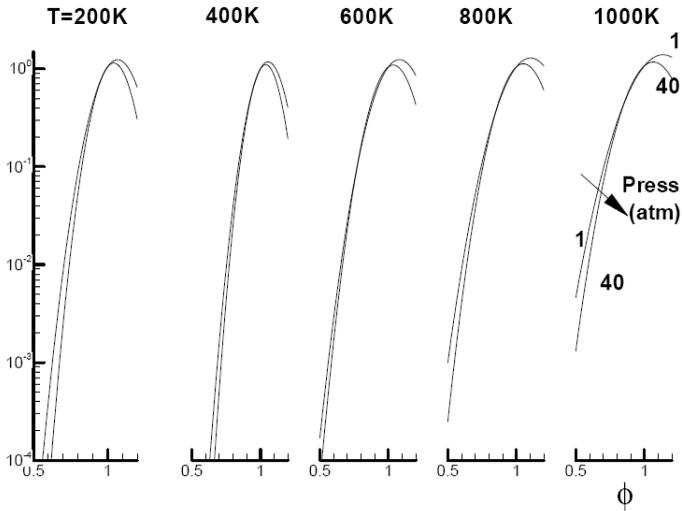


Figura 12.2: Corrección a λ_s

Obtenido λ , y nuevamente, para pequeñas concentraciones de $[NO]$, puede calcularse

$$[NO] = \lambda \Delta t [NO]^e, \quad \{12.1\}$$

donde Δt es el tiempo de residencia en la zona de llama donde fue calculado $[NO]^e$.

Referencias al Capítulo 12

- Para XMGR: GRACE; <http://plasma-gate.weizmann.ac.il>

Bibliografía

- Bird, R. B., Stewart, W. E. y Lightfoot, E. N.; Fenómenos de transporte, Reverté, 1976
- Smooke, M. D. (Ed); Reduced Kinetic Mechanisms and Asymptotic Approximations for Methane-Air Flames, Lecture Notes in Physics 384, Springer-Verlag, 1991.
- Tennekes H. and Lumley, J. L.; A first course in turbulence, MIT Press, 2001.
- Anderson, D. A., Tannehill, J. C., and Pletcher, R. H.; Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer, Hemisphere, 1984
- Launder, B. E., and Sandham, N. D.; Closure strategies for turbulent and transitional flows, Cambridge UP, 2002.
- Fox, R. O.; Computational models for turbulent reacting flows, Cambridge UP, 2003
- Kee, R. J., Coltrin, M. E., and Glarborg, P.; Chemically reacting flow, Wiley-Interscience, 2003.
- Poinso, T., and Veynante, D.; Theoretical and numerical combustion, Edwards, 2001.
- Pope, S. B.; Turbulent flows, Cambridge UP, 2000.
- Patankar, S. V., and Spalding, D. B.; Heat and mass transfer in boundary layers, Intertext Books, 1970.
- Patankar, S. V.; Numerical heat transfer and fluid flow, Hemisphere, 1980.

- Kee, R. J., Miller, J. A., and Jefferson, T. H.; Chemkin: A general purpose, problem independent, transportable, FORTRAN chemical kinetics code package, SANDIA Report SAND80-8003, Sandia Laboratories, 1980
- Chung, T. J. (Ed); Numerical modeling in combustion, Taylor and Francis, 1993.

Apéndices

Apéndice A: Sistemas esquelatales

Mecanismo GRI-Mech2.11 (Metano en aire)

ELEMENTOS

1. O
2. H
3. C
4. N
5. AR

ESPECIES

1. H2
2. H
3. O
4. O2
5. OH
6. H2O
7. HO2
8. H2O2
9. C
10. CH
11. CH2
12. CH2(S)
13. CH3
14. CH4
15. O
16. O2
17. HCO
18. CH2O
19. CH2OH
20. CH3O
21. CH3OH
22. C2H
23. C2H2
24. C2H3
25. C2H4
26. C2H5
27. C2H6
28. HCCO

29. CH₂CO
30. HCCOH
31. N
32. NH
33. NH₂
34. NH₃
35. NNH
36. NO
37. NO₂
38. N₂O
39. HNO
40. CN
41. HCN
42. H₂CN
43. HCNN
44. HCNO
45. HOCN
46. HNCO
47. NCO
48. N₂
49. AR

REACCIONES	Constante	β	E
2O+M \rightleftharpoons O ₂ +M	1.200E+17	-1.00	.00
O+H+M \rightleftharpoons OH+M	5.000E+17	-1.00	.00
O+H ₂ \rightleftharpoons H+OH	5.000E+04	2.67	6290.00
O+HO ₂ \rightleftharpoons OH+O ₂	2.000E+13	.000	.00
O+H ₂ O ₂ \rightleftharpoons OH+HO ₂	9.630E+06	2.00	4000.00
O+CH \rightleftharpoons H+CO	5.700E+13	.000	.00
O+CH ₂ \rightleftharpoons H+HCO	8.000E+13	.000	.00
O+CH ₂ (S) \rightleftharpoons H ₂ +CO	1.500E+13	.000	.00
O+CH ₂ (S) \rightleftharpoons H+HCO	1.500E+13	.000	.00
O+CH ₃ \rightleftharpoons H+CH ₂ O	8.430E+13	.000	.00
O+CH ₄ \rightleftharpoons OH+CH ₃	1.020E+09	1.500	8600.00
O+CO+M \rightleftharpoons CO ₂ +M	6.020E+14	.000	3000.00
O+HCO \rightleftharpoons OH+CO	3.000E+13	.000	.00
O+HCO \rightleftharpoons H+CO ₂	3.000E+13	.000	.00
O+CH ₂ O \rightleftharpoons OH+HCO	3.900E+13	.000	3540.00
O+CH ₂ OH \rightleftharpoons OH+CH ₂ O	1.000E+13	.000	.00
O+CH ₃ O \rightleftharpoons OH+CH ₂ O	1.000E+13	.000	.00

$O+CH_3OH \rightleftharpoons OH+CH_2OH$	3.880E+05	.500	3100.00
$O+CH_3OH \rightleftharpoons OH+CH_3O$	1.300E+05	2.500	5000.00
$O+C_2H \rightleftharpoons CH+CO$	5.000E+13	.000	.00
$O+C_2H_2 \rightleftharpoons H+HCCO$	1.020E+07	2.000	1900.00
$O+C_2H_2 \rightleftharpoons CO+CH_2$	1.020E+07	2.000	1900.00
$O+C_2H_3 \rightleftharpoons H+CH_2CO$	3.000E+13	.000	.00
$O+C_2H_4 \rightleftharpoons CH_3+HCO$	1.920E+07	1.830	220.00
$O+C_2H_5 \rightleftharpoons CH_3+CH_2O$	1.320E+14	.000	.00
$O+C_2H_6 \rightleftharpoons OH+C_2H_5$	8.980E+07	1.920	5690.00
$O+HCCO \rightleftharpoons H+2CO$	1.000E+14	.000	.00
$O+CH_2CO \rightleftharpoons OH+HCCO$	1.000E+13	.000	8000.00
$O+CH_2CO \rightleftharpoons CH_2+CO_2$	1.750E+12	.000	1350.00
$O_2+CO \rightleftharpoons O+CO_2$	2.500E+12	.000	47800.00
$O_2+CH_2O \rightleftharpoons HO_2+HCO$	1.000E+14	.000	40000.00
$H+O_2+M \rightleftharpoons HO_2+M$	2.800E+18	-0.860	.00
$H+2O_2 \rightleftharpoons HO_2+O_2$	3.000E+20	-1.72	.00
$H+O_2+H_2O \rightleftharpoons HO_2+H_2O$	9.380E+18	-0.760	.00
$H+O_2+N_2 \rightleftharpoons HO_2+N_2$	3.750E+20	-0.720	.00
$H+O_2+AR \rightleftharpoons HO_2+AR$	7.000E+17	-0.800	.00
$H+O_2 \rightleftharpoons O+OH$	8.300E+13	.000	14413.00
$2H+M \rightleftharpoons H_2+M$	1.000E+18	-1.00	.00
$2H+H_2 \rightleftharpoons 2H_2$	9.000E+16	-0.600	.00
$2H+H_2O \rightleftharpoons H_2+H_2O$	6.000E+19	-1.25	.00
$2H+CO_2 \rightleftharpoons H_2+CO_2$	5.500E+20	-2.00	.00
$H+HO_2 \rightleftharpoons O+H_2O$	3.970E+12	.000	671.00
$H+HO_2 \rightleftharpoons O_2+H_2$	2.800E+13	.000	1068.00
$H+HO_2 \rightleftharpoons 2OH$	1.340E+14	.000	635.00
$H+H_2O_2 \rightleftharpoons HO_2+H_2$	1.210E+07	2.00	5200.00
$H+H_2O_2 \rightleftharpoons OH+H_2O$	1.000E+13	.000	3600.00
$H+CH \rightleftharpoons C+H_2$	1.100E+14	.000	.00
$H+CH_2(+M) \rightleftharpoons CH_3(+M)$	2.500E+16	-0.80	.00
$H+CH_2(S) \rightleftharpoons CH+H_2$	3.000E+13	.000	.00
$H+CH_3(+M) \rightleftharpoons CH_4(+M)$	1.270E+16	-0.630	383.00
$H+CH_4 \rightleftharpoons CH_3+H_2$	6.600E+08	1.62	10840.00
$H+HCO(+M) \rightleftharpoons CH_2O(+M)$	1.090E+12	.480	-260.00
$H+HCO \rightleftharpoons H_2+CO$	7.340E+13	.000	.00
$H+CH_2O(+M) \rightleftharpoons CH_3O(+M)$	5.400E+11	.454	2600.00
$H+CH_2O \rightleftharpoons HCO+H_2$	2.300E+10	1.05	3275.00
$H+CH_2OH(+M) \rightleftharpoons CH_3OH(+M)$	1.800E+13	.000	.00
$H+CH_2OH \rightleftharpoons H_2+CH_2O$	2.000E+13	.000	.00

$\text{H}+\text{CH}_2\text{OH}\rightleftharpoons\text{OH}+\text{CH}_3$	1.200E+13	.000	.00
$\text{H}+\text{CH}_2\text{OH}\rightleftharpoons\text{CH}_2(\text{S})+\text{H}_2\text{O}$	6.000E+12	.000	.00
$\text{H}+\text{CH}_3\text{O}(+\text{M})\rightleftharpoons\text{CH}_3\text{OH}(+\text{M})$	5.000E+13	.000	.00
$\text{H}+\text{CH}_3\text{O}\rightleftharpoons\text{H}+\text{CH}_2\text{OH}$	3.400E+06	1.60	.00
$\text{H}+\text{CH}_3\text{O}\rightleftharpoons\text{H}_2+\text{CH}_2\text{O}$	2.000E+13	.000	.00
$\text{H}+\text{CH}_3\text{O}\rightleftharpoons\text{OH}+\text{CH}_3$	3.200E+13	.000	.00
$\text{H}+\text{CH}_3\text{OH}\rightleftharpoons\text{CH}_2\text{OH}+\text{H}_2$	1.700E+07	2.10	4870.00
$\text{H}+\text{CH}_3\text{OH}\rightleftharpoons\text{CH}_3\text{O}+\text{H}_2$	4.200E+06	2.10	4870.00
$\text{H}+\text{C}_2\text{H}(+\text{M})\rightleftharpoons\text{C}_2\text{H}_2(+\text{M})$	1.000E+17	-1.00	.00
$\text{H}+\text{C}_2\text{H}_2(+\text{M})\rightleftharpoons\text{C}_2\text{H}_3(+\text{M})$	5.600E+12	.000	2400.00
$\text{H}+\text{C}_2\text{H}_3(+\text{M})\rightleftharpoons\text{C}_2\text{H}_4(+\text{M})$	6.080E+12	.270	280.00
$\text{H}+\text{C}_2\text{H}_3\rightleftharpoons\text{H}_2+\text{C}_2\text{H}_2$	3.000E+13	.000	.00
$\text{H}+\text{C}_2\text{H}_4(+\text{M})\rightleftharpoons\text{C}_2\text{H}_5(+\text{M})$	1.080E+12	.454	1820.00
$\text{H}+\text{C}_2\text{H}_4\rightleftharpoons\text{C}_2\text{H}_3+\text{H}_2$	1.325E+06	2.53	12240.00
$\text{H}+\text{C}_2\text{H}_5(+\text{M})\rightleftharpoons\text{C}_2\text{H}_6(+\text{M})$	5.210E+17	-0.99	1580.00
$\text{H}+\text{C}_2\text{H}_5\rightleftharpoons\text{H}_2+\text{C}_2\text{H}_4$	2.000E+12	.000	.00
$\text{H}+\text{C}_2\text{H}_6\rightleftharpoons\text{C}_2\text{H}_5+\text{H}_2$	1.150E+08	1.90	7530.00
$\text{H}+\text{HCCO}\rightleftharpoons\text{CH}_2(\text{S})+\text{CO}$	1.000E+14	.000	.00
$\text{H}+\text{CH}_2\text{CO}\rightleftharpoons\text{HCCO}+\text{H}_2$	5.000E+13	.000	8000.00
$\text{H}+\text{CH}_2\text{CO}\rightleftharpoons\text{CH}_3+\text{CO}$	1.130E+13	.000	3428.00
$\text{H}+\text{HCCOH}\rightleftharpoons\text{H}+\text{CH}_2\text{CO}$	1.000E+13	.000	.00
$\text{H}_2+\text{CO}(+\text{M})\rightleftharpoons\text{CH}_2\text{O}(+\text{M})$	4.300E+07	1.50	79600.00
$\text{OH}+\text{H}_2\rightleftharpoons\text{H}+\text{H}_2\text{O}$	2.160E+08	1.51	3430.00
$2\text{OH}(+\text{M})\rightleftharpoons\text{H}_2\text{O}_2(+\text{M})$	7.400E+13	-0.37	.00
$2\text{OH}\rightleftharpoons\text{O}+\text{H}_2\text{O}$	3.570E+04	2.40	-2110.00
$\text{OH}+\text{HO}_2\rightleftharpoons\text{O}_2+\text{H}_2\text{O}$	2.900E+13	.000	-500.00
$\text{OH}+\text{H}_2\text{O}_2\rightleftharpoons\text{HO}_2+\text{H}_2\text{O}$	1.750E+12	.000	320.00
$\text{OH}+\text{H}_2\text{O}_2\rightleftharpoons\text{HO}_2+\text{H}_2\text{O}$	5.800E+14	.000	9560.00
$\text{OH}+\text{CH}\rightleftharpoons\text{H}+\text{HCO}$	3.000E+13	.000	.00
$\text{OH}+\text{CH}_2\rightleftharpoons\text{H}+\text{CH}_2\text{O}$	2.000E+13	.000	.00
$\text{OH}+\text{CH}_2\rightleftharpoons\text{CH}+\text{H}_2\text{O}$	1.130E+07	2.00	3000.00
$\text{OH}+\text{CH}_2(\text{S})\rightleftharpoons\text{H}+\text{CH}_2\text{O}$	3.000E+13	.000	.00
$\text{OH}+\text{CH}_3(+\text{M})\rightleftharpoons\text{CH}_3\text{OH}(+\text{M})$	6.300E+13	.000	.00
$\text{OH}+\text{CH}_3\rightleftharpoons\text{CH}_2+\text{H}_2\text{O}$	5.600E+07	1.60	5420.00
$\text{OH}+\text{CH}_3\rightleftharpoons\text{CH}_2(\text{S})+\text{H}_2\text{O}$	2.501E+13	.000	.00
$\text{OH}+\text{CH}_4\rightleftharpoons\text{CH}_3+\text{H}_2\text{O}$	1.000E+08	1.60	3120.00
$\text{OH}+\text{CO}\rightleftharpoons\text{H}+\text{CO}_2$	4.760E+07	1.228	70.00
$\text{OH}+\text{HCO}\rightleftharpoons\text{H}_2\text{O}+\text{CO}$	5.000E+13	.000	.00
$\text{OH}+\text{CH}_2\text{O}\rightleftharpoons\text{HCO}+\text{H}_2\text{O}$	3.430E+09	1.18	-447.00
$\text{OH}+\text{CH}_2\text{OH}\rightleftharpoons\text{H}_2\text{O}+\text{CH}_2\text{O}$	5.000E+12	.000	.00

$\text{OH}+\text{CH}_3\text{O}\rightleftharpoons\text{H}_2\text{O}+\text{CH}_2\text{O}$	5.000E+12	.000	.00
$\text{OH}+\text{CH}_3\text{OH}\rightleftharpoons\text{CH}_2\text{OH}+\text{H}_2\text{O}$	1.440E+06	2.00	-840.00
$\text{OH}+\text{CH}_3\text{OH}\rightleftharpoons\text{CH}_3\text{O}+\text{H}_2\text{O}$	6.300E+06	2.00	1500.00
$\text{OH}+\text{C}_2\text{H}\rightleftharpoons\text{H}+\text{HCCO}$	2.000E+13	.000	.00
$\text{OH}+\text{C}_2\text{H}_2\rightleftharpoons\text{H}+\text{CH}_2\text{CO}$	2.180E-04	4.50	-1000.00
$\text{OH}+\text{C}_2\text{H}_2\rightleftharpoons\text{H}+\text{HCCOH}$	5.040E+05	2.30	13500.00
$\text{OH}+\text{C}_2\text{H}_2\rightleftharpoons\text{C}_2\text{H}+\text{H}_2\text{O}$	3.370E+07	2.00	14000.00
$\text{OH}+\text{C}_2\text{H}_3\rightleftharpoons\text{H}_2\text{O}+\text{C}_2\text{H}_2$	5.000E+12	.000	.00
$\text{OH}+\text{C}_2\text{H}_4\rightleftharpoons\text{C}_2\text{H}_3+\text{H}_2\text{O}$	3.600E+06	2.00	2500.00
$\text{OH}+\text{C}_2\text{H}_6\rightleftharpoons\text{C}_2\text{H}_5+\text{H}_2\text{O}$	3.540E+06	2.12	870.00
$\text{OH}+\text{CH}_2\text{CO}\rightleftharpoons\text{HCCO}+\text{H}_2\text{O}$	7.500E+12	.000	2000.00
$2\text{HO}_2\rightleftharpoons\text{O}_2+\text{H}_2\text{O}_2$	1.300E+11	.000	-1630.00
$2\text{HO}_2\rightleftharpoons\text{O}_2+\text{H}_2\text{O}_2$	4.200E+14	.000	12000.00
$\text{HO}_2+\text{CH}_2\rightleftharpoons\text{OH}+\text{CH}_2\text{O}$	2.000E+13	.000	.00
$\text{HO}_2+\text{CH}_3\rightleftharpoons\text{O}_2+\text{CH}_4$	1.000E+12	.000	.00
$\text{HO}_2+\text{CH}_3\rightleftharpoons\text{OH}+\text{CH}_3\text{O}$	2.000E+13	.000	.00
$\text{HO}_2+\text{CO}\rightleftharpoons\text{OH}+\text{CO}_2$	1.500E+14	.000	23600.00
$\text{HO}_2+\text{CH}_2\text{O}\rightleftharpoons\text{HCO}+\text{H}_2\text{O}_2$	1.000E+12	.000	8000.00
$\text{C}+\text{O}_2\rightleftharpoons\text{O}+\text{CO}$	5.800E+13	.000	576.00
$\text{C}+\text{CH}_2\rightleftharpoons\text{H}+\text{C}_2\text{H}$	5.000E+13	.000	.00
$\text{C}+\text{CH}_3\rightleftharpoons\text{H}+\text{C}_2\text{H}_2$	5.000E+13	.000	.00
$\text{CH}+\text{O}_2\rightleftharpoons\text{O}+\text{HCO}$	3.300E+13	.000	.00
$\text{CH}+\text{H}_2\rightleftharpoons\text{H}+\text{CH}_2$	1.107E+08	1.79	1670.00
$\text{CH}+\text{H}_2\text{O}\rightleftharpoons\text{H}+\text{CH}_2\text{O}$	1.713E+13	.000	-755.00
$\text{CH}+\text{CH}_2\rightleftharpoons\text{H}+\text{C}_2\text{H}_2$	4.000E+13	.000	.00
$\text{CH}+\text{CH}_3\rightleftharpoons\text{H}+\text{C}_2\text{H}_3$	3.000E+13	.000	.00
$\text{CH}+\text{CH}_4\rightleftharpoons\text{H}+\text{C}_2\text{H}_4$	6.000E+13	.000	.00
$\text{CH}+\text{CO}_2\rightleftharpoons\text{HCO}+\text{CO}$	3.400E+12	.000	690.00
$\text{CH}+\text{CH}_2\text{O}\rightleftharpoons\text{H}+\text{CH}_2\text{CO}$	9.460E+13	.000	-515.00
$\text{CH}+\text{HCCO}\rightleftharpoons\text{CO}+\text{C}_2\text{H}_2$	5.000E+13	.000	.00
$\text{CH}_2+\text{O}_2\rightleftharpoons\text{OH}+\text{HCO}$	1.320E+13	.000	1500.00
$\text{CH}_2+\text{H}_2\rightleftharpoons\text{H}+\text{CH}_3$	5.000E+05	2.00	7230.00
$2\text{CH}_2\rightleftharpoons\text{H}_2+\text{C}_2\text{H}_2$	3.200E+13	.000	.00
$\text{CH}_2+\text{CH}_3\rightleftharpoons\text{H}+\text{C}_2\text{H}_4$	4.000E+13	.000	.00
$\text{CH}_2+\text{CH}_4\rightleftharpoons2\text{CH}_3$	2.460E+06	2.00	8270.00
$\text{CH}_2+\text{CO}(+\text{M})\rightleftharpoons\text{CH}_2\text{CO}(+\text{M})$	8.100E+11	.500	4510.00
$\text{CH}_2+\text{HCCO}\rightleftharpoons\text{C}_2\text{H}_3+\text{CO}$	3.000E+13	.000	.00
$\text{CH}_2(\text{S})+\text{N}_2\rightleftharpoons\text{CH}_2+\text{N}_2$	1.500E+13	.000	600.00
$\text{CH}_2(\text{S})+\text{AR}\rightleftharpoons\text{CH}_2+\text{AR}$	9.000E+12	.000	600.00
$\text{CH}_2(\text{S})+\text{O}_2\rightleftharpoons\text{H}+\text{OH}+\text{CO}$	2.800E+13	.000	.00

$\text{CH}_2(\text{S})+\text{O}_2\rightleftharpoons\text{CO}+\text{H}_2\text{O}$	1.200E+13	.000	.00
$\text{CH}_2(\text{S})+\text{H}_2\rightleftharpoons\text{CH}_3+\text{H}$	7.000E+13	.000	.00
$\text{CH}_2(\text{S})+\text{H}_2\text{O}(+\text{M})\rightleftharpoons\text{CH}_3\text{OH}(+\text{M})$	2.000E+13	.000	.00
$\text{CH}_2(\text{S})+\text{H}_2\text{O}\rightleftharpoons\text{CH}_2+\text{H}_2\text{O}$	3.000E+13	.000	.00
$\text{CH}_2(\text{S})+\text{CH}_3\rightleftharpoons\text{H}+\text{C}_2\text{H}_4$	1.200E+13	.000	-570.00
$\text{CH}_2(\text{S})+\text{CH}_4\rightleftharpoons 2\text{CH}_3$	1.600E+13	.000	-570.00
$\text{CH}_2(\text{S})+\text{CO}\rightleftharpoons\text{CH}_2+\text{CO}$	9.000E+12	.000	.00
$\text{CH}_2(\text{S})+\text{CO}_2\rightleftharpoons\text{CH}_2+\text{CO}_2$	7.000E+12	.000	.00
$\text{CH}_2(\text{S})+\text{CO}_2\rightleftharpoons\text{CO}+\text{CH}_2\text{O}$	1.400E+13	.000	.00
$\text{CH}_2(\text{S})+\text{C}_2\text{H}_6\rightleftharpoons\text{CH}_3+\text{C}_2\text{H}_5$	4.000E+13	.000	-550.00
$\text{CH}_3+\text{O}_2\rightleftharpoons\text{O}+\text{CH}_3\text{O}$	2.675E+13	.000	28800.00
$\text{CH}_3+\text{O}_2\rightleftharpoons\text{OH}+\text{CH}_2\text{O}$	3.600E+10	.000	8940.00
$\text{CH}_3+\text{H}_2\text{O}_2\rightleftharpoons\text{HO}_2+\text{CH}_4$	2.450E+04	2.47	5180.00
$2\text{CH}_3(+\text{M})\rightleftharpoons\text{C}_2\text{H}_6(+\text{M})$	2.120E+16	-970	620.00
$2\text{CH}_3\rightleftharpoons\text{H}+\text{C}_2\text{H}_5$	4.990E+12	.100	10600.00
$\text{CH}_3+\text{HCO}\rightleftharpoons\text{CH}_4+\text{CO}$	2.648E+13	.000	.00
$\text{CH}_3+\text{CH}_2\text{O}\rightleftharpoons\text{HCO}+\text{CH}_4$	3.320E+03	2.81	5860.00
$\text{CH}_3+\text{CH}_3\text{OH}\rightleftharpoons\text{CH}_2\text{OH}+\text{CH}_4$	3.000E+07	1.50	9940.00
$\text{CH}_3+\text{CH}_3\text{OH}\rightleftharpoons\text{CH}_3\text{O}+\text{CH}_4$	1.000E+07	1.50	9940.00
$\text{CH}_3+\text{C}_2\text{H}_4\rightleftharpoons\text{C}_2\text{H}_3+\text{CH}_4$	2.270E+05	2.00	9200.00
$\text{HCO}+\text{H}_2\text{O}\rightleftharpoons\text{H}+\text{CO}+\text{H}_2\text{O}$	2.244E+18	-1.00	17000.00
$\text{HCO}+\text{M}\rightleftharpoons\text{H}+\text{CO}+\text{M}$	1.870E+17	-1.00	17000.00
$\text{HCO}+\text{O}_2\rightleftharpoons\text{HO}_2+\text{CO}$	7.600E+12	.000	400.00
$\text{CH}_2\text{OH}+\text{O}_2\rightleftharpoons\text{HO}_2+\text{CH}_2\text{O}$	1.800E+13	.000	900.00
$\text{CH}_3\text{O}+\text{O}_2\rightleftharpoons\text{HO}_2+\text{CH}_2\text{O}$	4.280E-13	7.60	-3530.00
$\text{C}_2\text{H}+\text{O}_2\rightleftharpoons\text{HCO}+\text{CO}$	5.000E+13	.000	1500.00
$\text{C}_2\text{H}+\text{H}_2\rightleftharpoons\text{H}+\text{C}_2\text{H}_2$	4.070E+05	2.40	200.00
$\text{C}_2\text{H}_3+\text{O}_2\rightleftharpoons\text{HCO}+\text{CH}_2\text{O}$	3.980E+12	.000	-240.00
$\text{C}_2\text{H}_4(+\text{M})\rightleftharpoons\text{H}_2+\text{C}_2\text{H}_2(+\text{M})$	8.000E+12	.440	88770.00
$\text{C}_2\text{H}_5+\text{O}_2\rightleftharpoons\text{HO}_2+\text{C}_2\text{H}_4$	8.400E+11	.000	3875.00
$\text{HCCO}+\text{O}_2\rightleftharpoons\text{OH}+2\text{CO}$	1.600E+12	.000	854.00
$2\text{HCCO}\rightleftharpoons 2\text{CO}+\text{C}_2\text{H}_2$	1.000E+13	.000	.00
$\text{N}+\text{NO}\rightleftharpoons\text{N}_2+\text{O}$	3.500E+13	.000	330.00
$\text{N}+\text{O}_2\rightleftharpoons\text{NO}+\text{O}$	2.650E+12	.000	6400.00
$\text{N}+\text{OH}\rightleftharpoons\text{NO}+\text{H}$	7.333E+13	.000	1120.00
$\text{N}_2\text{O}+\text{O}\rightleftharpoons\text{N}_2+\text{O}_2$	1.400E+12	.000	10810.00
$\text{N}_2\text{O}+\text{O}\rightleftharpoons 2\text{NO}$	2.900E+13	.000	23150.00
$\text{N}_2\text{O}+\text{H}\rightleftharpoons\text{N}_2+\text{OH}$	4.400E+14	.000	18880.00
$\text{N}_2\text{O}(+\text{M})\rightleftharpoons\text{N}_2+\text{O}(+\text{M})$	1.300E+11	.000	59620.00
$\text{HO}_2+\text{NO}\rightleftharpoons\text{NO}_2+\text{OH}$	2.110E+12	.000	-480.00

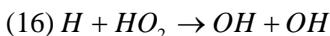
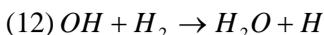
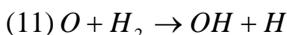
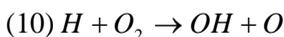
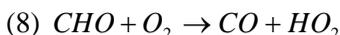
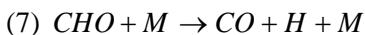
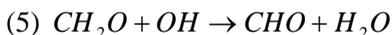
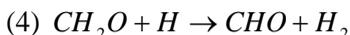
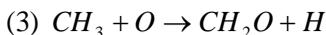
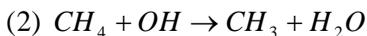
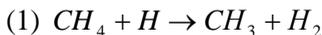
$\text{NO} + \text{O} + \text{M} \rightleftharpoons \text{NO}_2 + \text{M}$	1.060E+20	-1.41	.00
$\text{NO}_2 + \text{O} \rightleftharpoons \text{NO} + \text{O}_2$	3.900E+12	.000	-240.00
$\text{NO}_2 + \text{H} \rightleftharpoons \text{NO} + \text{OH}$	1.320E+14	.000	360.00
$\text{NH} + \text{O} \rightleftharpoons \text{NO} + \text{H}$	5.000E+13	.000	.00
$\text{NH} + \text{H} \rightleftharpoons \text{N} + \text{H}_2$	3.200E+13	.000	330.00
$\text{NH} + \text{OH} \rightleftharpoons \text{HNO} + \text{H}$	2.000E+13	.000	.00
$\text{NH} + \text{OH} \rightleftharpoons \text{N} + \text{H}_2\text{O}$	2.000E+09	1.20	.00
$\text{NH} + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{HNO} + \text{O}$	4.610E+05	2.00	6500.00
$\text{NH} + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{NO} + \text{OH}$	1.280E+06	1.50	100.00
$\text{NH} + \text{N} \rightleftharpoons \text{N}_2 + \text{H}$	1.500E+13	.000	.00
$\text{NH} + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{HNO} + \text{H}_2$	2.000E+13	.000	13850.00
$\text{NH} + \text{NO} \rightleftharpoons \text{N}_2 + \text{OH}$	2.160E+13	-230	.00
$\text{NH} + \text{NO} \rightleftharpoons \text{N}_2\text{O} + \text{H}$	4.160E+14	-450	.00
$\text{NH}_2 + \text{O} \rightleftharpoons \text{OH} + \text{NH}$	7.000E+12	.000	.00
$\text{NH}_2 + \text{O} \rightleftharpoons \text{H} + \text{HNO}$	4.600E+13	.000	.00
$\text{NH}_2 + \text{H} \rightleftharpoons \text{NH} + \text{H}_2$	4.000E+13	.000	3650.00
$\text{NH}_2 + \text{OH} \rightleftharpoons \text{NH} + \text{H}_2\text{O}$	9.000E+07	1.50	-460.00
$\text{NNH} + \text{M} \rightleftharpoons \text{N}_2 + \text{H} + \text{M}$	1.300E+14	-110	4980.00
$\text{NNH} + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{HO}_2 + \text{N}_2$	5.000E+12	.000	.00
$\text{NNH} + \text{O} \rightleftharpoons \text{OH} + \text{N}_2$	2.500E+13	.000	.00
$\text{NNH} + \text{O} \rightleftharpoons \text{NH} + \text{NO}$	7.000E+13	.000	.00
$\text{NNH} + \text{H} \rightleftharpoons \text{H}_2 + \text{N}_2$	5.000E+13	.000	.00
$\text{NNH} + \text{OH} \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O} + \text{N}_2$	2.000E+13	.000	.00
$\text{NNH} + \text{CH}_3 \rightleftharpoons \text{CH}_4 + \text{N}_2$	2.500E+13	.000	.00
$\text{H} + \text{NO} + \text{M} \rightleftharpoons \text{HNO} + \text{M}$	8.950E+19	-1.32	740.00
$\text{HNO} + \text{O} \rightleftharpoons \text{NO} + \text{OH}$	2.500E+13	.000	.00
$\text{HNO} + \text{H} \rightleftharpoons \text{H}_2 + \text{NO}$	4.500E+11	.720	660.00
$\text{HNO} + \text{OH} \rightleftharpoons \text{NO} + \text{H}_2\text{O}$	1.300E+07	1.90	-950.00
$\text{HNO} + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{HO}_2 + \text{NO}$	1.000E+13	.000	13000.00
$\text{CN} + \text{O} \rightleftharpoons \text{CO} + \text{N}$	7.700E+13	.000	.00
$\text{CN} + \text{OH} \rightleftharpoons \text{NCO} + \text{H}$	4.000E+13	.000	.00
$\text{CN} + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{HCN} + \text{OH}$	8.000E+12	.000	7460.00
$\text{CN} + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{NCO} + \text{O}$	6.140E+12	.000	-440.00
$\text{CN} + \text{H}_2 \rightleftharpoons \text{HCN} + \text{H}$	2.100E+13	.000	4710.00
$\text{NCO} + \text{O} \rightleftharpoons \text{NO} + \text{CO}$	2.350E+13	.000	.00
$\text{NCO} + \text{H} \rightleftharpoons \text{NH} + \text{CO}$	5.400E+13	.000	.00
$\text{NCO} + \text{OH} \rightleftharpoons \text{NO} + \text{H} + \text{CO}$	2.500E+12	.000	.00
$\text{NCO} + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{NO} + \text{CO}_2$	2.000E+12	.000	20000.00
$\text{NCO} + \text{M} \rightleftharpoons \text{N} + \text{CO} + \text{M}$	8.800E+16	-.50	48000.00
$\text{NCO} + \text{NO} \rightleftharpoons \text{N}_2\text{O} + \text{CO}$	2.850E+17	-1.52	740.00

$\text{NCO} + \text{NO} \rightleftharpoons \text{N}_2 + \text{CO}_2$	5.700E+18	-2.00	800.00
$\text{HCN} + \text{M} \rightleftharpoons \text{H} + \text{CN} + \text{M}$	1.040E+29	-3.30	126600.00
$\text{HCN} + \text{O} \rightleftharpoons \text{NCO} + \text{H}$	1.107E+04	2.64	4980.00
$\text{HCN} + \text{O} \rightleftharpoons \text{NH} + \text{CO}$	2.767E+03	2.64	4980.00
$\text{HCN} + \text{O} \rightleftharpoons \text{CN} + \text{OH}$	2.134E+09	1.58	26600.00
$\text{HCN} + \text{OH} \rightleftharpoons \text{HOCN} + \text{H}$	1.100E+06	2.03	13370.00
$\text{HCN} + \text{OH} \rightleftharpoons \text{HNCO} + \text{H}$	4.400E+03	2.26	6400.00
$\text{HCN} + \text{OH} \rightleftharpoons \text{NH}_2 + \text{CO}$	1.600E+02	2.56	9000.00
$\text{H} + \text{HCN} + \text{M} \rightleftharpoons \text{H}_2\text{CN} + \text{M}$	1.400E+26	-3.40	1900.00
$\text{H}_2\text{CN} + \text{N} \rightleftharpoons \text{N}_2 + \text{CH}_2$	6.000E+13	.000	400.00
$\text{C} + \text{N}_2 \rightleftharpoons \text{CN} + \text{N}$	6.300E+13	.000	46020.00
$\text{CH} + \text{N}_2 \rightleftharpoons \text{HCN} + \text{N}$	2.857E+08	1.10	20400.00
$\text{CH} + \text{N}_2(+\text{M}) \rightleftharpoons \text{HCNN}(+\text{M})$	3.100E+12	.150	.00
$\text{CH}_2(\text{S}) + \text{N}_2 \rightleftharpoons \text{NH} + \text{HCN}$	1.000E+11	.000	65000.00
$\text{C} + \text{NO} \rightleftharpoons \text{CN} + \text{O}$	1.900E+13	.000	.00
$\text{C} + \text{NO} \rightleftharpoons \text{CO} + \text{N}$	2.900E+13	.000	.00
$\text{CH} + \text{NO} \rightleftharpoons \text{HCN} + \text{O}$	5.000E+13	.000	.00
$\text{CH} + \text{NO} \rightleftharpoons \text{H} + \text{NCO}$	2.000E+13	.000	.00
$\text{CH} + \text{NO} \rightleftharpoons \text{N} + \text{HCO}$	3.000E+13	.000	.00
$\text{CH}_2 + \text{NO} \rightleftharpoons \text{H} + \text{HNCO}$	3.100E+17	-1.38	1270.00
$\text{CH}_2 + \text{NO} \rightleftharpoons \text{OH} + \text{HCN}$	2.900E+14	-.690	760.00
$\text{CH}_2 + \text{NO} \rightleftharpoons \text{H} + \text{HCNO}$	3.800E+13	-.360	580.00
$\text{CH}_2(\text{S}) + \text{NO} \rightleftharpoons \text{H} + \text{HNCO}$	3.100E+17	-1.38	1270.00
$\text{CH}_2(\text{S}) + \text{NO} \rightleftharpoons \text{OH} + \text{HCN}$	2.900E+14	-.690	760.00
$\text{CH}_2(\text{S}) + \text{NO} \rightleftharpoons \text{H} + \text{HCNO}$	3.800E+13	-.360	580.00
$\text{CH}_3 + \text{NO} \rightleftharpoons \text{HCN} + \text{H}_2\text{O}$	9.600E+13	.000	28800.00
$\text{CH}_3 + \text{NO} \rightleftharpoons \text{H}_2\text{CN} + \text{OH}$	1.000E+12	.000	21750.00
$\text{HCNN} + \text{O} \rightleftharpoons \text{CO} + \text{H} + \text{N}_2$	2.200E+13	.000	.00
$\text{HCNN} + \text{O} \rightleftharpoons \text{HCN} + \text{NO}$	2.000E+12	.000	.00
$\text{HCNN} + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{O} + \text{HCO} + \text{N}_2$	1.200E+13	.000	.00
$\text{HCNN} + \text{OH} \rightleftharpoons \text{H} + \text{HCO} + \text{N}_2$	1.200E+13	.000	.00
$\text{HCNN} + \text{H} \rightleftharpoons \text{CH}_2 + \text{N}_2$	1.000E+14	.000	.00
$\text{HNCO} + \text{O} \rightleftharpoons \text{NH} + \text{CO}_2$	9.800E+07	1.41	8500.00
$\text{HNCO} + \text{O} \rightleftharpoons \text{HNO} + \text{CO}$	1.500E+08	1.57	44000.00
$\text{HNCO} + \text{O} \rightleftharpoons \text{NCO} + \text{OH}$	2.200E+06	2.11	11400.00
$\text{HCNN} + \text{O} \rightleftharpoons \text{CO} + \text{H} + \text{N}_2$	2.200E+13	.000	.00
$\text{HCNN} + \text{O} \rightleftharpoons \text{HCN} + \text{NO}$	2.000E+12	.000	.00
$\text{HCNN} + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{O} + \text{HCO} + \text{N}_2$	1.200E+13	.000	.00
$\text{HCNN} + \text{OH} \rightleftharpoons \text{H} + \text{HCO} + \text{N}_2$	1.200E+13	.000	.00
$\text{HCNN} + \text{H} \rightleftharpoons \text{CH}_2 + \text{N}_2$	1.000E+14	.000	.00

$\text{HNCO} + \text{O} \rightleftharpoons \text{NH} + \text{CO}_2$	9.800E+07	1.41	8500.00
$\text{HNCO} + \text{O} \rightleftharpoons \text{HNO} + \text{CO}$	1.500E+08	1.57	44000.00
$\text{HNCO} + \text{O} \rightleftharpoons \text{NCO} + \text{OH}$	2.200E+06	2.11	11400.00
$\text{HNCO} + \text{H} \rightleftharpoons \text{H}_2 + \text{NCO}$	1.050E+05	2.50	13300.00
$\text{HNCO} + \text{OH} \rightleftharpoons \text{NCO} + \text{H}_2\text{O}$	4.650E+12	.000	6850.00
$\text{HNCO} + \text{OH} \rightleftharpoons \text{NH}_2 + \text{CO}_2$	1.550E+12	.000	6850.00
$\text{HNCO} + \text{M} \rightleftharpoons \text{NH} + \text{CO} + \text{M}$	1.180E+16	.000	84720.00
$\text{HCNO} + \text{H} \rightleftharpoons \text{H} + \text{HNCO}$	2.100E+15	-.690	2850.00
$\text{HCNO} + \text{H} \rightleftharpoons \text{OH} + \text{HCN}$	2.700E+11	.180	2120.00
$\text{HCNO} + \text{H} \rightleftharpoons \text{NH}_2 + \text{CO}$	1.700E+14	-.750	2890.00
$\text{HOCN} + \text{H} \rightleftharpoons \text{H} + \text{HNCO}$	2.000E+07	2.00	2000.00
$\text{HCCO} + \text{NO} \rightleftharpoons \text{HCNO} + \text{CO}$	2.350E+13	.000	.00
$\text{CH}_3 + \text{N} \rightleftharpoons \text{H}_2\text{CN} + \text{H}$	6.100E+14	-.310	290.00
$\text{CH}_3 + \text{N} \rightleftharpoons \text{HCN} + \text{H}_2$	3.700E+12	.150	-90.00
$\text{NH}_3 + \text{H} \rightleftharpoons \text{NH}_2 + \text{H}_2$	5.400E+05	2.40	9915.00
$\text{NH}_3 + \text{OH} \rightleftharpoons \text{NH}_2 + \text{H}_2\text{O}$	5.000E+07	1.60	955.00
$\text{NH}_3 + \text{O} \rightleftharpoons \text{NH}_2 + \text{OH}$	9.400E+06	1.94	6460.00

Apéndice B: Reducción de un sistema esquelético

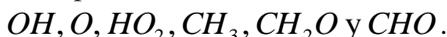
Comenzamos con un sistema esquelético:



Hay 18 reacciones y 13 especies.

Las especies principales son CH_4 , O_2 , CO_2 y H_2O . Otras tres especies son significativas por su influencia en las velocidades de reacción, CO , H_2 y H . Luego, hay 7 especies en estado no-estacionario, a más del gas de baño M

Consideramos 6 especies en estado estacionario:



Debemos encontrar

- Un juego de reacciones que sólo incluya las 7 especies no-estacionarias
- Las velocidades de reacción del nuevo juego en función de las originales
- Las velocidades de formación/destrucción de las 7 no-estacionarias
- Las concentraciones de las 6 estacionarias

Comenzamos planteando que la velocidad de creación/destrucción de las especies estacionarias es cero:

$$\frac{\partial \Gamma_i}{\partial t} = \dot{\Gamma}_i = \sum_k \nu_{i,k} w_k = 0. \quad \{1.34\}$$

Luego,

$$\dot{\Gamma}_{OH} = -w_2 - w_5 - w_9 + w_{10} + w_{11}$$

$$-w_{12} - 2w_{13} - w_{15} + 2w_{16} - w_{18} = 0$$

$$\dot{\Gamma}_O = -w_3 + w_{10} - w_{11} + w_{13} = 0$$

$$\dot{\Gamma}_{HO_2} = w_8 + w_{14} - w_{16} - w_{17} - w_{18} = 0$$

$$\dot{\Gamma}_{CH_3} = w_1 + w_2 - w_3 = 0$$

$$\dot{\Gamma}_{CH_2O} = w_3 - w_4 - w_5 = 0$$

$$\dot{\Gamma}_{CHO} = w_4 + w_5 - w_6 - w_7 - w_8 = 0$$

Utilizamos estas 6 ecuaciones para eliminar 6 velocidades de reacción; elegimos 3, 4, 7, 11, 12 y 17 (no importa cuales):

$$w_{17} = w_8 + w_{14} - w_{16} - w_{18}$$

$$w_3 = w_1 + w_2$$

$$w_7 = w_1 + w_2 - w_6 - w_8$$

$$w_{11} = -w_1 - w_2 + w_{10} + w_{13}$$

$$w_{12} = w_1 - 2w_2 - w_5 - w_9 +$$

$$2w_{10} - w_{13} - w_{15} + 2w_{16} - w_{18}$$

Utilizamos estas relaciones para reemplazar en la velocidad de creación/destrucción de las especies no-estacionarias:

$$\dot{\Gamma}_H = -w_1 + w_3 - w_4 - w_6 + w_7 + w_9 -$$

$$w_{10} + w_{11} + w_{12} - w_{14} - w_{15} - w_{16} - w_{17}$$

$$\dot{\Gamma}_{H_2} = w_1 + w_4 + w_6 - w_{11} - w_{12} + w_{17}$$

$$\dot{\Gamma}_{O_2} = -w_8 - w_{10} - w_{14} + w_{17} + w_{18}$$

$$\dot{\Gamma}_{H_2O} = w_2 + w_5 + w_{12} + w_{13} + w_{15} + w_{18}$$

$$\dot{\Gamma}_{CO} = w_6 + w_7 + w_8 - w_9$$

$$\dot{\Gamma}_{CO_2} = w_9$$

$$\dot{\Gamma}_{CH_4} = -w_1 - w_2$$

Reemplazando y cancelando:

$$\dot{\Gamma}_H = -2w_1 - 2w_2 - 2w_6 - 2w_8 +$$

$$2w_{10} - 2w_{14} - 2w_{15} + 2w_{16}$$

$$\dot{\Gamma}_{H_2} = 4w_1 + 4w_2 + w_6 + w_8 +$$

$$w_9 - 3w_{11} + w_{14} + w_{15} - 3w_{16}$$

$$\dot{\Gamma}_{O_2} = -w_{10} - w_{16}$$

$$\dot{\Gamma}_{H_2O} = -w_1 - w_2 - w_9 + 2w_{10} + 2w_{16}$$

$$\dot{\Gamma}_{CO} = w_1 + w_2 - w_9$$

$$\dot{\Gamma}_{CO_2} = w_9$$

$$\dot{\Gamma}_{CH_4} = -w_1 - w_2$$

Ahora debemos hallar un sistema de reacciones que sólo involucre estas siete especies y tal que las velocidades de creación/destrucción sean las de arriba.

Tomamos las reacciones 1, 9, 14 y 10 y probamos con combinaciones de las reacciones 3, 4, 7, 11, 12 y 17 para eliminar las 6 especies estacionarias. Si fuera necesario probamos con las 5, 13 y 18 en lugar de 4, 12 y 17.

La elección de las reacciones 1, 9, 14 y 10 implica que quedará un sistema de 4 reacciones en las 7 especies no-estacionarias. La elección de las otras es por prueba y error.

Nos quedamos con:

(I) 1, 3, 4, 7, 11 y 12

(II) 9, 12

(III) 14, 18 y 12

(IV) 10, 11 y 12

Veamos cómo balancear las reacciones elegidas:

Para la reacción (I), tomamos la reacción (1) y le sumamos las 3, 4, 7, 11(directa) y 12(directa) multiplicadas por factores a, b, c, d y e respectivamente. Balanceamos las especies estacionarias:

Para CH_3 $a = 1$

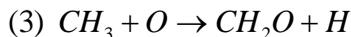
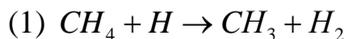
Para O $a + d = 0$, luego $d = -1$

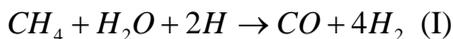
Para CH_2O $b = a$, luego $b = 1$

Para CHO $c = b$, luego $c = 1$

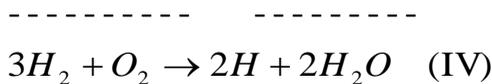
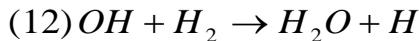
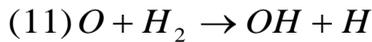
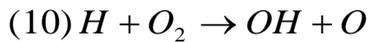
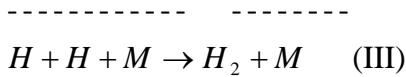
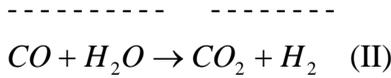
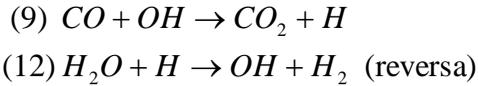
Para OH $e = d$, luego $e = -1$

Luego debimos haber tomado las 11 y 12 reversas. Verificamos sumando miembro a miembro:





Hemos hallado la reacción reducida (I). Las tres restantes son más sencillas:



Hemos obtenido un sistema de cuatro reacciones en las siete especies no-estacionarias.

Hallamos ahora las velocidades de reacción de estas nuevas reacciones. Utilizando resultados anteriores:

$$\dot{\Gamma}_{CH_4} = -w_1 - w_2 = -w_I$$

$$\rightarrow w_I = w_1 + w_2$$

$$\dot{\Gamma}_{CO_2} = w_9 = w_{II} \rightarrow w_{II} = w_9$$

$$\dot{\Gamma}_{O_2} = -w_{10} - w_{16} = -w_{IV}$$

$$\rightarrow w_{IV} = w_{10} + w_{16}$$

$$\begin{aligned} \dot{\Gamma}_H &= -2w_1 - 2w_2 - 2w_6 - 2w_8 + \\ &2w_{10} - 2w_{14} - 2w_{15} + 2w_{16} \\ &= -2w_I - 2w_{III} + 2w_{IV} \end{aligned}$$

Reemplazando w_I , w_{II} y w_{IV}

$$w_{III} = w_6 + w_8 + w_{14} + w_{15}$$

Las nuevas velocidades de reacción se pueden calcular si sabemos algunas de las velocidades de reacción originales. Verificamos si se pueden calcular:

$$w_1 = k_1 [CH_4][H]$$

$$w_2 = k_2 [CH_4][OH]$$

$$w_6 = k_6 [CHO][H]$$

$$w_8 = k_8 [CH][O_2]$$

$$w_9 = k_{9d} [CO][OH] - k_{9r} [CO_2][H]$$

$$w_{10} = k_{10d} [H][O_2] - k_{10r} [OH][O]$$

$$w_{14} = k_{14} [H][O_2][M]$$

$$w_{15} = k_{15} [H][OH][M]$$

$$w_{16} = k_{16} [H][HO_2]$$

Luego, aparte de las especies no-estacionarias necesitamos las concentraciones de CHO, HO₂, OH y O. Para obtenerlas partimos de las velocidades de creación/destrucción de las especies estacionarias:

$$\dot{\Gamma}_{CH_3} = w_1 + w_2 - w_3 = 0$$

$$\dot{\Gamma}_{CH_2O} = w_3 - w_4 - w_5 = 0$$

$$\dot{\Gamma}_{CHO} = w_4 + w_5 - w_6 - w_7 - w_8 = 0$$

Sumándolas obtenemos $w_1 + w_2 = w_6 + w_7 + w_8$, que escribimos:

$$\begin{aligned} k_1 [CH_4][H] + k_2 [CH_4][OH] = \\ k_6 [CHO][H] + k_7 [CHO][M] + \\ k_8 [CHO][O_2] \quad (a) \end{aligned}$$

También de $\dot{\Gamma}_{HO_2} = 0$ obtenemos

$w_{14} = w_{16} + w_{17} + w_{18} - w_8$, que escribimos:

$$\begin{aligned} k_{14} [H][O_2][M] = \\ (k_{16} + k_{17})[H][HO_2] + k_{18} [OH][HO_2] - \\ k_8 [CHO][O_2] \quad (b) \end{aligned}$$

Hasta aquí sólo hemos utilizado la hipótesis de estado estacionario. Planteamos ahora que las reacciones 11 y 12 están en equilibrio:

$$[O] = \frac{[H][OH]}{[H_2]K_{11}} \quad (d)$$

$$[OH] = \frac{[H][H_2O]}{[H_2]K_{12}} \quad (c)$$

Luego, con las especies no-estacionarias obtenemos [OH] de (c), y sucesivamente [O] de (d), [CHO] de (a) y [HO₂] de (b).

La concentración del gas de baño [M] se calcula de diversas maneras para las distintas reacciones. En general M representa la concentración de la mezcla en moles por m³, y para la reacción 3

$$[M] = \frac{\rho}{W}. \quad \{1.35\}$$

Para las reacciones 14, 15 y III se calcula utilizando las eficiencias catalíticas recomendadas según la fórmula

$$[M] = \sum_i e_i [i]. \quad \{1.36\}$$

donde e_i son las eficiencias catalíticas y $[i]$ es la concentración de las especies. Tenemos

$$[M]_{14} = 8.6[H_2O] + 4.2[CO_2] + 2.86[H_2] + 2.11[CO] + 1.26[N_2]$$

$$[M]_{15} = 20.0[H_2O]$$

$$[M]_{III} = 6.0[H_2O] + 2.0[H] + 3.0[H_2]$$

Finalmente, de $\dot{\Gamma}_{CH_3} = 0$ obtenemos $w_3 = w_1 + w_2$, que escribimos:

$$k_3[CH_3][O] = k_1[CH_4][H] + k_2[CH_4][OH],$$

de donde obtenemos $[CH_3]$, y de $\dot{\Gamma}_{CH_2O} = 0$ obtenemos

$w_3 = w_4 + w_5$, que escribimos:

$$k_3[CH_3][O] = k_4[CH_2O][H] + k_5[CH_2O][OH]$$

de donde obtenemos $[CH_2O]$.

Notamos que de las 7 especies no-estacionarias, 3 se pueden obtener por balance de las especies atómicas C, O y H (conservación del número de átomos). Luego, sólo es necesario saber 4 especies no-estacionarias para calcular las otras 3, y de ellas las restantes 6 estacionarias y el gas de baño.

En resumen,

- Hemos asumido 6 especies en estado estacionario y dos reacciones en equilibrio.
- Partiendo de una solución inicial aproximada de las concentraciones, calculamos las velocidades w_i del sistema original y de ellas las w_I a w_{IV} . Notar que las primeras responden a la ley de acción de masas, no así las segundas.
- Con las velocidades de reacción del sistema reducido resolveremos ecuaciones de transporte para cuatro

especies no-estacionarias, con términos de creación/destrucción que serán, por ejemplo:

$$\dot{\Gamma}_{CH_4} = -w_I$$

$$\dot{\Gamma}_{CO_2} = w_{II}, \text{ etc.}$$

- Obtenemos las otras tres no-estacionarias de relaciones algebraicas (balance de átomos)
- Obtenemos las 6 estacionarias de relaciones algebraicas
- Calculamos la concentración del gas de baño
- Iteramos para ajustar la solución

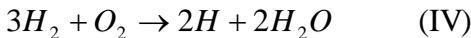
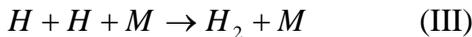
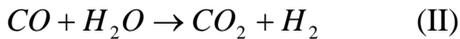
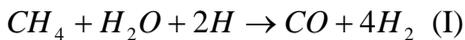
Las propiedades de la mezcla se calculan una vez obtenida un juego de concentraciones como

$$W = \frac{1}{\sum_i \frac{y_i}{W_i}}$$

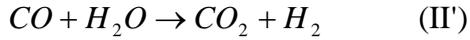
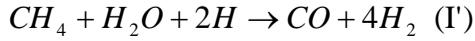
$$\rho = \frac{pW}{\mathfrak{R}T}$$

La elección de las cuatro reacciones para comenzar a generar el sistema reducido se basa en experiencia. Por ejemplo, las reacciones 1 y 9 se eligen por ser las más lentas del conjunto, mientras que las 14 y 10 se eligen por ser de inicio y terminación del sistema O-H.

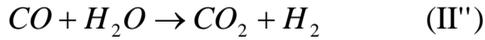
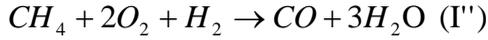
Luego, el mecanismo de reacción reducido es:



Si consideramos la reacción III, cuya velocidad de reacción es muy alta, podemos sumarla con la IV para obtener un mecanismo de tres pasos:



La velocidad de III' es mucho mayor que la de I' por lo que si la multiplicamos por 2 y la sumamos a I' obtenemos el mecanismo de dos pasos (debemos también sumar la inversa de III):



Y finalmente, si asumimos H_2 o CO en estado estacionario obtenemos la reacción de un solo paso:



Apéndice C: Ecuaciones de Navier-Stokes en varios sistemas de coordenadas

- Coordenadas cartesianas ortogonales x, y, z

Componente x

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial \rho u u}{\partial x} + \frac{\partial \rho v u}{\partial y} + \frac{\partial \rho w u}{\partial z} = -\frac{\partial p}{\partial x} - \left(\frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} \right)$$

Componente y

$$\frac{\partial \rho v}{\partial t} + \frac{\partial \rho u v}{\partial x} + \frac{\partial \rho v v}{\partial y} + \frac{\partial \rho w v}{\partial z} = -\frac{\partial p}{\partial y} - \left(\frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zy}}{\partial z} \right)$$

Componente z

$$\frac{\partial \rho w}{\partial t} + \frac{\partial \rho u w}{\partial x} + \frac{\partial \rho v w}{\partial y} + \frac{\partial \rho w w}{\partial z} = -\frac{\partial p}{\partial z} - \left(\frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zz}}{\partial z} \right)$$

Componentes del tensor de tensiones de Reynolds

$$\tau_{xx} = -\mu \left[2 \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{2}{3} \theta \right]$$

$$\tau_{yy} = -\mu \left[2 \frac{\partial v}{\partial y} - \frac{2}{3} \theta \right]$$

$$\tau_{zz} = -\mu \left[2 \frac{\partial w}{\partial z} - \frac{2}{3} \theta \right]$$

$$\tau_{xy} = \tau_{yx} = -\mu \left[\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right]$$

$$\tau_{yz} = \tau_{zy} = -\mu \left[\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right]$$

$$\tau_{zx} = \tau_{xz} = -\mu \left[\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right]$$

- Coordenadas cilíndricas r, φ, z

Componente r (velocidad u)

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial \rho u u}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial \rho v u}{\partial \varphi} - \frac{\rho v^2}{r} + \frac{\partial \rho w u}{\partial z} = \\ - \frac{\partial p}{\partial r} - \left(\frac{1}{r} \frac{\partial (r \tau_{rr})}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial \tau_{r\varphi}}{\partial \varphi} - \frac{\tau_{\varphi\varphi}}{r} + \frac{\partial \tau_{rz}}{\partial z} \right) \end{aligned}$$

Componente φ (velocidad v)

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho v}{\partial t} + \frac{\partial \rho u v}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial \rho v v}{\partial \varphi} + \frac{\rho u v}{r} + \frac{\partial \rho w v}{\partial z} = \\ - \frac{1}{r} \frac{\partial p}{\partial \varphi} - \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial (r^2 \tau_{r\varphi})}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial \tau_{\varphi\varphi}}{\partial \varphi} + \frac{\partial \tau_{\varphi z}}{\partial z} \right) \end{aligned}$$

Componente z (velocidad w)

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho w}{\partial t} + \frac{\partial \rho u w}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial \rho v w}{\partial \varphi} + \frac{\partial \rho w w}{\partial z} = \\ - \frac{\partial p}{\partial z} - \left(\frac{1}{r} \frac{\partial (r \tau_{rz})}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial \tau_{z\varphi}}{\partial \varphi} + \frac{\partial \tau_{zz}}{\partial z} \right) \end{aligned}$$

Componentes del tensor de tensiones de Reynolds

$$\tau_{rr} = -\mu \left[2 \frac{\partial u}{\partial r} - \frac{2}{3} \theta \right]$$

$$\tau_{\varphi\varphi} = -\mu \left[2 \left(\frac{1}{r} \frac{\partial v}{\partial \varphi} \right) - \frac{2}{3} \theta \right]$$

$$\tau_{zz} = -\mu \left[2 \frac{\partial w}{\partial z} - \frac{2}{3} \theta \right]$$

$$\tau_{r\varphi} = \tau_{\varphi r} = -\mu \left[\frac{\partial u}{\partial \varphi} + \frac{\partial v}{\partial r} \right]$$

$$\tau_{\varphi z} = \tau_{z\varphi} = -\mu \left[\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial w}{\partial \varphi} \right]$$

$$\tau_{zr} = \tau_{rz} = -\mu \left[\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial r} \right]$$

$$\theta = \frac{1}{r} \frac{\partial (ru)}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial v}{\partial \varphi} + \frac{\partial w}{\partial z}$$

Apéndice D: Software de generación de coordenadas ajustadas al contorno

En el disco adjunto se encuentra la carpeta BFC que contiene los programas FORTRAN para generar grillas ajustadas al contorno. El uso de estos programas fue presentado en un Congreso en el paper que se incluye en este Apéndice.

Se comienza por crear un archivo BOUN.DAT con los datos del contorno a fin de poder correr el programa BOUN.FOR, que creará los archivos de datos necesarios para correr el generador de grilla.

La forma de describir las fronteras se describe en el paper citado. El archivo BOUN.DAT se describe a continuación para el caso ejemplificado en el paper; lo indicado entre asteriscos es comentario y no debe estar en el archivo:

```
1/ngrid*Numero de grillas*
  3,1,3,3/nsxm,nsxp,nsym,nsyp      *Numero          de
segmentos en cada lado; son cuatro lados*
  2,12, 22/jfxm      *Primer índice de cada
segmento en el lado xm*
  11,21, 31/jlxm     *Ultimo índice de cada
segmento en el lado xm*
  2/jfxp *Idem para xp*
  31/jlxp*Idem para xp*
  2,57, 60/ifym      *Idem para ym*
  56,59,134/ilym     *Idem para ym*
  2,57, 60/ifyp      *Idem para yp*
  56,59,134/ilyp     *Idem para yp*
  1, 1, 1/nbitxm     *Numero de trozos en que se
dividen los segmentos de xm*
  1/nbitxp      *Idem para xp*
  3, 1, 5/nbitym     *Idem para ym*
  3, 1, 5/nbityp     *Idem para yp*
  1,1,1/nclxm      *Clase de los trozos de xm: 1:
recta; 2: arco de circulo; 3: curva de 5 puntos*
  1/ncxp *Idem para xp*
  2,2,3,1,2,2,3,2,2/nclym      *Idem para ym*
```

2,2,3,1,2,2,3,2,2/nclyp *Idem para yp*
 14.000000,12.367763,12.367763,10.636224,10.636
 224, 9.000000/xinxm *Coordenada x de los trozos
 de xm; como son rectas se dan dos puntos*
 12.692308,16.342345,16.342345,20.196117,20.196
 117,23.846154/yinxm *Coordenada y de los
 trozos, idem.*
 53.928571,52.964286/xinxp *Idem para xp*
 31.000000,40.000000/yinxp *Idem para xp*

*Siguen las coordenadas de los trozos de ym e
 yp. Para los arcos de circulo se dan tres pares de
 valores (x,y): dos extremos y el centro del
 circulo. Para las curvas de 5 puntos, 5 pares de
 valores (x,y). Para las rectas, dos pares de
 valores (x,y). Por ejemplo, las coordenadas x para
 ym,

que tiene clases (2,2,3,1,2,2,3,2,2) son:
 14.000000,16.454335,18.200000, *arco*
 18.200000,19.945665,23.802391, *arco*
 23.802391,24.900000,29.500000,33.200000,34.200
 000, *curva*
 34.200000,35.000000, *recta*
 35.000000,34.569587,35.442158, *arco*
 35.442158,36.314730,35.900000, *arco*
 35.900000,36.900000,40.500000,44.300000,45.814
 672, *curva*
 45.814672,43.219164,49.000000, *arco*
 49.000000,54.780836,53.928571 *arco*

Escritas todas en una sola línea:

14.000000,16.454335,18.200000,18.200000,19.945
 665,23.802391,23.802391,24.900000,29.500000,33.2000
 00,34.200000,34.200000,35.000000,35.000000,34.56958
 7,35.442158,35.442158,36.314730,35.900000,35.900000
 ,36.900000,40.500000,44.300000,45.814672,45.814672,
 43.219164,49.000000,49.000000,54.780836,53.928571/x
 inym (nsxm,nbit,npoint)
 12.692308,
 7.217252,12.957692,12.957692,18.698132,14.101865,14
 .101865,15.003817,18.401760,20.738026,21.314857,21.

```

314857,21.000000,21.000000,21.775002,21.618468,21.6
18468,21.461933,22.245440,22.245440,22.764380,24.46
6836,25.999182,26.538465,26.538465,34.105719,28.575
625,28.575625,23.045531,31.000000/yinym (nsxm,nbit,n
point)
9.000000,
7.200154,11.600154,11.600154,16.000154,13.800154,13
.800154,14.400000,21.300000,27.500000,28.500000,28.
500000,29.000000,29.000000,29.290641,29.911956,29.9
11956,30.533270,30.800000,30.800000,32.200000,38.50
0000,45.300000,46.408565,46.408565,46.639699,49.375
860,49.375860,52.112021,52.964286/xinyp (nsxm,nbit,n
point)
23.846154,27.861195,27.861195,27.861195,27.861
195,31.671707,31.671707,32.014049,35.415650,37.7115
04,38.020080,38.020080,39.000000,39.000000,37.99260
5,38.837167,38.837167,39.681729,38.667741,38.667741
,39.020442,40.232082,40.875115,40.916049,40.916049,
32.919389,40.436930,40.436930,47.954471,40.000000/y
inyp (nsxm,nbit,npoint)

```

La figura siguiente ilustra el caso a resolver:

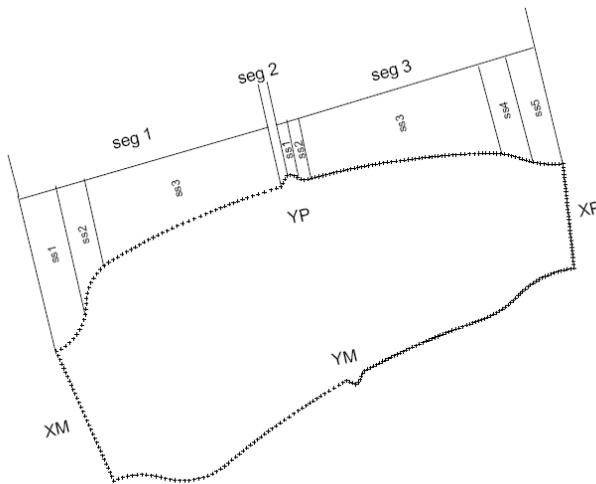


Figura D.1: Fronteras y puntos

Una vez generado el archivo BOUN.DAT se procede a compilar y correr el programa BOUN.FOR con un compilador FORTRAN.

Se crean así dos archivos de salida, BOUN.OUT y BOUN.PLT. El primero sirve para una verificación visual de las coordenadas del contorno y el segundo se puede utilizar para graficar el contorno utilizando el utilitario TECPLOT y al mismo tiempo sirve como archivo de entrada para el generador de grilla.

Se procede a compilar y correr el programa GRAPE.FOR. Esta es una versión modificada y ampliada del programa GRAPE de Sorenson (ver el paper adjunto). El programa original creaba grillas ajustadas al contorno para formas (especialmente perfiles aerodinámicos) en un medio infinito, por lo que había dos fronteras: una interna (el perfil) y una externa (el infinito); vale decir, era para flujos exteriores. Este programa fue ampliado para generar grillas entre cuatro fronteras y ser aplicable a flujos interiores.

El programa original no puede correr sin una solución inicial aproximada, por lo que el nuevo programa contiene una sección que crea una grilla inicial por interpolación bilineal entre las cuatro fronteras, como se describe en el paper. Esta grilla inicial la escribe el programa en el archivo ICOND.OUT, nuevamente para ser graficado por TECPLOT. La figura siguiente ilustra la grilla inicial:

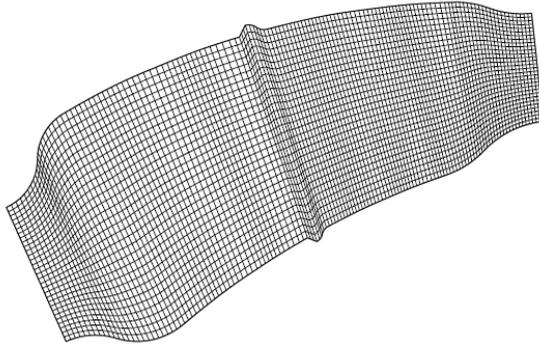


Figura D.2: Grilla inicial

Otra diferencia entre el programa original y el presente es que el resolvidor de las ecuaciones diferenciales discretizadas no puede resolver casos en que una frontera sea perfectamente paralela a uno de los ejes coordenados, por lo que el programa inicialmente gira todo el problema 3 grados en dirección contraria a las agujas del reloj.

Los parámetros p , q , r y s y a , b , c , d (ver Capítulo 8) y otros parámetros del resolvidor se encuentran en el archivo GRAPE.DAT.

El programa genera un archivo de salida GRAPE.OUT que contiene los datos de entrada y el progreso de la solución, el archivo MESH.DAT que contiene las métricas de la grilla (α , β , γ , y el jacobiano) y el archivo MESH.OUT que contiene la grilla terminada para graficar con TECPLOT.

La figura siguiente ilustra el resultado final:

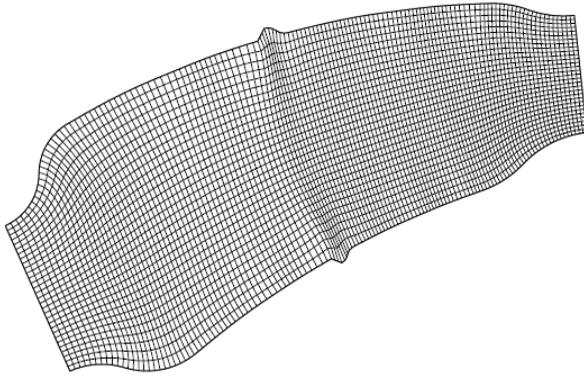


Figura D.3: Grilla ajustada al contorno

A public-domain quasi-orthogonal BFC meshing code

Eduardo Brizuela, Departamento de Mecánica y Naval, Facultad de Ingeniería, Universidad de Buenos Aires, Paseo Colón 850, (1063) Capital, Argentina, ebrizue@fi.uba.ar

Victoria Echaniz, Departamento de Mecánica, Universidad Nacional de Mar del Plata, J. B. Justo 4302, (7600) Mar del Plata, Argentina.

ABSTRACT

A set of programs is presented for the modelling of boundaries and the generation of quasi-orthogonal, 2-D meshes in closed, four-boundary domains by means of a Poisson equation. The programs are offered freely in source code form to interested users.

1.0 INTRODUCTION

The numerical solution of continuum problems requires the subdivision of the computational domain into finite size cells by means of a mesh of lines. The simplest manner to generate such a mesh is to use Cartesian coordinates, either rectilinear (x,y,z), cylindrical (x,r, θ) or spherical (r, θ, ϕ).

However, if the computational domain has boundaries which are sloping with respect to the axes, are curved, or are broken into angled segments, the use of Cartesian coordinates may produce meshes with large numbers of cells outside the computational domain (dead cells), and model sloping and curved boundaries as staircase lines. This results in wasted computational effort and poor modelling of the physical boundaries.

In these cases it is advisable to use Boundary Fitted Coordinates (in two dimensions, usually named ξ and η) by which means the mesh only covers the computational domain (no dead cells) and follows the boundary with greater accuracy. Transport and other equations to be solved numerically are transformed into generalised coordinates by the known methods of calculus.

If the BFC mesh is perfectly orthogonal some terms in the transformed equations (e.g., involving some cross-derivatives) may be simplified. However, it is often difficult if not impossible to generate a perfectly orthogonal mesh inside arbitrary boundaries, and an approximation (a quasi-orthogonal mesh) is usually accepted, at the cost of retaining the cross-derivative terms.

The mesh described above is of the structured, simple type. Unstructured (e.g., triangular) meshes and composite meshes (i.e., with zones of finer meshing) can also be constructed. Meshes may be generated by algebraic or differential methods, and they may also be suitable for multigrid schemes. They may also be generated in 2-D or 3-D form.

There is an abundant body of literature on grid generation, and here we only cite Gerolymos and Tsanga (1999), Shih et. al. (1990) and Thompson et. al. (1974) as examples of reviews of previous work and of grid generation methods.

Despite the advanced state of grid generation techniques alluded to above, BFC generating codes, particularly for closed, four boundary domains, are not readily available in source code for the user or developer of numerical methods. Even less material is publicly accessible regarding the generation of the mathematical model of the boundaries as an input to the mesh generator.

In this work we present three programs which are thus put in the public domain for:

- describing in a simple manner the four boundaries of a computational domain and distributing points along those boundaries (program BOUN),
- Generating an algebraic mesh which will serve as initial condition for the subsequent quasi-orthogonal mesh generator (subroutine IC), and
- generating a quasi-orthogonal 2-D BFC mesh by the use of a Poisson differential equation (program MESH).

2.0 BOUNDARY DESCRIPTION

The computational domain is assumed bounded by four boundary lines, joined at four vertices (which do not necessarily have to mark a discontinuity in slope).

Each boundary may be divided into segments and these in turn into sub-segments, to enable assigning the desired number of points to each chosen sector of the boundary. Each sub-segment is described as belonging to one of three classes of lines:

- a straight line, given by its two end points,
- an arc of circle, defined by its end points and its center, or
- a general 5-point line, defined by two end points and three internal points.

Slope matching between the 5-point curve and other curves may be achieved by placing two of the internal points close to the end points (spline slope matching).

The program computes the length of boundary for each segment and places the desired number of points along the segment (i.e., along consecutive sub-segments) with an even spacing.

Note that a segment beginning and ending do not have to coincide with the beginning or ending of a line of a class; e.g., an arc of circle may be shared between two adjacent segments or sub-segments.

Given the flexibility in the subdivision of the boundary it has not been considered necessary to provide for the distribution of points in other than an evenly spaced manner. Arithmetic, geometric or other series, however, could easily be implemented for better matching between segments with fine and coarse point distributions.

By convention the boundaries where the generalised coordinate ξ and its corresponding point index i are minimum and maximum are indicated XM and XP (x-minus and x-plus), and the other pair of boundaries, where η and j are minimum and maximum are YM and YP. For a structured grid, opposed boundaries (e.g., XM and XP) must have the same number of points.

Fig 1 shows the point distribution produced for a domain similar to the longitudinal section of a gas turbine combustor. For this example, XM and XP consist of 3 and 1 segments respectively, all comprising only one sub-segment each of one class (straight line). The three segments of XM have 10 cells each (total 31 points) and the single segment of XP has 30 cells (31 points).

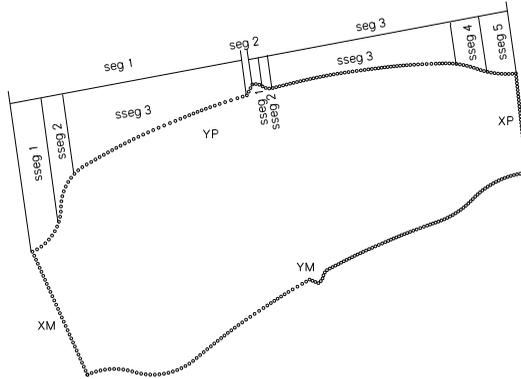


FIGURE 1: Example boundary and point distribution

YM and YP boundaries have been generated using 3 segments, each in turn comprising 3, 1 and 5 sub-segments. For the first segment, the three sub-segments are two arcs of circle and a 5-point curve. For the second segment, the sole sub-segment is a straight line (the inlet slot for secondary air). The third segment has 5 sub-segments: two arcs of circle for the secondary air slot joggle, one 5-point curve, and two arcs of circle to join with XP. The three segments have 55, 3 and 75 cells each, for a total of 134 points along YM and YP.

3.0INITIAL CONDITIONS

The program which generates the quasi-orthogonal mesh requires a reasonably good initial set of values for the coordinates of the internal mesh points; the usual assumptions of all zeroes or all ones will result in failure to start.

Hence the mesh program starts with a subroutine IC which generates an initial mesh by double linear interpolation between the four boundaries using the point distribution generated by program BOUN.

Consider the domain of Figure 2, where the four boundaries are known and, for the mesh lines of index i and j and generalised coordinates ξ and η , all that is unknown is the location of C_3 .

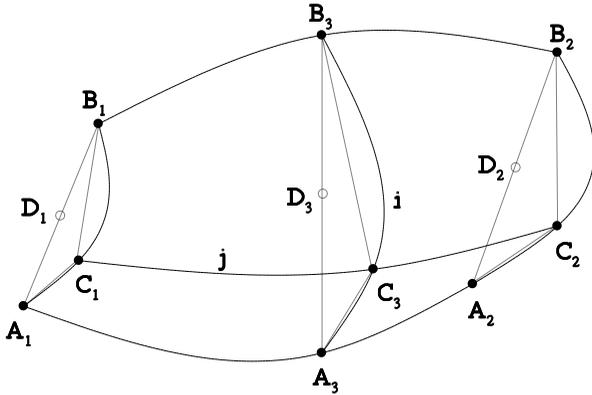


FIGURE 2: General 2-D case

We start with a simplified case where the distances $A_1B_1 = A_2B_2 = A_3B_3$, and the YM and YP boundaries are straight, parallel lines and so are A_1B_1 and A_2B_2 (see Figure 3). For simplicity we assume A_3B_3 to be the correct value (i.e., that of Figure 2).

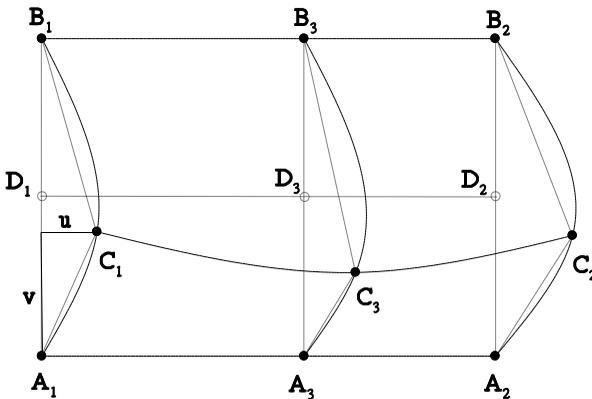


FIGURE 3: Starting case

The generalised coordinates in this plane are u and v , and we interpolate:

$$u_3 = u_1 + r(u_2 - u_1) \quad (1)$$

$$v_3 = v_1 + r(v_2 - v_1) \quad (2)$$

$$r = \frac{D_3 D_1}{D_2 D_1} \quad (3)$$

where D_i is the mid-point of A_iB_i .

To convert these (u,v) coordinates into (ξ,η) BFC we first scale triangles 1 and 2 by the scale factors A_1B_1/A_3B_3 and A_2B_2/A_3B_3 :

$$\xi_1 = u_1 \frac{A_1B_1}{A_3B_3}, \xi_2 = u_2 \frac{A_2B_2}{A_3B_3}, \xi_3 = u_3 \quad (4)$$

$$\eta_1 = v_1 \frac{A_1B_1}{A_3B_3}, \eta_2 = v_2 \frac{A_2B_2}{A_3B_3}, \eta_3 = v_3 \quad (5)$$

All that is left now is to shift triangles 1 and 2 to the true positions of D_1 and D_2 , and to rotate the triangles to the true angular positions of A_1B_1 and A_2B_2 . Figure 4 illustrates the final position, which coincides with Figure 2, to clarify scaling, shift and rotation.

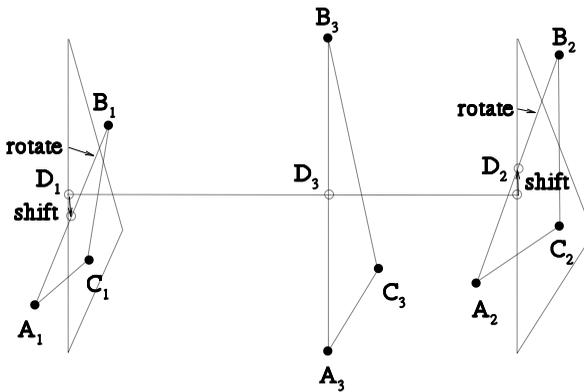


FIGURE 4: Scaling, shift and rotation

The result for the example case is shown in Figure 5. It is evident that the algebraic mesh thus generated, although satisfactory as an initial condition, is far from being orthogonal, and that some cells are unnecessarily distorted.

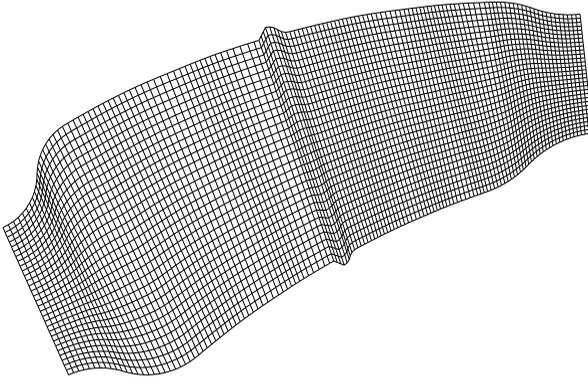


FIGURE 5: Initial mesh

4.0 QUASI-ORTHOGONAL MESH GENERATION

The generation of the quasi-orthogonal BFC mesh is done in program MESH, which is a heavily modified version of the program GRAPE (Sorenson, 1980).

MESH differs from GRAPE in that it has been altered and extended from two to four boundaries and in that it is applied to internal domains, whereas GRAPE was aimed at the simulation of external flows over submerged bodies.

However, MESH still solves the Poisson equations

$$\alpha x_{\xi\xi} - 2\beta x_{\xi\eta} + \gamma x_{\eta\eta} = -J^2(Px_{\xi} + Qx_{\eta}) \quad (6)$$

$$\alpha y_{\xi\xi} - 2\beta y_{\xi\eta} + \gamma y_{\eta\eta} = -J^2(Py_{\xi} + Qy_{\eta}) \quad (7)$$

with the metrics

$$\alpha = x_{\eta}x_{\eta} + y_{\eta}y_{\eta} \quad (8)$$

$$\beta = x_{\xi}x_{\eta} + y_{\xi}y_{\eta} \quad (9)$$

$$\gamma = x_{\xi}x_{\xi} + y_{\xi}y_{\xi} \quad (10)$$

$$J = x_{\xi}y_{\eta} - x_{\eta}y_{\xi} \quad (11)$$

and the decay functions

$$P(\xi, \eta) = p(\xi)e^{-a\eta} + r(\xi)e^{-c(\eta_{\max} - \eta)} \quad (12)$$

$$Q(\xi, \eta) = q(\xi)e^{-b\eta} + s(\xi)e^{-d(\eta_{\max} - \eta)} \quad (13)$$

where a, b, c, and d are numerical constants and p, q, r, and s are functions of the auxiliary variables R_1 to R_4 :

$$R_1 = \left[\frac{\alpha x_{\xi\xi} - 2\beta x_{\xi\eta} + \gamma x_{\eta\eta}}{J^2} \right]_{\eta=0} \quad (14)$$

$$R_2 = \left[\frac{\alpha y_{\xi\xi} - 2\beta y_{\xi\eta} + \gamma y_{\eta\eta}}{J^2} \right]_{\eta=0} \quad (15)$$

$$R_3 = \left[\frac{\alpha x_{\xi\xi} - 2\beta x_{\xi\eta} + \gamma x_{\eta\eta}}{J^2} \right]_{\eta=\eta_{\max}} \quad (16)$$

$$R_4 = \left[\frac{\alpha y_{\xi\xi} - 2\beta y_{\xi\eta} + \gamma y_{\eta\eta}}{J^2} \right]_{\eta=\eta_{\max}} \quad (17)$$

$$p(\xi) = \left[\frac{y_{\eta} R_1 - x_{\eta} R_2}{J} \right]_{\eta=0} \quad (18)$$

$$q(\xi) = \left[\frac{x_{\xi} R_2 - y_{\xi} R_1}{J} \right]_{\eta=0} \quad (19)$$

$$r(\xi) = \left[\frac{y_{\eta} R_3 - x_{\eta} R_4}{J} \right]_{\eta=\eta_{\max}} \quad (20)$$

$$s(\xi) = \left[\frac{x_{\xi} R_4 - y_{\xi} R_3}{J} \right]_{\eta=\eta_{\max}} \quad (21)$$

The four constants a, b, c, and d control how far into the mesh (from the boundary inwards) will extend the preset condition of orthogonality between boundary and mesh lines. With a smaller value of the constants the condition extends further but convergence becomes more difficult.

Figures 6 and 7 show the finished mesh for a, b, c and d equal to 0.01 and 0.2 respectively in the joggle region, and 0.2 elsewhere. The figures show these to be more satisfactory meshes than the initial mesh, with quasi-orthogonal meshing, near-orthogonal boundary intersects and lesser distortion of cells.

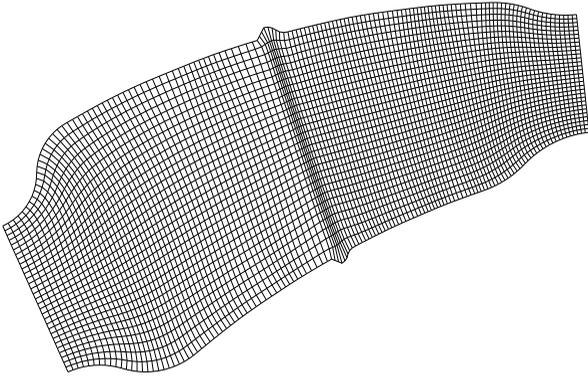


FIGURE 6: Mesh with slow decay in a region

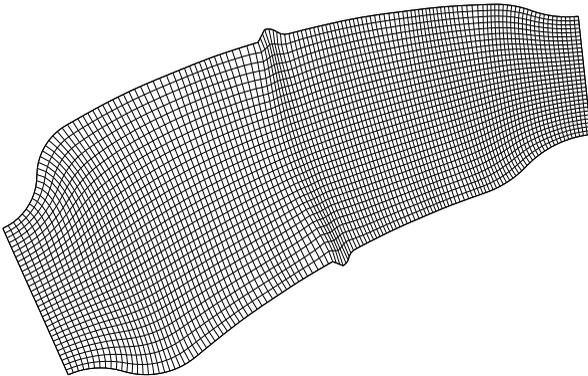


FIGURE 7: Mesh with fast decay

5.0 CONCLUSION

A set of programs has been created to generate structured BFC meshes in two-dimensional domains enclosed by four boundaries.

The programs allow for relatively easy generation of the boundaries and point distribution along the same, and generate quasi-orthogonal meshes by means of a Poisson equation, offering control of mesh line angles and other refinements.

The set of programs and examples are freely available in source code from the authors.

6.0 REFERENCES

Gerolymos, G. A., and Tsanga, G., 1999, "Biharmonic three-dimensional grid generation for axial turbomachinery with tip clearance", *Journal of Propulsion and Power*, Vol. 15, No. 3, May-June 1999, pp. 476-479.

Shih, T, I-P., Bailey, R. T., Nguyen, H. L., and Roelke, R. J., 1990, "GRID2D/3D - A computer program for generating grid systems in complex-shaped two and three-dimensional spatial domains", NASA Technical Memorandum TM-102453, 1990.

Sorenson, R. L., 1980, "A computer program to generate two-dimensional grids about airfoils and other shapes by the use of Poisson's equation", NASA Technical Memorandum TM-81198, 1980.

Thompson, J. F., Thames, F. C., and Mastin, C, W, 1974, "Automatic numerical generation of body-fitted curvilinear coordinate system for field containing any number of arbitrary two-dimensional bodies", *Journal of Computational Physics*, Vol. 15, pp. 299-319, 1974.

Apéndice E: Software para realizar cálculos de equilibrio químico

En el disco adjunto se encuentra la carpeta EQUIL que contiene los programas necesarios para calcular el equilibrio químico de una mezcla de gases, incluyendo fases condensadas. Esta es una versión para PC del código de equilibrio de la Universidad de Stanford utilizando las subrutinas del código original CHEMKIN de Sandia Laboratorios. Es un conjunto de programas de uso público. En el Capítulo 11 se encuentra más información sobre este tema.

Para comenzar se requiere correr el programa DINTERPC.FOR que interpreta (traduce al lenguaje de DEQUILPC) qué elementos y especies químicas se considerarán. Estos datos están detallados en el archivo INRATE, del cual se ilustra un ejemplo para el Metano con cuatro elementos y 17 especies:

```
ELEMENTS
C H O N
END
SPECIES
CH4 CO2 H2O CO H2 N2
CH3 H O OH HCO HO2
CH2O O2 CH3O H2O2 C
END
```

Este archivo puede contener hasta 8 elementos de la tabla periódica y hasta 40 especies.

En la carpeta se incluyen dos ejemplos, uno para el Metano (el ilustrado arriba) llamado INRATE_CH4, y otro para el Etileno, llamado INRATE_C2H4. Una vez compilado DINTERPC, se debe copiar uno de los archivos ejemplo (o crear uno nuevo) al archivo INRATE, borrar el archivo LINK.BIN (si existe) y correr DINTERPC.

DINTERPC hace uso de las tablas de propiedades termodinámicas de la NASA contenidas en el archivo NASACOMB.DAT. Las especies incluidas en INRATE deben estar tabuladas en NASACOMB.

La salida de DINTERPC es el archivo LINK.BIN, un archivo sin formato que no puede leerse con los utilitarios comunes, que es archivo de entrada para el programa de equilibrio.

Para correr el programa de equilibrio se necesita también un archivo de entrada como el CH4.IN, que contiene los datos de la mezcla.

Este archivo de entrada tiene la siguiente estructura:

```
HP (o TV o UV o TP)
P          T
Especie 1 Concentración
  " 2 Concentración
  " 3 Concentración
END
END
```

Las opciones son:

TV: Temperatura y densidad fija a los valores de entrada

UV: idem, energía interna y densidad

HP: idem, entalpía y presión

TP: idem, temperatura y presión

Las presiones están en atmósferas y la temperatura en Kelvin.

Las concentraciones están en moles; no es necesario que su suma dé 1. Por ejemplo

```
CH4    .05
N2     3.76
O2     1
```

Los moles de N2 están en la proporción correcta para el aire (3.76/1) con el O2. El programa corrige la composición a

```
CH4    .05/4.81    =    .0104
N2     3.76/4.81   =    .7867
O2     1/4.81      =    .2079
```

1

Lo contenido entre asteriscos es comentario y no debe estar en el archivo:

```
HP *Modelo, en este caso, a presión y entalpía constantes*
1.00000      298.000      *presión en atm. Y temperatura en
Kelvin*
CH4  0.50000 *Moles de la especie*
N2   3.76200 *Idem*
O2   1.00000 *Idem*
END
END
```

Es posible hacer varias corridas sucesivas, como ilustra el archivo C2H4.IN.

Para correr el programa de equilibrio se deben compilar y linkear los programas

```
dequilpc.for (programa de equilibrio)
dsymnum.for (programa de cálculo numérico)
dcklib.for (biblioteca de subrutinas de CHEMKIN)
vis.for (calcula viscosidad de la mezcla)
```

La salida típica DEQULPC.OUT se ilustra en la página siguiente.

Notar el cambio de peso molecular entre los reactantes (27.321) y los productos de equilibrio (25.910)

Notar también que la temperatura final es menor que la adiabática, ya que las especies intermedias no han completado su reacción.

```
ENTHALPY WILL BE EVALUATED AT THE INPUT
CONDITIONS AND HELD FIXED.  NORMALLY THE INPUT
TEMPERATURE WILL BE 300K.  THE ADIABATIC FLAME
TEMPERATURE WILL BE OUTPUT.
```

```
INPUT PRESSURE(ATM) AND TEMPERATURE(K):
P= 0.1000E+01ATM  TREF= 0.3360E+03K
```

```
INPUT MOLES OF NEXT SPECIES:
```

CH4 0.645806

INPUT MOLES OF NEXT SPECIES:

N2 3.76000

INPUT MOLES OF NEXT SPECIES:

O2 1.00000

INPUT MOLES OF NEXT SPECIES:

END

THE TOTAL ENTHALPY IS -0.2858E+10 ERGS/GM
COEFFICIENT OF VISCOSITY BASED ON MIXTURE 0.24714E-
06 WHICH GIVES A DYNAMIC VISCOSITY OF 0.43257E-04 KG/M-SEC
AT FINAL TEMPERATURE

(THIS IS ONLY A TEMPERATURE CORRECTION)

COMPOSITION AT T =2090.152 K P = 1.000 ATM.

INITIAL WT = 27.321 FINAL WT = 25.910

SPECIES GAS PHASE	MOL. FRACTION IN MIXTURE	MASS FRACTION IN MIXTURE	MOL. FRACTION IN GAS PHASE	
CH4	0.63033E-12	0.39029E-12	0.63033E-12	1
CO2	0.53526E-01	0.90917E-01	0.53526E-01	2
H2O	0.18374E+00	0.12775E+00	0.18374E+00	3
CO	0.59772E-01	0.64617E-01	0.59772E-01	4
H2	0.42412E-01	0.32998E-02	0.42412E-01	5
N2	0.65965E+00	0.71319E+00	0.65965E+00	6
CH3	0.22023E-12	0.12779E-12	0.22023E-12	7
H	0.60044E-03	0.23358E-04	0.60044E-03	8
O	0.30943E-05	0.19107E-05	0.30943E-05	9
OH	0.30021E-03	0.19705E-03	0.30021E-03	10
HCO	0.10281E-07	0.11515E-07	0.10281E-07	11
HO2	0.38449E-08	0.48979E-08	0.38449E-08	12
CH2O	0.16106E-08	0.18665E-08	0.16106E-08	13
O2	0.57788E-05	0.71367E-05	0.57788E-05	14
CH3O	0.15986E-15	0.19148E-15	0.15986E-15	15
H2O2	0.11200E-08	0.14703E-08	0.11200E-08	16
C	0.24552E-15	0.11382E-15	0.24552E-15	17

Apéndice F: Un programa de simulación numérica de la combustión

En el disco adjunto se encuentra la carpeta UIFLOW que contiene los programas necesarios para simular la combustión del caso de Spadaccini et al. Es una versión modificada y ampliada del original de S. P. Vanka, que fuera publicado en la Tesis de Cope (ver las referencias en el paper de Echaniz et al. adjunto).

El programa contiene subrutinas para simular la mezcla simple de reactantes (model = 1), la reacción de un solo paso (model = 2) (ver Capítulo 2) y la reacción de difusión turbulenta (model = 3) (ver Capítulo 10).

También contiene subrutinas para modelar la correlación $\overline{\rho'u'}$ (ver Capítulo 5) según varias alternativas: Utilizando un modelo de la ley de Fick (Kolbe and Kollmann, 1980), una ecuación de transporte para estas correlaciones (Kollmann and Vandromme, 1979) o un modelo heurístico.

En el primer caso se modelan:

$$\overline{u''} = \frac{\mu_t}{Sc_\rho} \frac{1}{(\overline{\rho})^2} \frac{\partial \overline{\rho}}{\partial x}, \quad \{\text{F-1}\}$$

$$\overline{v''} = \frac{\mu_t}{Sc_\rho} \frac{1}{(\overline{\rho})^2} \frac{\partial \overline{\rho}}{\partial r}, \quad \{\text{F-2}\}$$

En el segundo caso se resuelven ecuaciones de transporte para las correlaciones con términos de fuente:

$$\begin{aligned} & -\frac{\partial}{\partial x} \left(r\Gamma \frac{\partial}{\partial x} \overline{\rho'u'} \right) + \frac{r\mu_t}{Sc_{\rho v}} \frac{\partial \overline{u}}{\partial r} \frac{\partial \overline{\rho}}{\partial r} + r\overline{\rho'u'} \frac{\partial}{\partial r} \overline{\rho'v'} - \\ & r\overline{\rho\rho'v'} \frac{\partial \overline{u}}{\partial r} - rC_{1,\rho u} \overline{\rho} \frac{\varepsilon}{\kappa} \overline{\rho'u'} \end{aligned}$$

(para $\overline{\rho'u'}$) {F-3}

$$\begin{aligned}
& -\frac{\partial}{\partial x} \left(r\Gamma \frac{\partial}{\partial x} \overline{\rho'v'} \right) + \frac{r\mu_t}{\rho S c_{\rho v}} \frac{\partial \overline{\rho'u'}}{\partial r} \frac{\partial \overline{\rho}}{\partial r} + \\
& 2r \overline{\rho'v'} \frac{\partial}{\partial r} \overline{\rho'v'} + r C_{1\rho v} \overline{\rho} \kappa \frac{\partial \overline{\rho}}{\partial r} \quad (\text{para } \overline{\rho'v'}) \quad \text{F-4} \\
& -r C_{2\rho v} \overline{\rho} \frac{\varepsilon}{\kappa} \overline{\rho'v'}
\end{aligned}$$

donde los números de Schmidt tienen el valor de 1.5 y las constantes

$$C_{1\rho u} = 1.0, \quad C_{1\rho v} = 0.1, \quad \text{y} \quad C_{2\rho v} = 3.0.$$

En el tercer caso las correlaciones se modelan según una expresión aproximada:

$$\overline{\rho'u'_i} = R_i \sqrt{\overline{\rho'^2}} \sqrt{\kappa}, \quad \text{F-5}$$

de donde

$$\overline{u''_i} = -R_i \frac{\sqrt{\overline{\rho'^2}}}{\rho} \sqrt{\kappa}. \quad \text{F-6}$$

Para computar el valor cuadrático medio de la densidad $\sqrt{\overline{\rho'^2}}$ se construyeron tablas de equilibrio químico (ver Apéndice E) y se computaron los valores

$$\frac{1}{\rho} = \int_0^1 \frac{p(f)}{\rho^e(f)} df, \quad \text{y} \quad \text{F-7}$$

$$\rho = \int_0^1 p(f) \rho^e(f) df, \quad \text{F-8}$$

(ver Capítulos 3 y 10). Con esto, se puede obtener

$$\sqrt{\overline{\rho'^2}} = \sqrt{\rho - \overline{\rho}} \quad \text{F-9}$$

Para la función de distribución $p(f)$ se adoptó la función Beta (ver Ecuaciones 10.41 y siguientes). Los factores de correlación son $R_u = 1.0$, $R_v = 1.0$.

El programa también permite ensayar una versión modificada del modelo $\kappa-\epsilon$ por la teoría RNG (ver Capítulo 5).

Todas estas opciones se seleccionan en el archivo de entrada test*.in, donde el asterisco indica distintas combinaciones (reemplazar uiflow.in, removiendo la primera línea antes de usar).

El programa también utiliza el método multigrilla y las coordenadas ajustadas al contorno.

Las salidas principales son plotec.out (para ver con TECPLOT) y gnu.out (para ver con GNUPLOT). Los siguientes gráficos de temperatura y velocidad fueron creados con TECPLOT:

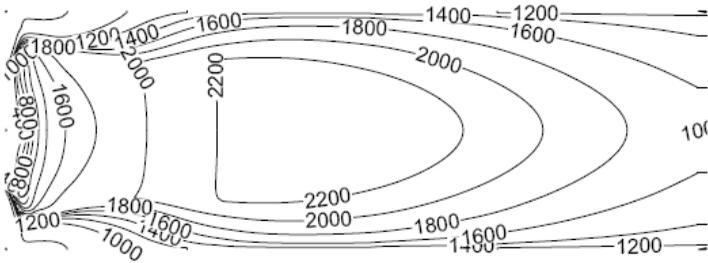


Figura F-1: Contornos de temperatura, x/d de 0 a 20

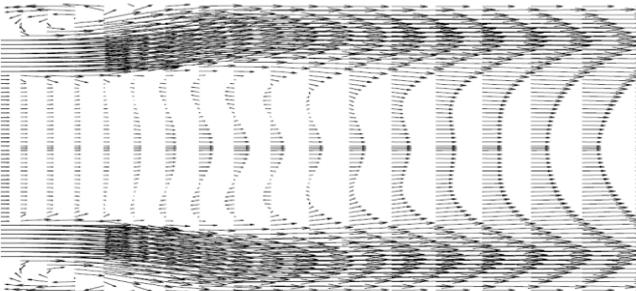


Figura F-2: Vectores velocidad, x/d de 0 a 2



NUMERICAL SIMULATION OF TURBULENT DIFFUSION FLAMES USING A 4-STEP MECHANISM

Victoria Echaniz, Samantha Lodi and Eduardo Brizuela
 Dep. Ing. Mecánica, Univ. Nacional de Mar del Plata, 7600 Mar del Plata - Argentina
 Robert W. Bilger
 Dept. of Mech. and Mechatronic Engineering, Univ. of Sydney, NSW 2006, Australia



SUMMARY

The combustion of hydrocarbons in air involves a large number of chemical reactions. To gain insight into the combustion process and for practical reasons a Reduced Reaction Scheme is used, with reaction rates determined either by kinetics or by the Eddy Break-Up theory. Results of the simulation of a turbulent, swirling, high pressure methane flame are presented and compared to experiment. Although results are satisfactory, improvements to the mixing model are needed to adequately assess and refine the chemical models.

INTRODUCTION

The combustion of hydrocarbons in air is governed by multistep mechanisms comprising one hundred or more reactions. Although it is not impossible to solve such systems, the solution process often obscures the progress of the reactions and makes it difficult to gain insights into the nature of combustion. Moreover, for practical calculations it is convenient to reduce the number of steps to a small number of significant reactions.

The method of reducing a full mechanism to a few significant reactions has been formalized (Chen, 1988) and even coded for automatic generation of Reduced Reaction Schemes (RRS) (Gottgens and Terhove, 1992). For the combustion of methane in air we have selected the scheme given by Bilger et al. (1990).

Having selected a RRS, for nonpremixed flames, it is necessary to consider the influence of mixing on the reaction rates. Although more advanced models are being developed, the Eddy Break-Up (EBU) model (Spalding, 1971) (Magnussen and Hjertager, 1977) is still used, due to its simplicity, to give the fast chemistry limit to the reaction rates. It has been shown (Brizuela and Bilger, 1996) that a heuristic form of the EBU reaction rate can be found that has a basis in theory, and this form is used in the present computations.

Our current research task is the numerical simulation of a turbulent diffusion flame of methane in air at elevated pressures and comparison with experimental data from the literature. The

purpose of the present work is to present the results pertaining to the main scalars (flow field and major chemical species), whilst work continues in computation of the minor species and refinement of the models used.

EXPERIMENT AND DATA REDUCTION

Numerical simulations are based on, and compared with, the experiments of Spadaccini et al (1976). This consisted in a jet of methane gas reacting with a coaxial swirling flow of heated air. The injector arrangement is shown in Figure 1 (adapted from Spadaccini et al, 1976); there is also a rear-facing step. The remainder of the combustor was a horizontal cylinder approximately 2.4 m long with a radius of 0.06115 m.

Several experiments were reported in the Reference, and Test 4 was selected for the present work. In this Test the turbulent diffusion flame took place at 3.8 atmospheres; the air was heated to approximately 750 K, and it had a nominal swirl velocity of 10 m/s at the inlet. Axial velocities of air and fuel were 20 and 1 m/s respectively. Figure 2 shows computed velocity vectors and streamlines to illustrate the resulting flow pattern.

Experimental data was published in numerical form, which allowed interpolation to cover the whole of the combustor in sufficient detail. Gas compositions were reported in percent mole fractions on a dry basis; this was converted to species mass fractions on a wet basis by the method detailed in the Appendix.

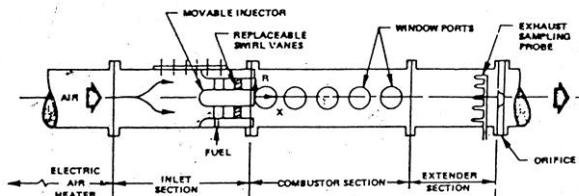


Figure 1 - Experimental burner (from Spadaccini et al, 1976)

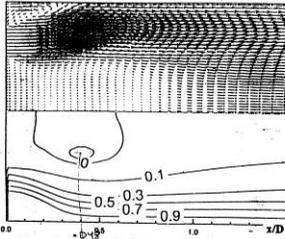


Figure 2 - Computed velocity vectors and streamlines

NUMERICAL SIMULATION

Transport Equations. Conservation of mass is computed in Favre-averaged conservative form (Favre, 1969; Bilger, 1975) as

$$\frac{\partial \bar{\rho} \bar{u}_i}{\partial x_i} = 0 \quad (1)$$

Conservation of linear momentum and of scalars is computed in conservative, axisymmetric form in generalized coordinates (ξ, η) using the Favre-averaged general transport equation:

$$\frac{\partial}{\partial \xi} (\bar{\rho} \bar{u} \bar{\xi}) + \frac{\partial}{\partial \eta} (\bar{\rho} \bar{v} \bar{\eta}) = \frac{\partial}{\partial \xi} (D\eta_{11} \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial \xi}) + \frac{\partial}{\partial \xi} (D\eta_{12} \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial \eta}) + \frac{\partial}{\partial \eta} (D\eta_{21} \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial \xi}) + \frac{\partial}{\partial \eta} (D\eta_{22} \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial \eta}) + JS\bar{\phi} \quad (2)$$

where $\bar{\phi}$ is the quantity being transported, D the effective viscosity

$$D = \mu + \frac{\mu_t}{Sc_s} \quad (3)$$

J and q_{ij} are the metrics of the transformation of (x, r) into (ξ, η) :

$$J = x_\xi r_\eta - x_\eta r_\xi \quad (4)$$

$$q_{11} = r_\xi r_\xi + x_\xi x_\xi \quad (5)$$

$$q_{22} = r_\eta r_\eta + x_\eta x_\eta \quad (6)$$

$$q_{12} = r_\xi r_\eta + x_\xi x_\eta \quad (7)$$

U and V are the covariant volume fluxes per unit angle

$$U = r(u_\xi - vx_\xi) \quad (8)$$

$$V = r(v_\eta - ux_\eta) \quad (9)$$

and the Schmidt / Prandtl number Sc and the source term $S\bar{\phi}$ are listed in Table 1, together with other definitions.

Boundary Conditions. Standard Dirichlet and Neumann conditions were applied at the boundaries. Logarithmic law of the wall relations were enforced for the x - e model at solid boundaries.

Heat removal through the water-cooled walls was simulated by means of ad-hoc sink terms in the enthalpy equation, along

Table 1 - Source terms and Definitions

$\bar{\phi}$	Sc	Source term
\bar{u}	1.0	$\frac{\partial}{\partial x} \left[rU \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial x} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial r} \left[rV \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial r} \right) \right] - \frac{2}{3} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x} - \frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial x} (\bar{\rho} \bar{u} \bar{r})$
\bar{v}	1.0	$\frac{\partial}{\partial x} \left[rU \left(\frac{\partial \bar{v}}{\partial r} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial r} \left[rV \left(\frac{\partial \bar{v}}{\partial r} \right) \right] - r \frac{\partial \bar{p}}{\partial r} - \frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial r} (\bar{\rho} \bar{u} \bar{r}) - 2\bar{v} \frac{\partial \bar{p}}{\partial r} + \frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial r} (\bar{\rho} \bar{u} \bar{r}) + 2 \frac{\mu_t}{r} \bar{v}$
\bar{w}	1.0	$\frac{H_2}{Sc_w} \frac{\partial \bar{w}}{\partial r} - \mu \frac{\bar{w}}{r} - \bar{w} \frac{\partial \bar{p}}{\partial r}$
\bar{k}	1.0	$r(-\bar{w} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x} - \bar{v} \frac{\partial \bar{p}}{\partial r} + \bar{G} - \bar{p} \bar{w})$
\bar{e}	1.3	$rC_1(-\bar{w} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x} - \bar{v} \frac{\partial \bar{p}}{\partial r} + \bar{G}) \frac{\bar{e}}{\bar{k}} - rC_2 \bar{p} \frac{\bar{e}}{\bar{k}}$
\bar{h}	0.7	See text, $C_1 = 1.44, C_2 = 1.92$
\bar{f}	0.7	None

Definitions

$\bar{\phi} = \bar{\phi} + \phi'$ (Reynolds average) $\bar{\phi} = \bar{\phi} + \phi'$ (Favre average)

$$\bar{k} = \overline{u_i u_i} / 2$$

$$\bar{e} = \frac{\mu}{2\rho} \left(S_{ij}'' \frac{\partial u_i''}{\partial x_j} + S_{ij}'' \frac{\partial u_j''}{\partial x_i} \right)$$

$$\overline{\rho u_i u_j} = \mu_i \bar{S}_{ij} - \frac{2}{3} \bar{\rho} \bar{u}_i \bar{u}_j, \delta_{ij} = 1 \text{ or } 0 \text{ for } i = j \text{ or } i \neq j$$

$$\mu_i = C_i \bar{\rho} \frac{\bar{k}}{\bar{e}}, C_i = 0.09$$

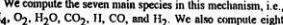
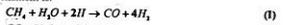
$$S_{ij} = \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \theta$$

$$\theta = \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial r} + \frac{v}{r}$$

$$\bar{c} = \mu_i \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\partial \bar{v}}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \bar{v}}{\partial x} \right) + \left(\frac{\partial \bar{v}}{\partial x} \right) \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial r} \right) + \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial r} - \frac{\bar{u}}{r} \right) \left(\frac{\partial \bar{v}}{\partial r} \right) - \frac{2}{3} \bar{\theta}^2 \right] - \frac{2}{3} \frac{\bar{\rho} \bar{u} \bar{v}}{\bar{\rho} \bar{u} \bar{v}}$$

the solid boundaries, proportional to the temperature gradient at the wall and to the surface area. The transmission coefficient was adjusted as required to produce the observed temperature distributions along the walls.

The Flame Model. From Bilger et al (1991) the reduced mechanism is:



We compute the seven main species in this mechanism, i.e., $CH_4, O_2, H_2O, CO_2, H, CO,$ and H_2 . We also compute eight minor species implicit in this scheme ($Cl_2, O, H_2O_2, HCO, CH_3O, H_2O_2, CH_2O, OH$) and the bath gas M .

The reactions rates of I-IV according to the skeletal mechanism are given in Bilger et al (1991):

$$w_i = w_{i1} + w_{i2} \quad (10)$$

$$w_{H_2} = w_{H_2} \quad (11)$$

$$w_{H_2O} = w_{H_2O} - w_{H_2} - w_{H_2O} - w_{H_2O} + w_{H_2} + w_{H_2O} \quad (12)$$

$$w_{H_2O} = w_{H_2O} - w_{H_2} + w_{H_2O} - w_{H_2O} + w_{H_2O} - w_{H_2} - w_{H_2O} \quad (13)$$

We solve Partial Differential Equations (PDE) for four main species. The remaining three main species are found by means of conserved scalars and the mixture fraction. Minor species are found by assuming steady state.

In the case of kinetic-limited chemistry, we solve PDE's for four main species, Cl_4 , O_2 , H_2 and H , while H_2O , CO_2 and CO are found using conserved scalars.

From Equations (1) V the molar rates of reaction per unit volume for the four main species are:

$$w_{Cl_4} = -w_{Cl_4} \quad (14)$$

$$w_{O_2} = -w_{O_2} - w_{O_2} \quad (15)$$

$$w_{H_2} = 4w_{H_2} + w_{H_2} - 2w_{H_2} - 3w_{H_2} \quad (16)$$

$$w_{H} = -2w_{H} + 2w_{H} \quad (17)$$

These rates are source terms of the PDE's:

$$L_i(f_i) = w_i \quad (18)$$

where f_i is the specific abundance equal to the species mass fraction Y_i divided by the molecular mass W_i . The linear operator L applied to a general variable is:

$$L(\phi) = \bar{\rho} \frac{\partial \phi}{\partial t} + \bar{\rho} \bar{V} \nabla \phi - \nabla \cdot (\bar{\rho} D \nabla \phi) \quad (19)$$

We generate conserved scalars by linear combinations of Equations (10) - (13), for instance:

$$\beta = \Gamma_{Cl_4} + \frac{1}{2} \Gamma_{H_2} + \frac{1}{2} \Gamma_{H_2O} + \frac{1}{4} \Gamma_{H} \quad (20)$$

Considering the boundary values at the fuel (stream 1) and oxidant (stream 2) boundaries, and the mixture fraction as:

$$\bar{f} = \frac{\beta - \beta_2}{\beta_1 - \beta_2} = \frac{\beta}{\Gamma_{Cl_4}} \quad (\beta_1 = \Gamma_{Cl_4}; \beta_2 = 0) \quad (21)$$

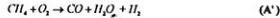
which is rearranged to obtain:

$$\Gamma_{H_2O} = 2\bar{f} \Gamma_{Cl_4} - 2 \Gamma_{Cl_4} - \Gamma_{H_2} - \frac{1}{2} \Gamma_{H} \quad (22)$$

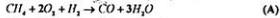
Similarly we obtain CO and CO_2 using other scalars.

The remaining species, O , Cl_3 and gas bath M may be calculated as detailed in Bilger et al (1991).

For fast chemistry conditions we consider H in steady state which reduces the system to three steps by cancelling H between I and IV.



We choose to retain the CO burnout reaction II, to promote EBU rate in the rich zone, whilst reducing the system to two steps. In the EBU model it is the concentration of the deficient reactant which determines the reaction rate. In the rich zone this will be the oxidant, and Reactions (A') and (C') will have comparable EBU rates. Hence, they may be reduced to:



Equation (A) is the sum of I, III and IV and equation (B) is II. The rates of reactions (A) and (B) will be obtained from EBU principles. The Eddy Break Up rate of the reaction between fuel F and oxidant O is computed as in Brizuela and Bilger (1996):

$$w_{EBU} = A_1 \frac{c}{x} \quad (23)$$

where A_1 is given by

$$A_1 = A^* \frac{L_{Cl_4}}{14^4 L_{H_2} / L_{O_2}} \sqrt{\frac{L_{H_2} / L_{O_2}}{L_{Cl_4}}} \quad (24)$$

For reaction (A), $A^* = 0.4$ and

$$\Gamma_{Cl_4} = \min(\Gamma_{Cl_4}, L_{Cl_4}) \quad (25)$$

$$L_{Cl_4} = L_{O_2} \quad (26)$$

$$s = 2 \quad (27)$$

and for reaction (B), $A^* = 0.4$ and

$$L_{H_2} = \Gamma_{H_2} \quad (28)$$

$$L_{H_2O} = L_{H_2O} \quad (29)$$

$$s = 1 \quad (30)$$

In this case we will solve PDE's for Cl_4 , O_2 , H_2 and CO , and H_2O , CO_2 and H will be calculated from conservation of atomic species.

To change between Kinetically- and mixing-limited chemistry we will compute the kinetic rates of reactions A and B using the results of above, i.e.:

$$w_{A,kin} = w_{A,EBU} \quad (31)$$

$$w_{B,kin} = w_{B,EBU} \quad (32)$$

Then compute the EBU rates and then, if $w_{A,kin} > w_{A,EBU}$ and $w_{B,kin} > w_{B,EBU}$ and $w_{A,EBU} > w_{B,EBU}$ compute mixing-limited fuel and oxidant fractions by EBU methods, and compute intermediates and products using algebraic relations and scalars. If either of the kinetic rates is less than the EBU rate then compute all species using kinetic rates and conserved scalars.

Numerical Solution Procedure. The set of transport and auxiliary equations was solved numerically using a finite volume technique (Cope, 1991) (Vanka et al, 1989). In this procedure the discretised equations are solved in a co-located grid using the hybrid differencing scheme and a pressure correction equation for the continuity equation (Patankar, 1980). An axisymmetric 120x36 grid of varying fineness was used.

The solution method is decoupled: the discretised momentum and continuity equations are solved first in a multigrid scheme, yielding updated velocities and pressure; this step includes integral mass flow adjustments. Scalar equations are solved next, in the finest grid only, in the following order: swirl velocity w , turbulence quantities ϵ and ϵ , mixture fraction f and specific total stagnation enthalpy h (which includes chemical potential). The 4-step flame model is solved last, including computation of species mass fractions y_i and hence of temperature T .

Finally, mixture molecular mass, density and updated transport coefficients are computed to complete one iteration pass.

Limits. The range of solutions of the PDF's must be restricted to allowable limits (Chen and Dibble, 1991). For example, for Cl_4 the maximum is the unreacted value, and the minimum is obtained setting $\Gamma_{112} \geq 0$ in Reactions I to IV:

$$y_{min} = f \quad (33)$$

$$y_{min} = f - \frac{(1-f)y_{O_2}}{2(1+w_{H_2}/w_{H_2O})} \quad (34)$$

A model for w_{H_2}/w_{H_2O} as a function of f was not available, and a constant value of -0.2 was used on the basis of the experimental results.

For oxygen the limits are obtained setting $\Gamma_{11} \geq 0$ and $\Gamma_{112} \geq 0$:

$$y_{min} = (1-f)y_{O_2} - 2(1+w_{H_2}/w_{H_2O})(f-y_{Cl_4}) \quad (35)$$

$$y_{\text{O}_2} = (1-f)y_{\text{O}_2} - \frac{2}{3}(4 + \frac{w_{\text{O}_2}}{w_{\text{r}}})(f - y_{\text{O}_2}) / (\frac{1 + \frac{w_{\text{O}_2}}{w_{\text{r}}}}{1 + \frac{2w_{\text{O}_2}}{3w_{\text{r}}}}) \quad (36)$$

These were simplified to

$$y_{\text{O}_2} = (1-f)y_{\text{O}_2} - 4(f - y_{\text{O}_2}) \quad (37)$$

$$y_{\text{O}_2} = (1-f)y_{\text{O}_2} - 4f \quad (38)$$

Limits for CO, I₂ and I₁ were obtained in a similar manner, disregarding convection/diffusion, those for CO₂ and H₂O were deduced from the one-step reaction.

It is noted that this area has not yet received sufficient research effort, and work is continuing in determining appropriate allowable limits for these flames.

DISCUSSION AND CONCLUSIONS

This is a report of work in progress and the conclusions are perforce partial. The numerical model as a whole performed satisfactorily, and computed exhaust conditions generally agreed with experiment both in composition and flow variables, with exceptions noted below.

The systems showed considerable stiffness, indicating a rigidly coupled set of reactions. The use of EBU reaction rates should have prevented or at least alleviated this problem. However, it is apparent that the turbulence model has interfered with this. Figure 3 shows computed and experimental contours of mixture fraction; it is seen that the mixing model is not satisfactory in that the gradient of mixture fraction in the primary zone is too low. This is attributable to the κ - ϵ model, which is known not to be adequate for flows with strong curvature of the streamline, as in the flameholding torus-shaped vortex.

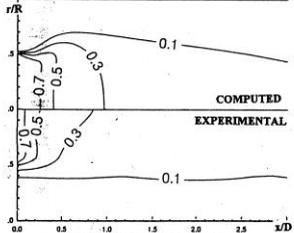


Figure 3 - Mixture fraction contours

As a consequence of low turbulent transport by the vortex, not enough oxygen reaches the primary zone, as evidenced in Figure 4. In consequence, Reaction (A), although slower than Reaction (I), is almost never faster than Reaction (B), and the EBU model only operates in the shear zone at $f \approx 0.1$. This results in the observed stiffness and lower levels of CO than observed. Figures 5 and 6 compare computed and experimental CO and CO₂. Conversion of CO to CO₂ near the centreline is proceeding at kinetic rates, faster than observed. This also results in higher centreline temperatures and lower exhaust concentrations of CO.

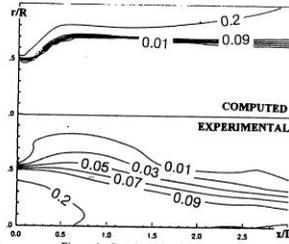


Figure 4 - Contours of mass fractions of O₂

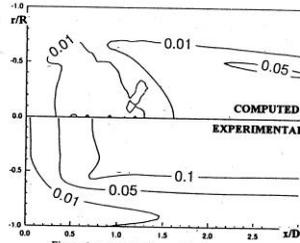


Figure 5 - Contours of mass fractions of CO

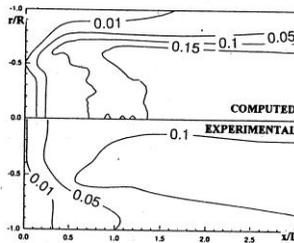


Figure 6 - Contours of mass fractions of CO₂

It is noted that step II was retained to ensure lower rates of consumption of CO (EBU rates) in the primary zone. It is hence concluded that it is necessary to improve the mixing rather than the chemical model to improve predictions along the centreline and in the primary zone.

REFERENCES

BILGER, R. W., STARNER, S. H., and KEE, R. J., 1990, *Comb. Flame* **80**, 135.
 BILGER, R. W., 1975, *Combust. Sci. Technol.*, **11**, 215.
 BILGER, R. W.; ESLER, M. B., and STARNER, S. H., 1991; 'On reduced mechanisms for methane-air combustion'; Chapter 5 of 'Reduced kinetic mechanisms and asymptotic approximations for methane-air flames', M. D. Smooke (Editor), Lecture Notes in Physics 384, Springer-Verlag, Berlin.
 BRIZUELA, E. A., and BILGER, R. W., 1996; *Combustion and Flame*, **104**, 208.
 CHEN, J.-Y., 1988, *Combust. Sci. Technol.*, **88**, 89.
 CHEN, J.-Y., and DIBBLE, R. W., 1991; Application of reduced kinetic mechanisms for prediction of turbulent nonpremixed methane-air flames', Chapter 9 of 'Reduced kinetic mechanisms and asymptotic approximations for methane-air flames', M. D. Smooke (Editor), Lecture Notes in Physics 384, Springer-Verlag, Berlin.
 COPE, W. K., 1991; 'On the numerical simulation of turbulent flows in complex geometries; M.S. Thesis, University of Illinois, Urbana-Champaign, Department of Mechanical and Industrial Engineering.
 FAVRE, A., 1969; 'Statistical equations of turbulent gases', in *Problems of Hydrodynamics and Continuum Mechanics*, Society of Industrial and Applied Mathematics, pages 231-266, Philadelphia.
 GÖTTGENS, J., and TERHOEVEN, P., 1992; 'RedMeed: an automatic reduction program', private communication.
 MAGNUSSEN, B. F., and HJERTAAGER, B. H., 1977, 16th *Symposium (International) on Combustion*, Pittsburgh, p. 719.
 PATANKAR, S. V., 1980, 'Numerical Heat Transfer and Fluid Flow', Hemisphere Pub. Co., New York.
 SPADACCINI, L. J.; OWEN, F. K., and BOWMAN, C. T., 1976; 'Influence on aerodynamic phenomena of pollutant formation in combustion (Phase I. Gaseous fuels)'; Report No. EPA-600/2-76-247a, United Technology Research Centre, Connecticut.
 SPALDING, D. B., 1971; 13th *Symposium (International) on Combustion*, Pittsburgh, p. 649.
 VANKA, S. P.; KRAZINSKI, J. L., and NEJAD, A. S., 1989; *AIAA Journal of Propulsion and Power*, **5**, 431.

APPENDIX

If X_{H_2O} is the number of moles of water removed to yield one mole of dry mixture, the wet mole fraction of species i may be found as:

$$X_i = \frac{\bar{X}_i}{1 + \bar{X}_{H_2O}} \tag{A1}$$

The amount of water removed may be approximated by assuming that only stable species are present and that the only hydrocarbon present is the fuel C₁₄H. Then, the Hydrogen to Carbon ratio, which equals 4, may be also put as:

$$\frac{H}{C} = \frac{4X_{CH_4} + 2X_{H_2O} + 2X_{H_2}}{X_{CH_4} + X_{CO_2} + X_{CO}} = \frac{4\bar{X}_{CH_4} + 2\bar{X}_{H_2O} + 2\bar{X}_{H_2}}{\bar{X}_{CH_4} + \bar{X}_{CO_2} + \bar{X}_{CO}} \tag{A2}$$

Hence,

$$\bar{X}_{H_2O} = 2(\bar{X}_{CO_2} + \bar{X}_{CO}) - \bar{X}_{H_2} \tag{A3}$$

The mole fractions of CO and CO₂ were reported, not so that of H₂. This was computed by assuming water-gas equilibrium so that

$$X_{H_2} = K_{WGC}(T) \frac{X_{H_2O} X_{CO}}{X_{CO_2}} \tag{A4}$$

where K_{WGC} is the equilibrium constant for the reaction



The constant is computed with its definition:

$$K_{WGC}(T) = e^{-\Delta G^0/RT} \tag{A6}$$

where the change in Gibbs free energy is given by:

$$\Delta G^0(T) = G_{H_2O}^0(T) + G_{CO}^0(T) - G_{CO_2}^0(T) - G_{H_2}^0(T) \tag{A7}$$

The Gibbs free energy for a given species as a function of temperature is obtained from standard tables.

Manipulating Equations (A3) and (A4) the moles of water may be computed as:

$$\bar{X}_{H_2O} = \frac{2(\bar{X}_{CO_2} + \bar{X}_{CO})}{1 + K_{WGC}(T)X_{CO}/X_{CO_2}} \tag{A8}$$

Finally, the concentration of Hydrogen may be obtained from Equation (A3), and wet basis molar fractions computed using Equation (A1).

The wet basis molar fractions may be utilised to compute the mixture molecular mass:

$$W_{wet} = \sum_i X_i W_i \tag{A9}$$

where W_i are the species molecular masses. This further allows computation of density:

$$\bar{\rho} \equiv \frac{p W_{wet}}{RT} \tag{A10}$$

To compute the mixture fraction, consider the conserved scalar Z_c , i.e., the mass fraction of Carbon element. Then:

$$\bar{f} = \frac{Z_c - Z_{c,p}}{Z_{c,b} - Z_{c,p}} = Z_c \frac{W_{CH_4}}{W_c} \tag{A11}$$

The mass fraction of Carbon may be computed from:

$$Z_c = Y_{CO} \frac{W_c}{W_{CO}} + Y_{CO_2} \frac{W_c}{W_{CO_2}} + Y_{CH_4} \frac{W_c}{W_{CH_4}} \tag{A12}$$

and, since $X_i = Y_i W_i / W_{wet}$,

$$Z_c = \frac{W_c}{W_{wet}} (X_{CO} + X_{CO_2} + X_{CH_4}) \tag{A13}$$

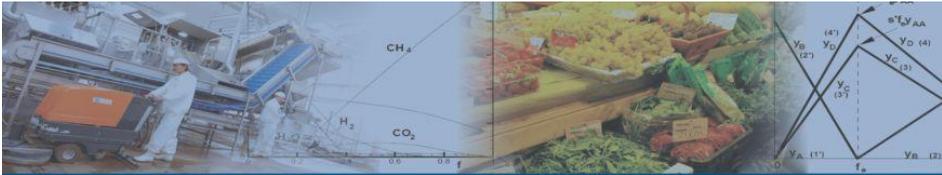
whence

$$\bar{f} \equiv \frac{W_{CH_4}}{W_c} (X_{CO} + X_{CO_2} + X_{CH_4}) \tag{A14}$$

Referencias al Apéndice F:

Kolbe, W., and Kollmann, W.; *Acta Astronáutica*, **7**, 91 (1980).

Kollmann, W., and VANDROMME, D.; “Turbulent shear flow with fluctuating density”, AIAA Paper 79-1485, 12th Fluid and Plasma Dynamics Conference, Williamsburg, VA, 1979.



ISBN 978-950-34-0755-4