



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO**

---

**FACULTAD DE INGENIERÍA**

**Simulación numérica de las  
irreversibilidades generadas  
por compresión y expansión  
en un sistema cilindro-pistón**

**TESIS**

Que para obtener el título de  
**Ingeniero Mecánico**

**P R E S E N T A**

Pablo Herrera Hernández

**DIRECTOR DE TESIS**

Dr. William Vicente y Rodríguez



Ciudad Universitaria, Cd. Mx., 2020



# *Agradecimientos ...*

*A la Universidad Nacional Autónoma de México, que desde el bachillerato hasta la licenciatura me ha brindado las oportunidades para un desarrollo integral como individuo.*

*Al proyecto PAPIME PE108418 “Desarrollo de equipo y manuales para prácticas de laboratorio de motores de combustión interna” por la beca recibida que permitió el satisfactorio desarrollo del presente proyecto.*

*Al proyecto PAPIIT IG101018 “Simulación de la combustión en motores de combustión interna usando biocombustibles y medición de la masa de contaminantes, a fin de estructurar un inventario de emisiones en el Valle de México”, por la ayuda proporcionada para la compra de material.*

*Al Instituto de Ingeniería de la UNAM, por facilitarme un espacio de trabajo y equipo de cómputo para la realización de este proyecto.*

*Al Ing. Fernando Maldonado Salgado, del Área de servidores Unix-Linux del Instituto de Ingeniería de la UNAM, por el soporte técnico proporcionado.*

*A mi asesor, el Dr. William Vicente y Rodríguez, por el apoyo académico y por las observaciones emitidas desde el inicio hasta la conclusión de este proyecto.*

*A mis compañeros del proyecto PAPIME PE108418, por la oportuna orientación y por compartir sus conocimientos, cuando así lo requerí.*

*A la Facultad de Ingeniería de la UNAM y a su personal docente, por aportar los elementos académicos y de infraestructura para mi formación como ingeniero.*

*A mis padres, que desde pequeño me han impulsado y aconsejado, hasta culminar con éxito mis estudios de licenciatura. Por su confianza y esfuerzo para que yo pudiera lograr mis metas.*

*A mis hermanos y a sus familias, por el apoyo incondicional durante mis estudios y hasta la culminación de los mismos. Por el reconocimiento a mi esfuerzo y empeño.*

*A Harumi y a su familia, quienes me brindaron su ayuda y buena voluntad para poder culminar mi trabajo a pesar de los contratiempos y complicaciones.*

*A Harumi, especialmente, quien siendo mi compañera durante casi toda la carrera me ha inspirado por su excelencia, perseverancia y éxito. Por su amistad incondicional y por enseñarme a ser un mejor individuo, tanto en lo profesional como en lo personal.*



# Índice general

<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
1.1. Antecedentes . . . . .	1
1.2. Objetivos . . . . .	5
1.3. Estructura de la tesis . . . . .	6
<b>2. Ecuaciones gobernantes</b>	<b>7</b>
2.1. Ecuaciones de transporte . . . . .	7
2.1.1. Ecuación de continuidad . . . . .	8
2.1.2. Ecuación de momento . . . . .	9
2.1.3. Ecuación de energía . . . . .	10
2.1.4. Condiciones iniciales y de frontera . . . . .	11
2.2. Ecuación de estado . . . . .	12
2.3. Turbulencia . . . . .	13
2.3.1. Aspectos característicos de la turbulencia . . . . .	13
2.3.2. RANS . . . . .	16
2.3.3. Modelos de turbulencia . . . . .	19
<b>3. Método de solución numérica</b>	<b>23</b>
3.1. Introducción a los métodos de solución numérica . . . . .	23
3.1.1. Componentes de un método de solución numérica . . . . .	23
3.1.2. Propiedades de los métodos de solución numérica . . . . .	25
3.1.3. Métodos de discretización . . . . .	27
3.2. Método de volúmenes finitos . . . . .	28
3.2.1. Discretización . . . . .	29
3.2.2. Solución de ecuaciones algebraicas . . . . .	31
3.3. Algoritmo SIMPLE . . . . .	33
<b>4. Simulación</b>	<b>37</b>
4.1. Compresión y expansión con pistón plano . . . . .	37
4.1.1. Ajustes numéricos de la solución . . . . .	39

4.1.2. Resultados y validación . . . . .	41
4.2. Compresión y expansión con pistón cóncavo . . . . .	42
4.3. Ajustes numéricos de la solución . . . . .	43
4.4. Resultados . . . . .	44
<b>5. Conclusiones</b>	<b>63</b>
<b>A. Ecuaciones de transporte instantáneas</b>	<b>65</b>
<b>B. Archivos Q1</b>	<b>69</b>
B.1. Compresión y expansión con pistón plano . . . . .	69
B.2. Compresión y expansión con pistón cóncavo . . . . .	73
<b>Bibliografía</b>	<b>80</b>

# Capítulo 1

## Introducción

### 1.1. Antecedentes

---

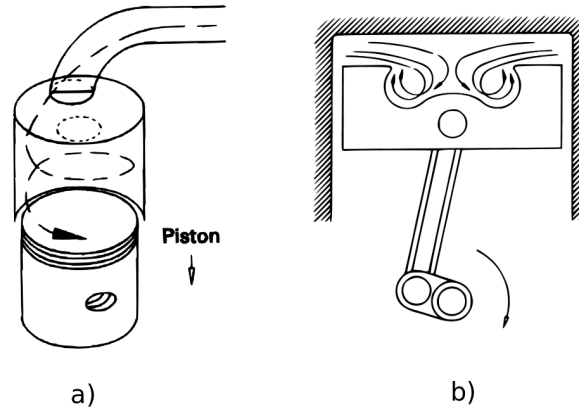
Durante la primera mitad de siglo XX en el mundo, el número de automóviles impulsados con combustibles fósiles (motores térmicos) era pequeño y la contaminación que emitían tolerable. Cuando aumentó la población mundial también lo hizo el número de plantas termoeléctricas, fábricas y automóviles, lo que provocó problemas en las principales urbes debido a los altos niveles de contaminación atmosférica. Fue así que, a finales de la década de 1960 en Los Ángeles, se crearon las primeras normas para el control de emisiones. Desde entonces gran parte del esfuerzo en investigación y desarrollo de motores térmicos se ha enfocado en la reducción de las emisiones contaminantes y en cumplir con normas ambientales cada vez más estrictas.

La reducción de emisiones contaminantes requiere de mejoras en la tecnología de los motores y de los combustibles para que la combustión sea lo más completa posible. También, es necesario aplicar un tratamiento a los gases de escape, utilizando convertidores catalíticos que transforman las emisiones de monóxido de carbono ( $CO$ ), óxidos de nitrógeno ( $NOx$ ) en aceptables  $CO_2$ ,  $H_2O$  y  $N_2$ .

Para mejorar la tecnología de un motor térmico es importante entender los procesos termodinámicos que ocurren en su ciclo de trabajo. De manera concreta, en un motor de combustión interna reciprocante MCIR los procesos de compresión, adición de calor y expansión ocurren dentro de la cámara de combustión en un sistema cilindro-pistón [1].

Varios modelos matemáticos han sido desarrollados para ayudar a entender, correlacionar y analizar el ciclo del motor. Estos incluyen modelos de combustión, de propiedades físicas, del movimiento de la mezcla durante las carreras de admisión, compresión, expansión y escape, por mencionar algunos. Estos modelos matemáticos no representan los procesos y propiedades de forma exacta, sin embargo, son herramientas poderosas en el desarrollo de motores y ciclos de motor.

La simulación numérica es una herramienta muy útil para el diseño de nuevos motores y de sus componentes, porque permiten grandes ahorros en tiempo y costo en comparación con el



**Figura 1.1:** Movimientos dentro del cilindro: a) swirl, b) squish y tumble [4, pp. 206-213].

trabajo experimental. Primeramente, los nuevos diseños o mejoras se desarrollan y optimizan en una computadora utilizando aproximaciones numéricas de los modelos matemáticos existentes. Posteriormente, se fabrica el componente y se realizan pruebas para determinar su desempeño, si es necesario se hacen cambios en el diseño [2].

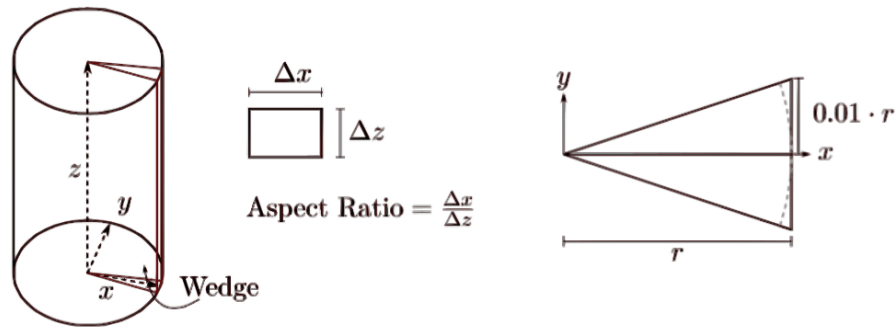
En un motor térmico real ocurren procesos irreversibles tanto internos como externos, hay transferencia de calor (desde y hacia el sistema), combustión y mezcla de fluidos con propiedades distintas, etc. Esto implica que las condiciones de estado no se pueden determinar durante el proceso porque no existe equilibrio termodinámico. Aun así, se pueden realizar cálculos para procesos irreversibles con el uso de una eficiencia adiabática o isoentrópica [3].

Los procesos de compresión y expansión de un gas dentro de un sistema cilindro-pistón son comunes en muchas aplicaciones de ingeniería (compresores y motores). Un MCIR añade energía térmica por medio de un proceso de combustión, donde parte de esa energía se extrae como trabajo mecánico al expandir el fluido.

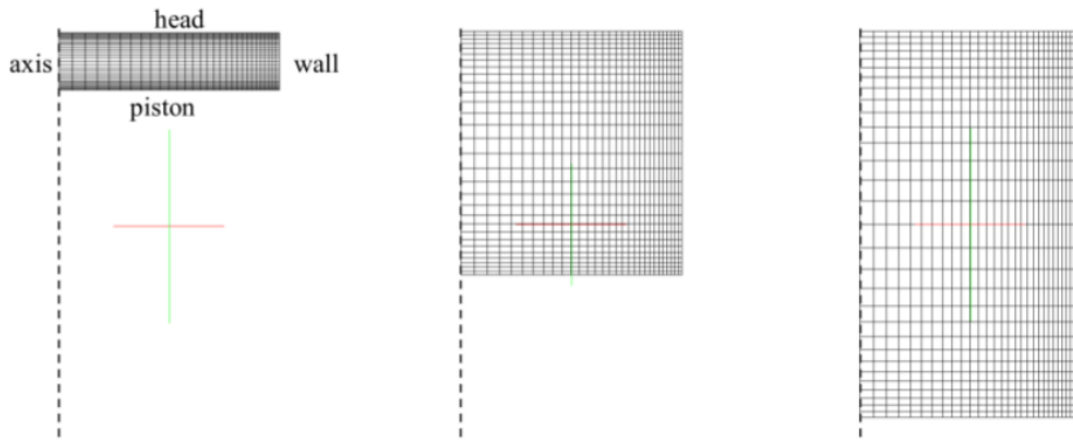
Además de los efectos de arrastre y de capa límite se genera turbulencia debido a la geometría y a las altas velocidades del flujo. La turbulencia favorece la transferencia de calor, evaporación del combustible, mezclado y velocidad de combustión. Las partículas de fluido experimentan fluctuaciones aleatorias en su movimiento por lo tanto no es posible una predicción exacta de las condiciones del flujo en cualquier tiempo y posición [4]. En la **figura 1.1** se muestran tres flujos inducidos que favorecen la turbulencia dentro del cilindro : *swirl*, *squish* y *tumble*.

Se han publicado varios artículos que modelan numéricamente el comportamiento de un gas dentro del conjunto cilindro-pistón de un MCIR. Modelando y analizando las etapas de admisión, compresión, expansión y escape para evaluar los efectos que producen los parámetros de operación (relación de compresión, velocidad del pistón, presiones y temperaturas de admisión, las geometrías del pistón y de las válvulas) sobre los campos de presión, velocidades y temperatura. Algunos de estos trabajos se mencionan a continuación.





(a) Geometría tipo cuña utilizada en la definición de la malla.



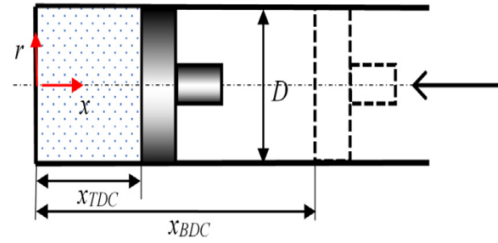
(b) Movimiento de la malla durante una carrera de expansión.

**Figura 1.2:** Dominio bidimensional tipo cuña y malla dinámica con simetría [6].

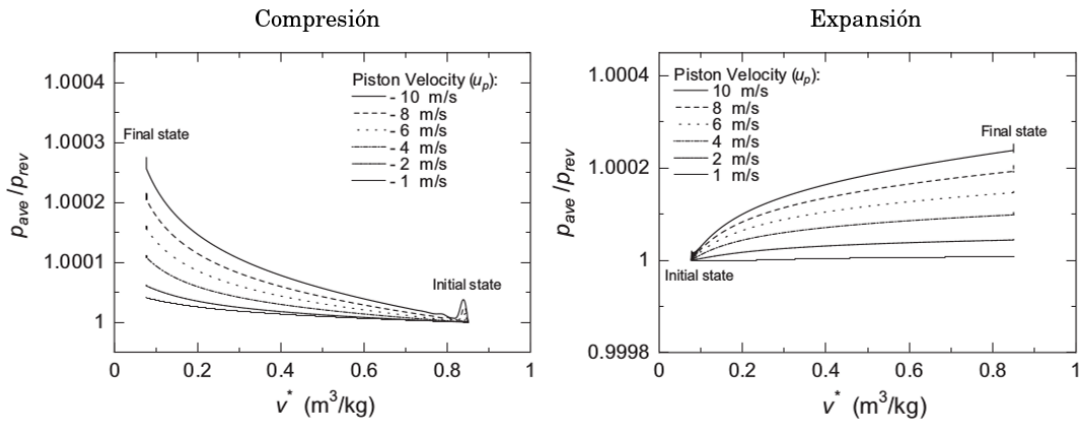
Saravanakumar et al. [5] analizan el efecto que tiene la generación de squish en el desempeño de un MCIR con relación de compresión variable. Primero se analizan numéricamente los campos de presión y velocidades que se generan por el movimiento de un pistón con una geometría asimétrica. El flujo debido a los ductos de admisión se toma como condición inicial del proceso de compresión.

Los resultados se comparan con los obtenidos por un pistón estándar para determinar la generación de squish. Posteriormente, se valida el modelo con datos experimentales de *carga vs eficiencia* a distintas relaciones de compresión. Se concluye que la generación de squish es mayor en una geometría no simétrica, aumentando la eficiencia del motor en todas las relaciones de compresión utilizadas.

Si se requieren modelar los procesos de compresión/expansión sin disipar calor a las vecin-



(a) Sistema simulado.



(b) Relación entre procesos reversible e irreversible a distintas velocidades.

**Figura 1.3:** Sistema simulado y curvas obtenidas en el trabajo de Yusof [7].

dades se utiliza el modelo «resorte de gas», el cual permite paredes adiabáticas y condiciones iniciales de reposo. Taleb et al. [6] investigan numéricamente el comportamiento de gases reales en un resorte de gas y comparan los resultados con el comportamiento de un gas ideal. Se comparan tres modelos distintos: a) Modelo de gas ideal con propiedades termodinámicas y de transporte constantes; b) Modelo de gas ideal con propiedades termodinámicas y de transporte dependientes de la temperatura; y c) Modelo de gas real usando la ecuación de estado de Peng-Robinson con propiedades dependientes de la temperatura y presión.

El estudio se realiza con tres gases: helio, nitrógeno y propano. Se plantea un sistema en coordenadas cilíndricas para aprovechar la simetría que existe con respecto al eje del pistón, definiendo un elemento bidimensional tipo cuña, tal como se muestra en la **figura 1.2a**. El mallado de la solución es dinámico debido a que la pared interna del cilindro y el eje de simetría son fronteras fijas, pero la cabeza del pistón al desplazarse modifica el dominio (**fig. 1.2b**).

Los autores encontraron que los modelos de gas ideal sobreestiman la presión y en un grado menor la temperatura. Para el caso del propano, las pérdidas térmicas inducidas muestran que

los modelos de gas ideal subestiman las pérdidas térmicas en comparación con el modelo de gas real. Además, se tiene un comportamiento más cercano al de gas ideal durante la compresión que durante la expansión, por lo que hay menos trabajo recuperado durante el ciclo.

En un trabajo más reciente, Yusof et al. [7] también modelan los procesos de compresión y expansión en un resorte de gas ideal, pero considerando irreversibilidades (**fig. 1.3a**). El sistema es adiabático y con una simetría en el eje del cilindro por lo que se opta por usar coordenadas cilíndricas. Se resuelven las ecuaciones de momento y energía para el caso compresible y así obtener los campos de presión y temperatura.

El pistón usado en las simulaciones tiene una geometría plana y se mueve a distintas velocidades de compresión y expansión. La intención de variar la velocidad es cuantificar la cantidad de energía cinética que es disipada por los esfuerzos viscosos y que aumenta la energía interna del sistema. Para el análisis, se compararon los valores promedio de la presión, obtenidos en la simulación (irreversibles) contra la presión obtenida por el modelo de gas ideal(reversible), tal como se muestra en la **figura 1.3b**.

En el trabajo de Yusof [7] se concluye que el proceso de compresión presenta la mayor cantidad de irreversibilidades por disipación viscosa; sin embargo, llega a representar menos del 1% respecto a la cantidad de trabajo por compresión.

## 1.2. Objetivos

---

Objetivo general, simular numéricamente los procesos de compresión y expansión en un sistema adiabático de cilindro-pistón; calculando el incremento de la energía interna por disipación viscosa a distintas velocidades de pistón.

Los objetivos particulares son los siguientes:

- Validar el modelo numérico para un pistón con geometría plana comparando los resultados obtenidos con lo presentado en la literatura disponible.
- Calcular el incremento en la energía interna por disipación viscosa respecto al trabajo realizado por un pistón de geometría plana moviéndose a  $\pm 10$  m/s.
- Simular los procesos de compresión y expansión con un pistón de geometría cóncava moviéndose a tres distintas velocidades:  $\pm 1$  m/s,  $\mp 5$  m/s y  $\pm 10$  m/s.
- Calcular el incremento en la energía interna por disipación viscosa respecto al trabajo realizado por un pistón de geometría cóncava moviéndose a  $\pm 1$  m/s,  $\mp 5$  m/s y  $\pm 10$  m/s.
- Comparar y analizar los resultados obtenidos.

### 1.3. Estructura de la tesis

---

Para cumplir con los objetivos establecidos, esta tesis consta de cinco capítulos:

**Capítulo 1. Introducción:** Se presenta el contexto que motiva el estudio de los motores de combustión interna; mencionando los antecedentes en el análisis numérico de estos sistemas. También, se definen los objetivos generales y particulares a cumplir con la presentación de esta tesis.

**Capítulo 2. Ecuaciones gobernantes:** Presentación breve de las ecuaciones de gobierno en mecánica de fluidos, ley de gas ideal y el modelo de turbulencia  $k - \epsilon$  estándar.

**Capítulo 3. Solución numérica:** Descripción del método de volúmenes finitos, discretización, solución de las ecuaciones discretizadas y el algoritmo SIMPLE.

**Capítulo 4. Simulación numérica:** Se valida el método de solución numérica con un pistón de geometría plana y se simulan los procesos de compresión y expansión a distintas velocidades, pero con un pistón de geometría cóncava. Se grafican y analizan los resultados.

**Capítulo 5. Conclusiones**

# Capítulo 2

## Ecuaciones gobernantes

### Introducción

En este capítulo se presentan las ecuaciones que gobiernan el comportamiento de un fluido, tales ecuaciones parten de los principios de conservación de masa, de momento y de energía. También, se aborda la ecuación de estado para un gas ideal y las relaciones que serán utilizadas para validar los resultados obtenidos por la solución numérica. Por último, se da una descripción físico-matemática de la turbulencia y del modelo que será utilizado.

### 2.1. Ecuaciones de transporte

---

Las ecuaciones de transporte que gobiernan el comportamiento físico de un fluido son las representaciones matemáticas de las siguientes leyes físicas de conservación:

- *La masa de un fluido se conserva*
- *La razón de cambio de movimiento es igual a la suma de las fuerzas que actúan sobre una partícula de fluido*
- *La razón de cambio de energía es igual a la suma de las razones de calor añadido y de trabajo realizado sobre una partícula de fluido*

El comportamiento de un fluido se describe en términos de propiedades macroscópicas, como velocidad, presión, densidad y temperatura. Considerando que un fluido es un medio continuo se puede obtener una descripción de estas propiedades macroscópicas en función de sus derivadas espaciales y temporales. Según el comportamiento físico del flujo se determina si es un problema de equilibrio o un problema de propagación [8].

Los problemas de equilibrio, como por ejemplo, la distribución de temperaturas de una barra sólida en estado permanente, la distribución de esfuerzos en equilibrio de un sólido bajo una carga aplicada o un flujo con una región de recirculación donde la información puede viajar

tanto aguas arriba como aguas abajo (flujos subsónicos, incluyendo los incompresibles). Estos y muchos otros problemas en estado permanente son gobernados por *ecuaciones elípticas*, como la *Ecuación de Laplace*:

$$\nabla^2 \phi = 0 \quad (2.1)$$

Donde  $\phi$  puede representar las variables de masa, momento o temperatura. Por otro lado, los flujos en estado no permanente (algunos en estado permanente) y fenómenos de onda son problemas de propagación gobernados por ecuaciones parabólicas o hiperbólicas. Las *ecuaciones parabólicas* describen problemas dependientes del tiempo y cantidades significativas de difusión y disipación. Por ejemplo, los flujos viscosos no permanentes y la conducción transitoria de calor. La ecuación parabólica prototipo es la *Ecuación de Difusión o Segunda Ley de Fick*:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \alpha \nabla^2 \phi \quad (2.2)$$

Las *ecuaciones hiperbólicas*, en general describen procesos dependientes del tiempo con pequeñas cantidades de energía disipada (vibraciones). La ecuación hiperbólica prototipo es la *Ecuación de Onda*:

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} = c^2 \nabla^2 \phi \quad (2.3)$$

donde  $\alpha$  es el coeficiente de difusión y  $c$  la velocidad de propagación de la onda.

Para resolver las ecuaciones elípticas se requieren las condiciones de frontera; sin embargo, las ecuaciones parabólicas e hiperbólicas requieren tanto de las condiciones iniciales como de frontera.

Es posible que un flujo sea descrito por más de un tipo de ecuación, como ocurre en flujos compresibles en estado permanente, donde hay regiones supersónicas y subsónicas. Las regiones supersónicas son del tipo hiperbólicas y las subsónicas del tipo elípticas. En consecuencia, se debe cambiar el método para aproximar las ecuaciones en función de la naturaleza del flujo local [8, 9].

### 2.1.1. Ecuación de continuidad

Aplicando el teorema de transporte de Reynolds a un volumen de control se obtiene la expresión general para la conservación de masa:

$$0 = \int_{VC} \frac{\partial \rho}{\partial t} dV + \int_{SC} \rho \vec{u} \cdot \vec{n} dA \quad (2.4)$$

donde  $\vec{n}$  es el vector normal a la superficie de control SC y  $\vec{u}$  la velocidad absoluta del flujo. Utilizando el teorema de la divergencia y suponiendo un volumen de control arbitrario, entonces el integrando debe ser igual a cero. Así, la forma diferencial de la conservación de masa o ecuación

de continuidad para una densidad variable es la siguiente [3, 8] :

$$\boxed{\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) = 0} \quad (2.5)$$

La **ecuación 2.5** describe un flujo transitorio compresible, el primer término del lado izquierdo es la variación temporal de la densidad, el segundo término describe el flujo neto de masa que cruza la superficie de control y se conoce como término convectivo. Sea el valor de una propiedad arbitraria por unidad de masa, denotada por  $\phi$ , la *derivada material o total* de esta propiedad está definida por

$$\frac{D\phi}{Dt} = \frac{\partial \phi}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \phi \quad (2.6)$$

Por otro lado, ya que la propiedad conservada en la **ecuación 2.5** es la masa por unidad de volumen ( $\rho$ ), la generalización de esta ecuación para una propiedad arbitraria conservada por unidad de volumen ( $\rho\phi$ ) es:

$$\frac{\partial \rho \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \phi \vec{u}) = \rho \frac{D\phi}{Dt} = 0 \quad (2.7)$$

### 2.1.2. Ecuación de momento

Existen dos tipos de fuerzas que actúan sobre una partícula de fluido [8]:

- **Fuerzas de superficie:** presión y esfuerzos viscosos.
- **Fuerzas de cuerpo:** fuerzas de gravedad, centrífuga, de Coriolis y electromagnética.

Entonces, la segunda ley de Newton se puede expresar de la siguiente forma:

$$\sum \vec{F} = \sum \vec{F}_{cuerpo} + \sum \vec{F}_{superficie} = \rho \frac{D\vec{u}}{Dt} \quad (2.8)$$

Aplicando de nueva cuenta el teorema del transporte de Reynolds, se obtiene la expresión integral para la conservación de cantidad de movimiento lineal ( $\rho \vec{u}$ ):

$$\sum \vec{F} = \int_{VC} \rho \vec{g} dV + \int_{SC} \boldsymbol{\sigma} \cdot \vec{n} dA = \int_{VC} \frac{\partial(\rho \vec{u})}{\partial t} dV + \int_{SC} (\rho \vec{u}) \vec{u} \cdot \vec{n} dA \quad (2.9a)$$

$$\boldsymbol{\sigma} = -p \mathbf{I} + \boldsymbol{\tau} \quad (2.9b)$$

$$\boldsymbol{\tau} = \mu (\nabla \vec{u} + \nabla \vec{u}^T) + \lambda (\nabla \cdot \vec{u}) \mathbf{I} \quad (2.9c)$$

donde  $\boldsymbol{\sigma}$  es el tensor de esfuerzos de Cauchy,  $p$  la presión,  $\boldsymbol{\tau}$  el tensor de esfuerzos viscosos y  $\vec{g}$  la aceleración gravitacional. La **ecuación 2.9c** es la ley de viscosidad de Newton generalizada [10,11], siendo  $\mu$  la viscosidad dinámica, que relaciona los esfuerzos con las deformaciones lineales, y la segunda viscosidad o viscosidad volumétrica  $\lambda$ , que relaciona los esfuerzos con la deformación

volumétrica. Para gases, una buena aproximación es considerar que  $\lambda = -\frac{2}{3}\mu$ , que se obtiene de la llamada *hipótesis de Stokes* [12]. La **ecuación 2.5** considera volúmenes de control VC tanto fijos como en movimiento, con una velocidad absoluta  $\vec{u}$ .

Suponiendo un volumen de control arbitrario, el teorema de la divergencia para la **ecuación 2.9a** indica que el integrando debe ser igual a cero. Por lo tanto, la forma diferencial de la conservación de cantidad de movimiento lineal o la también llamada *ecuación de Cauchy* [13], se escribe como:

$$\frac{\partial(\rho \vec{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \vec{u}) = \rho \frac{D\vec{u}}{Dt} = \rho \vec{g} + \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \vec{S}_M \quad (2.10)$$

donde  $\vec{S}_M$  es el término fuente que incluye todas las fuerzas distintas a  $\rho \vec{g}$ .

### Ecuaciones de Navier – Stokes

En un fluido newtoniano, el esfuerzo de corte es linealmente proporcional a la razón de deformación por corte, similar a lo que ocurre con un sólido elástico. Numerosos fluidos, tales como, aire, agua, queroseno, gasolina y aceites, se consideran fluidos newtonianos.

Sustituyendo las relaciones de esfuerzo (**ec. 2.9c** y **ec. 2.9b**) en la **ecuación 2.10** se obtiene la ecuación de movimiento para fluidos newtonianos (**ec. 2.11**). Las tres componentes de esta ecuación son las ecuaciones de Navier - Stokes [12, 13].

$$\begin{aligned} \rho \frac{D\vec{u}}{Dt} &= \nabla \cdot (-p \mathbf{I} + \boldsymbol{\tau}) + \rho \vec{g} + \vec{S}_M \\ &= -\nabla p + \nabla \cdot [\mu (\nabla \vec{u} + \nabla \vec{u}^T) + \lambda (\nabla \cdot \vec{u}) \mathbf{I}] + \rho \vec{g} + \vec{S}_M \end{aligned} \quad (2.11)$$

#### 2.1.3. Ecuación de energía

La primera ley de la termodinámica establece que el incremento de la energía total de un sistema es igual a la suma del trabajo realizado sobre el sistema y del calor añadido (**ec. 2.12a**). Por otra parte, se asume que la energía total  $E$  del sistema es igual a la suma de las energías interna y cinética, tal como se muestra en la **ecuación 2.12b**.

$$dE = dW + dQ \quad (2.12a)$$

$$E = e + \frac{1}{2} \vec{u} \cdot \vec{u} \quad (2.12b)$$

El teorema del transporte de Reynolds aplicado a la energía total determina que:

$$\int_{VC} \rho \frac{DE}{Dt} dV = \int_{SC} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \vec{u}) \cdot \vec{n} dA + \int_{VC} \rho (\vec{u} \cdot \vec{g}) dV + \int_{SC} \vec{q} \cdot \vec{n} dA \quad (2.13)$$

Usando el teorema de divergencia y suponiendo que la integración es sobre un volumen de control arbitrario, se obtiene la forma diferencial de la ecuación general de la energía [8, 10]:



$$\rho \frac{DE}{Dt} = \rho \frac{D}{Dt} \left( e + \frac{1}{2} \vec{u} \cdot \vec{u} \right) = \nabla \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \vec{u}) + \rho (\vec{u} \cdot \vec{g}) + \nabla \cdot \vec{q} + S_E \quad (2.14)$$

Al expandir el término  $\nabla \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \vec{u})$  usando (2.9b) y definiendo a  $\vec{q}$  con la ley de Fourier, la ecuación (2.14) queda como:

$$\rho \frac{D}{Dt} \left( e + \frac{1}{2} \vec{u} \cdot \vec{u} \right) = \underbrace{-\nabla \cdot (p\vec{u})}_{\text{i}} + \underbrace{\nabla \cdot [\boldsymbol{\tau} \cdot \vec{u}]}_{\text{ii}} + \underbrace{\rho (\vec{u} \cdot \vec{g})}_{\text{iii}} + \underbrace{\nabla \cdot [\boldsymbol{\kappa} \cdot \nabla T]}_{\text{iv}} + \underbrace{S_E}_{\text{v}} \quad (2.15)$$

siendo (i) la razón de trabajo realizado por las fuerzas de presión (compresión y expansión), (ii) el trabajo realizado por las fuerzas viscosas, (iii) el trabajo realizado por la gravedad sobre el todo el volumen, (iv) el flujo de calor por conducción, siendo  $\boldsymbol{\kappa}$  el tensor de conductividad térmica para un material no isotrópico, y (v) los términos fuente: químico, eléctrico y nuclear [10].

Otra forma muy útil de expresar la ecuación (2.15) es considerando el cambio en la energía interna,  $e$ , la cuál resulta de restar la energía cinética y el trabajo realizado por la gravedad :

$$\rho \frac{De}{Dt} = \underbrace{-p(\nabla \cdot \vec{u})}_{\text{I}} + \underbrace{(\boldsymbol{\tau} : \nabla \vec{u})}_{\text{II}} + \nabla \cdot [\boldsymbol{\kappa} \cdot \nabla T] + \underbrace{S_e}_{\text{III}} \quad (2.16)$$

donde (I) es la razón de incremento de energía interna por compresión (reversible), (II) es el incremento de energía interna por disipación viscosa (irreversible) y (III) el término fuente definido como  $S_e = S_E - \vec{u} \cdot \boldsymbol{S}_M$ . En fluidos newtonianos los efectos de generación de calor debido a los esfuerzos viscosos son descritos por la función de disipación viscosa  $\Phi$  [10, 12, 14]:

$$\Phi = \boldsymbol{\tau} : \nabla \vec{u} = \mu (\nabla \vec{u} : \nabla \vec{u} + \nabla \vec{u}^T : \nabla \vec{u}) + \lambda (\nabla \cdot \vec{u})^2 \quad (2.17)$$

#### 2.1.4. Condiciones iniciales y de frontera

Cuando existe una mezcla de flujos elípticos, parabólicos e hiperbólicos se afecta el modo en que las condiciones de frontera se aplican, en particular donde hay interfaces de fluido. Desafortunadamente, pocos resultados teóricos dentro de un rango de condiciones de frontera son aplicables a flujos compresibles. Las condiciones de frontera para un flujo viscoso compresible se presentan en la **tabla 2.1**; Los subíndices  $n$  y  $t$  indican las direcciones normal y tangencial a la frontera, respectivamente; los esfuerzos de superficie se representan con  $F$  [8].

Para calcular la densidad resulta innecesario especificar las condiciones de frontera a la salida o en una pared sólida, debido a que la ecuación de continuidad describe los cambios de densidad que experimenta una partícula de fluido en un campo de velocidad conocido. Sólo se necesita conocer la densidad a la entrada del flujo.

Comúnmente, las fronteras de salida se colocan en donde el flujo es aproximadamente unidi-

<b>Condiciones iniciales</b>	
<ul style="list-style-type: none"> <li>Valores de <math>\rho, \vec{u}</math> y <math>T</math> en el tiempo <math>t = 0</math> en todo el dominio de la solución</li> </ul>	
<b>Condiciones de frontera</b>	
<ul style="list-style-type: none"> <li>Paredes sólidas:</li> </ul>	$\vec{u} = \vec{u}_w$ (condición de no deslizamiento) $T = T_w$ (temperatura fija) o $k\partial T/\partial n = -q_w$ (flujo de calor fijo)
<ul style="list-style-type: none"> <li>Interfaces:</li> </ul>	Entrada: $\rho, \vec{u}$ y $T$ se conocen como función de la posición Salida: $-p + \mu \partial u_n/\partial n = F_n$ y $\mu \partial u_t/\partial n = F_t$

Tabla 2.1: Condiciones iniciales y de frontera para flujos permanentes y no permanentes

reccional y los esfuerzos de superficie toman valores conocidos. Para un número alto de Reynolds y lejos de objetos sólidos, ya sea un flujo externo o uno completamente desarrollado a la salida de un ducto, no hay cambios en las componentes normales de la velocidad en la frontera, entonces  $F_n = -p$  y  $F_t = 0$ . Esto da la condición de un flujo de salida, bastante utilizada en el método de volumen finito:

$$\text{presión especificada, } \partial u_n/\partial n = 0 \quad \text{y} \quad \partial T/\partial n = 0$$

Además, si existen características especiales en la geometría del problema se pueden usar las siguientes condiciones:

- Condición de frontera simétrica:  $\partial\phi/\partial n = 0$
- Condición de frontera cíclica:  $\phi_1 = \phi_2$

## 2.2. Ecuación de estado

La ecuación que describe el comportamiento de un gas ideal es :

$$p = \rho RT \quad \text{con} \quad R = C_p - C_v \quad (2.18)$$

donde  $R$  es la constante del gas ,  $C_p$  y  $C_v$  son las capacidades térmicas específicas a presión constante y volumen constante, respectivamente. El cambio en la energía interna de un gas ideal se define como  $de = C_v dT$  , integrando y utilizando la **ecuación 2.18** se obtiene la **ecuación 2.19**.

$$e = \frac{C_v p v}{R} = \frac{p v}{\gamma - 1} \quad \text{con} \quad \gamma = C_p/C_v \quad (2.19)$$

Un proceso politrópico en cuasiequilibrio se representa con la relación  $Pv^n = \text{cte}$ , siendo  $n$  el índice politrópico. Si  $n = 0$  el proceso es isobárico, si  $n = 1$  el proceso isotérmico y si  $n \approx \gamma$  el proceso es adiabático y reversible. Sea un estado inicial ( $p_0$ ,  $T_0$  y  $v_0$ ) y un estado siguiente ( $p$ ,  $T$  y  $v$ ), entonces el índice politrópico  $n$  se puede calcular con la **ecuación 2.20** [1].

$$\frac{p_0}{p} = \left( \frac{v}{v_0} \right)^n \quad \Rightarrow \quad n = \frac{\ln(p_0/p)}{\ln(v/v_0)} \quad (2.20)$$

Además, se tienen las siguientes relaciones [14]:

$$\frac{\rho}{\rho_0} = \left( \frac{T}{T_0} \right)^{\frac{1}{n-1}} \quad (2.21a)$$

$$\frac{p}{p_0} = \left( \frac{T}{T_0} \right)^{\frac{n}{n-1}} = \left( \frac{\rho}{\rho_0} \right)^n \quad (2.21b)$$

Para calcular  $n$  considerando la velocidad de compresión y expansión del gas debido a una frontera móvil se utiliza la **ecuación 2.22**, donde  $u_p$  es la velocidad de la frontera móvil y  $T$  la temperatura promedio [15].

$$n = \left( 1 \pm \frac{\gamma u_p}{\sqrt{\gamma R T}} \right) (\gamma - 1) + 1 \quad (- : \text{compresión}, + : \text{expansión}) \quad (2.22)$$

## 2.3. Turbulencia

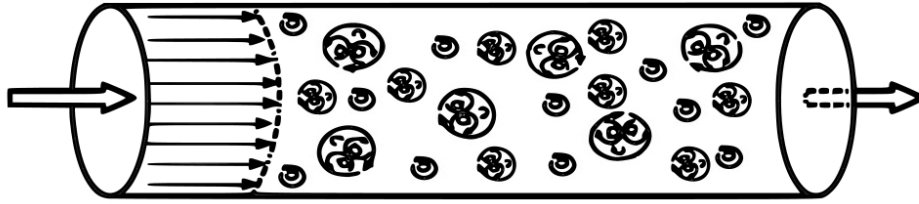
---

La turbulencia ocurre en la mayoría de los flujos, tanto en la naturaleza como en aplicaciones industriales. Los flujos turbulentos se encuentran de forma natural en océanos, en ríos y en la atmósfera, mientras que en la industria están presentes en intercambiadores de calor, reactores químicos, etc. Si se requiere que la transferencia de masa y calor mejoren, entonces se opta por un flujo turbulento.

El movimiento turbulento es una condición irregular del flujo, en la cual varias cantidades muestran variaciones aleatorias con respecto al tiempo y posición. Todos los flujos pueden presentar turbulencia si el número de Reynolds es lo suficientemente grande [16].

### 2.3.1. Aspectos característicos de la turbulencia

Un flujo turbulento presenta varias características en su comportamiento físico, que deben ser tomadas en cuenta para su correcto modelado. Tales características son: irregularidad, difusividad, inestabilidad, dispersión, continuidad y que es un fenómeno tridimensional [16].



**Figura 2.1:** Estructuras turbulentas de pequeña y gran escala en el flujo turbulento que se desarrolla dentro de un tubo [16].

### Irregularidad

Los flujos turbulentos consisten de un rango amplio de escalas de longitud, escalas de velocidad y escalas de tiempo. Los movimientos a gran escala en un flujo turbulento usualmente se refieren a remolinos o vórtices de gran tamaño. Además, la región ocupada por un remolino grande puede contener remolinos de menor tamaño. Esto significa que diferentes escalas pueden coexistir y que las escalas pequeñas pueden existir dentro de las escalas más grandes.

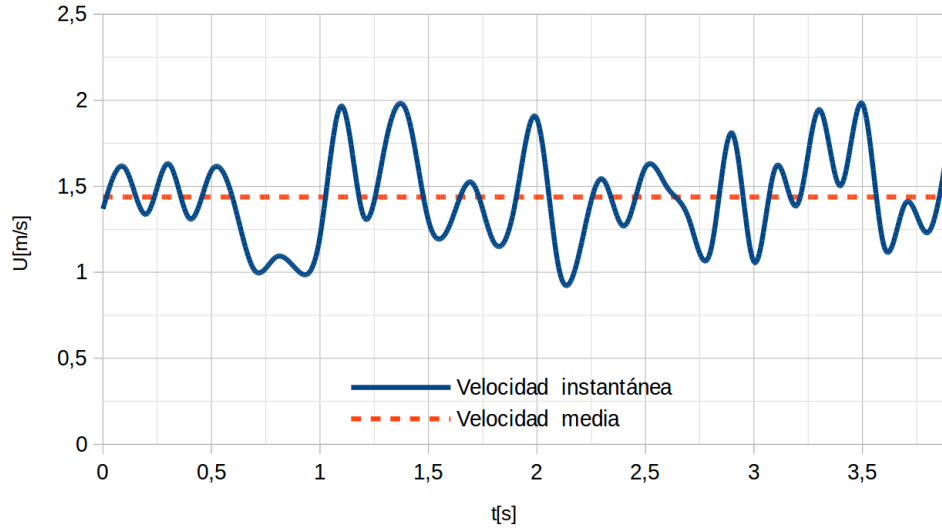
Las escalas más grandes están acotadas por la geometría del flujo, mientras que las escalas más pequeñas lo están por la viscosidad del fluido. El tamaño de los remolinos más pequeños es de varios órdenes de magnitud menor que el tamaño de los remolinos más grandes. En la **figura 2.1** se representa el flujo turbulento dentro de un tubo, con estructuras turbulentas de pequeña y gran escala .

La irregularidad en los flujos turbulentos y el amplio rango de escalas de longitud y tiempo complican el uso de métodos determinísticos para simular el flujo. Sin embargo, los modelos estadísticos son frecuentemente utilizados en simulaciones prácticas de ingeniería.

Un punto fijo que evalúa la velocidad instantánea dentro de un flujo turbulento producirá valores semejantes a los mostrados en la **figura 2.2**. Los remolinos grandes causan fluctuaciones de gran amplitud y baja frecuencia, mientras que los remolinos pequeños provocan fluctuaciones de pequeña amplitud y alta frecuencia.

### Difusividad

Probablemente, la característica más importante de la turbulencia es la difusividad. La difusión turbulenta con respecto a la difusión molecular es varios órdenes de magnitud mayor; permitiendo que las transferencias de movimiento (masa) y de energía sean mucho mayores. En la **figura 2.3** se muestra el transporte turbulento, donde los elementos de fluido no sólo son transportados perpendicularmente a las líneas de corriente del flujo principal sino también en dirección contraria a la del flujo principal.



**Figura 2.2:** Velocidad instantánea en un punto dentro de un flujo turbulento.

### Inestabilidad

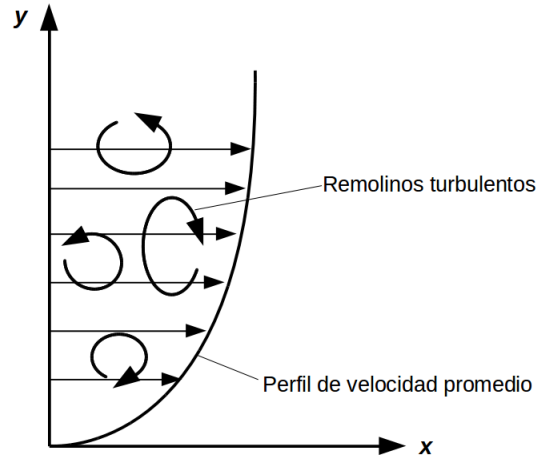
La turbulencia se produce debido a inestabilidades que ocurren cuando el número de Reynolds es lo suficientemente grande. Desde un punto de vista físico, esto pasa porque la escala de tiempo necesaria para amortiguar una fluctuación en la velocidad es mucho más grande que la escala de tiempo en la que ocurre el transporte convectivo. Adicionalmente, desde un punto de vista matemático, considerando las ecuaciones de Navier-Stokes, el incremento del número de Reynolds vuelve más importante el término convectivo que el término viscoso. Las ecuaciones adimensionalizadas de Navier-Stokes son [16]:

$$\frac{\partial \vec{u}^*}{\partial t^*} + \vec{u}^* \cdot \nabla^* \vec{u}^* = -\nabla^* P^* + \frac{1}{Re} \nabla^{*2} \vec{u}^* \quad (2.23)$$

Por lo tanto, la tendencia a la inestabilidad, la cual es amortiguada por la viscosidad, incrementa con el número de Reynolds. En cualquier flujo turbulento son inevitables las perturbaciones en las condiciones iniciales, condiciones de frontera y en las propiedades del fluido.

### Estructuras tridimensionales

La turbulencia es intrínsecamente tridimensional. La razón de esto es que el alargamiento e inclinación de los vórtices no puede ocurrir en dos dimensiones. Sin embargo, los flujos turbulentos pueden ser bidimensionales, en un sentido estadístico, por lo tanto se pueden llevar a cabo simulaciones en dos dimensiones. La mayor parte del modelado de la turbulencia en aplicaciones prácticas de ingeniería está basado en modelos que filtran las fluctuaciones tridimensionales, entonces no se resuelven las fluctuaciones turbulentas, sino el acople entre las fluctuaciones y el campo promedio del flujo.



**Figura 2.3:** Transporte debido a convección turbulenta [16].

### Disipación de la energía cinética turbulenta.

Todos los flujos turbulentos presentan un flujo de energía desde las escalas más grandes hacia las escalas más pequeñas. En las escalas más pequeñas, la energía cinética turbulenta se disipa como calor debido a los esfuerzos viscosos. Este flujo de energía es referido comúnmente como *cascada de energía*.

La idea de cascada de energía significa que la energía cinética turbulenta entra en las escalas más grandes al extraer energía desde el flujo principal. Debido a procesos no viscosos esta energía se transfiere a escalas cada vez más pequeñas. Esto se debe a que los remolinos grandes son inestables y se rompen en remolinos más pequeños. Los remolinos pequeños experimentan procesos análogos de ruptura y transfieren la energía a remolinos aún más pequeños.

En la escala más pequeña se encuentran los remolinos disipativos, donde la energía se disipa como calor debido a la viscosidad molecular. Una consecuencia de la disipación es que la turbulencia decae rápidamente si no hay un suministro constante de energía al sistema.

**Continuidad.** La turbulencia es un fenómeno continuo, en el cual las escalas más pequeñas de turbulencia son mucho más grandes que la escala de longitud molecular. El movimiento de los fluidos es por lo tanto descrito por las ecuaciones de conservación para la masa y momento.

### 2.3.2. RANS

Reynolds fue el primero en utilizar métodos estadísticos para modelar el comportamiento de un flujo turbulento. Estos métodos trabajan con los valores promedio de las variables que describen el flujo, las cuales son función de una posición y tiempo determinados. El promediado de las propiedades de un fluido en régimen turbulento requiere de la llamada descomposición de Rey-

nolds. Las ecuaciones de conservación se promedian con el uso de un promedio temporal y un promedio de Favre (respecto a la masa del fluido), dependiendo de si el flujo es compresible o no compresible. A las ecuaciones de conservación promediadas se les conoce cómo RANS (Reynolds Averaged Navier-Stokes) [2, 16].

### Promedios temporales

Suponiendo que cualquier variable  $f$  se descompone en la suma de una cantidad promedio  $\bar{f}$  y de una fluctuación  $f'$ , entonces

$$f(\vec{x}, t) = \bar{f}(\vec{x}, t) + f'(\vec{x}, t) \quad (2.24)$$

donde  $\bar{f}$  es el promedio temporal de  $f$ , como se indica en la siguiente ecuación:

$$\bar{f}(\vec{x}, t) = \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} f(\vec{x}, t) dt \quad (2.25)$$

además, se cumplen las siguientes propiedades:

$$\overline{f'} = 0 \quad \overline{f'g'} \neq 0 \quad \overline{f+g} = \bar{f} + \bar{g} \quad (2.26)$$

Se debe seleccionar un intervalo  $\Delta t$  que sea compatible con la escala de tiempo de las fluctuaciones turbulentas.

### Promedios de Favre

Para flujos compresibles es más conveniente usar promedios respecto a la masa (Favre) en lugar de promedios temporales, como se indica en la siguiente ecuación:

$$f = \tilde{f} + f'' \quad (2.27)$$

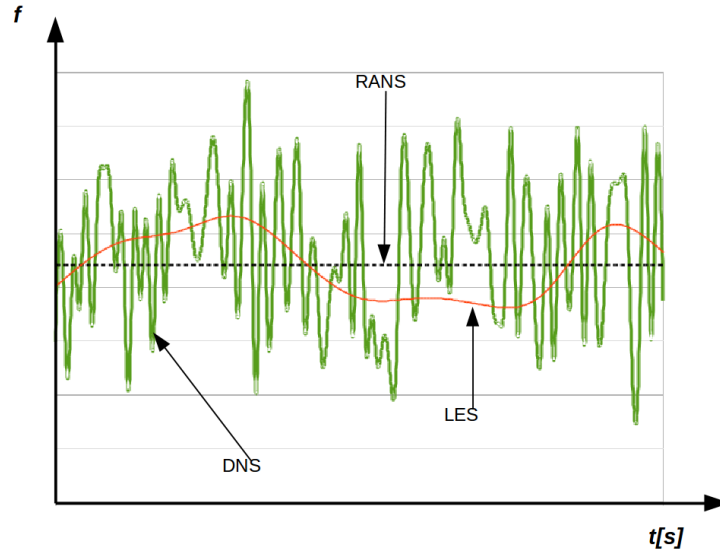
donde la cantidad promedio  $\tilde{f}$  se define como

$$\tilde{f} = \frac{\overline{\rho f}}{\bar{\rho}} = \bar{f} + \frac{\overline{\rho' f'}}{\bar{\rho}} \quad (2.28)$$

y la fluctuación  $f''$  tiene las siguientes propiedades

$$\overline{\rho f''} = 0 \quad (2.29a)$$

$$\tilde{f}'' = -\frac{\overline{\rho' f'}}{\bar{\rho}} \quad (2.29b)$$



**Figura 2.4:** Representación de las tres escalas de turbulencia resueltas para un flujo turbulento en estado permanente [16].

## DNS y LES

Existen otros enfoques para calcular las propiedades de un fluido dentro de un flujo turbulento, los cuales consideran las escalas de turbulencia sin promediarlas como lo hace RANS. Estos enfoques son DNS y LES, donde el primero es más preciso porque resuelve directamente las ecuaciones de transporte a escalas muy pequeñas, el segundo hace los cálculos para escalas más grandes. Ambos modelos son costosos en términos de cálculo.

La simulación numérica directa (DNS) de un flujo turbulento no requiere el uso de modelos de turbulencia, ya que se resuelven las ecuaciones de Navier-Stokes de manera directa; estas ecuaciones describen tanto el flujo laminar como el turbulento. La dificultad en realidad es resolver estas ecuaciones cuando hay números de Reynolds muy altos ya que requieren mallas muy finas y pasos de tiempos pequeños para poder resolver las ecuaciones a escalas pequeñas de turbulencia. Esto significa que se requieren muchos recursos de computo para poder obtener la simulación. Su uso se enfoca más para validar modelos de turbulencia que para usos prácticos en ingeniería.

Ya que el principal problema en la simulación de flujos en números de Reynolds altos es la presencia de las escalas de tiempo y longitud muy pequeñas, una solución lógica es filtrar las ecuaciones para resolver solo en las escalas intermedias a las escalas grandes de turbulencia. LES extiende la utilidad de DNS para aplicaciones en ingeniería al intencionalmente dejar las escalas más pequeñas de turbulencia sin resolver, calculando entonces a escalas grandes, en 3D y en estado transitorio. Sin embargo, el costo computacional sigue siendo alto, ya que se requiere el uso de un mallado muy fino y pasos de tiempo cortos. La **figura 2.4** muestra la comparación de escalas entre los tres enfoques de solución: DNS, LES y RANS.



No. de ecuaciones	Modelo
Cero	Mixing length Cebeci-Smith Baldwin-Lomax
Uno	Spalart-Allmaras
Dos	$k - \varepsilon$ $k - \omega$
Seis	Esfuerzos de Reynolds

Tabla 2.2: Modelos de turbulencia [8] .

### 2.3.3. Modelos de turbulencia

Hay varias opciones para modelar la turbulencia, cada opción requiere de las ecuaciones RANS. Existen modelos algebraicos, modelos de una ecuación, modelos de dos ecuaciones, cierres de segundo orden (Esfuerzos de Reynolds) y modelos algebraicos de esfuerzos. Todos ellos aplicables a flujos tanto compresibles como no compresibles. En la **tabla 2.2** se listan algunos modelos utilizados en el modelado de la turbulencia y el número de ecuaciones adicionales que deben ser resueltas. Ahora se dará una descripción más detallada del modelo  $k - \varepsilon$ , ya que es el modelo utilizado en esta tesis.

#### Modelo estándar $k - \varepsilon$

El modelo  $k - \varepsilon$  es la descripción más general y sofisticada de la turbulencia , pero también la más costosa, la cual permite el transporte de propiedades por convección y difusión, además de la producción y destrucción de turbulencia. Se resuelven dos ecuaciones de transporte, una para la energía cinética turbulenta  $k$  y otra para la razón de disipación de la energía cinética turbulenta  $\varepsilon$  [16].

Aplicando la descomposición de Reynolds a la ecuación de la energía cinética se puede deducir la ecuación exacta de transporte para la energía cinética turbulenta ,  $k$  [16] :

$$k = \frac{\overline{u' \cdot u'}}{2} \quad (2.30a)$$

$$\underbrace{\frac{\partial k}{\partial t}}_I + \underbrace{\vec{u} \cdot \nabla k}_{II} = - \underbrace{\overline{u' u'} : \nabla \vec{u}}_{III} - \underbrace{\nu \nabla \overline{u'} : \nabla \overline{u'}}_{IV} + \nabla \cdot \left( \underbrace{\nu \nabla k}_V - \underbrace{\frac{(\overline{u' \cdot u'}) \vec{u}'}{2}}_{VI} - \underbrace{\frac{\overline{u' p}}{\rho}}_{VII} \right) \quad (2.30b)$$

La interpretación física de los términos en la **ecuación 2.30b** es la siguiente:

- I. Acumulación de  $k$ .
- II. Convección de  $k$  por la velocidad promedio.
- III. Producción de  $k$ .
- IV. Disipación de  $k$  por esfuerzos viscosos.
- V. Difusión molecular de  $k$ .
- VI. Transporte turbulento por fluctuaciones en la velocidad.
- VII. Transporte turbulento por fluctuaciones en la presión.

Es necesario utilizar cierres que permitan dar una aproximación a los términos III, IV, VI y VII de la **ecuación 2.30b**. La hipótesis de Boussinesq (**ec.2.31a**) se utiliza para obtener el cierre para el término III:

$$\frac{\tau}{\rho} = -\overline{u'u'} = \nu_T (\nabla \bar{u} + \nabla \bar{u}^T) - \frac{2}{3}k\mathbf{I} \quad (2.31a)$$

$$-\overline{u'u'} : \nabla \bar{u} = \nu_T (\nabla \bar{u} : \nabla \bar{u} + \nabla \bar{u}^T : \nabla \bar{u}) - \frac{2}{3}k\nabla \cdot \bar{u} \quad (2.31b)$$

El segundo cierre es una para la razón de disipación  $\varepsilon$ , y se define como

$$\varepsilon = \nu \overline{\nabla u' : \nabla u'} \quad (2.32)$$

El tercer cierre es para las fluctuaciones de velocidad y presión, relacionadas con el transporte turbulento de  $k$ , que usualmente se modela como un gradiente de difusión, **ecuación 2.33**.

$$-\frac{\overline{(u' \cdot u')u'}}{2} - \frac{\overline{u'p}}{\rho} = \frac{\nu_T}{\sigma_k} \nabla k \quad (2.33)$$

donde,  $\sigma_k$  es conocido como el número de Prandtl-Schmidt y  $\nu_T$  la viscosidad turbulenta. Sustituyendo las **ecuaciones 2.31b**, **2.32** y **2.33** en la **ecuación 2.30b** se obtiene la ecuación modelada para  $k$ :

$$\boxed{\frac{\partial k}{\partial t} + \bar{u} \cdot \nabla k = \nu_T [(\nabla \bar{u} + \nabla \bar{u}^T) : \nabla \bar{u}] - \varepsilon + \nabla \cdot \left[ \left( \mathbf{v} + \frac{\nu_T}{\sigma_k} \right) \nabla k \right]} \quad (2.34)$$

Ahora es necesario calcular  $\varepsilon$  y la viscosidad turbulenta. La forma general de la ecuación modelada de  $\varepsilon$  es

$$\boxed{\underbrace{\frac{\partial \varepsilon}{\partial t}}_I + \underbrace{\bar{u} \cdot \nabla \varepsilon}_{II} = \underbrace{C_{\varepsilon 1} \nu_T \frac{\varepsilon}{k} [(\nabla \bar{u} + \nabla \bar{u}^T) : \nabla \bar{u}]}_{III} - \underbrace{C_{\varepsilon 2} \frac{\varepsilon^2}{k}}_{IV} + \underbrace{\nabla \cdot \left[ \left( \mathbf{v} + \frac{\nu_T}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon \right]}_V} \quad (2.35)$$

Constante	Valor
$C_\mu$	0.09
$C_{\varepsilon 1}$	1.44 ~ 1.55
$C_{\varepsilon 2}$	1.92 ~ 2.00
$\sigma_k$	1.00
$\sigma_\varepsilon$	1.30

Tabla 2.3: Coeficientes de cierre en el modelo estándar  $k - \varepsilon$  [8, 16].

La interpretación física de los términos en la **ecuación 2.35** es la siguiente:

- I. Acumulación de  $\varepsilon$
- II. Convección de  $\varepsilon$  por la velocidad promedio.
- III. Producción de  $\varepsilon$
- IV. Disipación de  $\varepsilon$
- V. Difusión de  $\varepsilon$

La constante de tiempo para la turbulencia se calcula con la energía cinética turbulenta y la razón de disipación de la energía turbulenta:

$$\zeta = k/\varepsilon \quad (2.36a)$$

por lo tanto

$$\varepsilon/\zeta = \varepsilon^2/k \quad (2.36b)$$

Además, la viscosidad turbulenta es el producto entre la velocidad característica y la longitud de escala,  $\nu_T \propto uL$ , entonces

$$\nu_T = C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon}, \quad \nu_T = \mu_T/\bar{\rho} \quad (2.37)$$

La robustez del modelo estándar  $k - \varepsilon$  y la facilidad para interpretar cada uno de los términos lo vuelven el modelo más utilizado. Sin embargo, no siempre se logra una buena precisión debido a la isotropía que impone la hipótesis de Boussinesq y a la forma en que se modela la ecuación de disipación. La precisión del modelo se puede mejorar al ajustar los parámetros para un flujo en particular, suponer anisotropía y cambiar la relación de disipación. Los valores de las constantes  $C_\mu$ ,  $C_{\varepsilon 1}$ ,  $C_{\varepsilon 2}$ ,  $\sigma_k$  y  $\sigma_\varepsilon$  se dan en la **tabla 2.3**.



## Capítulo 3

# Método de solución numérica

En este capítulo se describen las características propias de los métodos numéricos y en específico el método de volúmenes finitos para un flujo en estado no permanente. Además, se presentan brevemente algunas soluciones iterativas de los sistemas de ecuaciones lineales, los cuales son generados al utilizar un método numérico. De igual forma, se menciona el algoritmo SIMPLE que permite hacer correcciones en la presión y la velocidad al acoplar los campos de presión y velocidad. Finalmente, se concluye con la implementación de las condiciones de frontera.

### 3.1. Introducción a los métodos de solución numérica

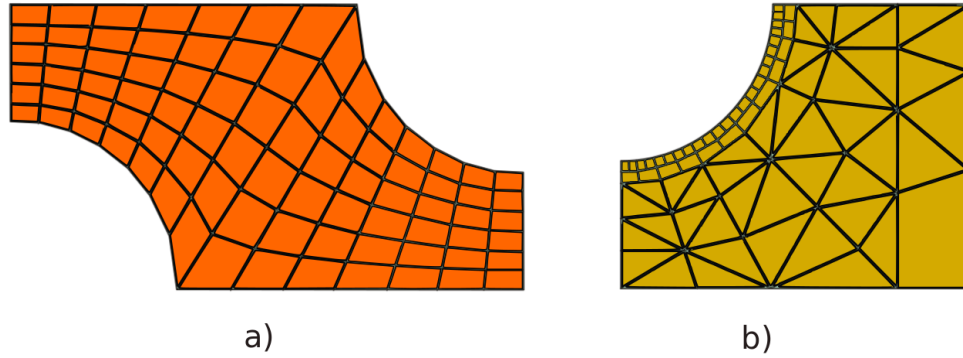
---

Como se presentó en el capítulo 2, los fenómenos relacionados con el movimiento de un fluido pueden ser descritos por ecuaciones en derivadas parciales (o integro-diferenciales), las cuales no se pueden resolver analíticamente salvo en ciertos casos especiales. Para obtener una solución numérica aproximada se utiliza un método de discretización que da una aproximación de las ecuaciones diferenciales por medio de un sistema de ecuaciones algebraicas, que se puede resolver por computadora. Las aproximaciones se aplican a pequeños dominios en el espacio y/o tiempo tal que la solución numérica provee resultados en locaciones discretas en el espacio y tiempo [9].

#### 3.1.1. Componentes de un método de solución numérica

##### Modelo matemático

El punto de inicio de cualquier método numérico es el modelo matemático, i.e. el conjunto de ecuaciones en derivadas parciales y las condiciones de frontera. Se selecciona el modelo apropiado para un problema determinado y se hacen las simplificaciones necesarias (compresible, no viscoso, turbulento, en dos o tres dimensiones, etc.). Debido a ello existen códigos de propósito general que pueden ser manipulados en distinto grado y aquellos con aplicaciones específicas que pueden dar soluciones más exactas para ciertos fenómenos.



**Figura 3.1:** Mallado numérico. a) estructurado no ortogonal , b) no estructurado [9].

### Método de discretización

Después de seleccionar el modelo matemático se escoge el método de discretización adecuado para aproximar las ecuaciones diferenciales de las variables localizadas en un espacio y tiempo discretos, por medio de un sistema de ecuaciones algebraicas. Hay muchos enfoques de discretización, pero los más importantes son los métodos de diferencias finitas (FDM), volúmenes finitos (FVM) y elemento finito (FEM). Cada método llega a la misma solución si el mallado es muy fino pero algunos métodos son mejores para una determinada clase de problemas.

### Malla computacional

Las locaciones donde las variables se calculan se definen por la malla computacional, que básicamente es la representación discretizada del dominio geométrico del problema a resolver. El dominio de la solución se divide en un número finito de subdominios (elementos, volúmenes de control, etc.). Existen varias formas de construir una malla numérica que dependen tanto de la geometría como del fenómeno a simular, resultando en una malla estructurada o no estructurada (**fig. 3.1**).

Una *malla estructurada o regular* consiste en familias de líneas de división con la propiedad de que los miembros de una sola familia no se cruzan entre sí y sólo cruzan una vez a los de otra familia. Esto permite que las líneas de un arreglo dado puedan ser numeradas consecutivamente, lo que da una distribución regular de las celdas. Por lo tanto, la posición de cualquier punto (o celda) de la malla en el dominio se puede identificar por un conjunto de índices, si es en 3D  $(i,j,k)$ . Si las líneas de división al cruzarse forman siempre ángulos rectos entre sí, entonces la malla es *ortogonal*, de lo contrario es *no ortogonal*.

Una *malla no estructurada* es adecuada para geometrías complejas debido a su flexibilidad para adaptarse a estas geometrías. Aunque, se puede usar con cualquier esquema de discretización, una malla no estructurada funciona mejor con los métodos de diferencias finitas y del elemento finito. La principal desventaja de una malla no estructurada es la mayor complejidad de las ecuaciones discretizadas y la dificultad para programar el método de solución.

### **Aproximaciones finitas**

Siguiendo a la elección del tipo de malla se seleccionan las aproximaciones a utilizar en el proceso de discretización. En un método de diferencias finitas se seleccionan las aproximaciones para las derivadas en un punto de la malla. En un método de volúmenes finitos se deben seleccionar las aproximaciones para las integrales de superficie y de volumen. En el método del elemento finito se escogen las funciones de forma.

### **Método de solución**

La discretización lleva a grandes sistemas algebraicos de ecuaciones no lineales, por lo que el método de solución depende del problema. Para un flujo no permanente o transitorio se utilizan ecuaciones diferenciales ordinarias con valores iniciales y resolviendo las ecuaciones en cada paso de tiempo. Los problemas de flujo permanente usualmente se resuelven con un pseudo-avance en el tiempo o algún esquema de iteración similar.

Debido a que las ecuaciones no son lineales se recurre a una linealización sucesiva de las ecuaciones, resultando en sistemas lineales resueltos con técnicas iterativas. La selección de la solución depende del tipo de malla y el número de nodos involucrados en cada ecuación algebraica.

### **Criterio de convergencia**

Finalmente, es necesario ajustar un criterio de convergencia para el método iterativo seleccionado. Usualmente, existen dos niveles de iteración: iteraciones internas en las cuales la ecuación lineal es resuelta e iteraciones externas que se ocupan de la no linealidad y del acople de las ecuaciones. Decidir cuando detener el proceso iterativo en cada nivel es importante, tanto desde el punto de vista de la eficiencia como de la exactitud.

## **3.1.2. Propiedades de los métodos de solución numérica**

### **Consistencia**

La discretización se vuelve exacta conforme el espacio entre las líneas de la malla tiende a cero. La diferencia entre la ecuación discretizada y la exacta es el llamado error de truncamiento, que usualmente se estima al reemplazar todos los valores nodales de la aproximación discreta por una expansión en series de Taylor sobre un solo punto. Como resultado se recupera la ecuación diferencial original más un residuo, el cual representa el error de truncamiento. Para que un método sea consistente el error de truncamiento debe tender a cero cuando el espaciado de la malla y el paso de tiempo tienden a cero. Incluso, si las aproximaciones son consistentes no necesariamente significa que la solución del sistema de ecuaciones discretizadas se volverá una solución exacta de la ecuación diferencial.

### **Estabilidad**

Un método de solución numérica es estable, si no magnifica los errores que aparecen durante el proceso de la solución numérica. Para problemas temporales la estabilidad garantiza una solución acotada, siempre y cuando la solución de la ecuación exacta sea acotada. La estabilidad puede ser difícil de estudiar, especialmente cuando hay condiciones de frontera y no linealidad. Por esta razón es común estudiar la estabilidad de un método aplicado a problemas lineales con coeficientes constantes y sin condiciones de frontera. El enfoque más usado para el estudio de la estabilidad en esquemas numéricos es el método de Von Neumann. Sin embargo, cuando la solución es complicada debido a la no linealidad o al acople entre las ecuaciones y sus condiciones de frontera, entonces es necesario recurrir a la experiencia e intuición. Muchos esquemas de solución requieren que el paso de tiempo sea menor a cierto límite o que se use una sub-relajación.

### **Convergencia**

Un método numérico es convergente si la solución de las ecuaciones discretizadas tiende a la solución exacta de la ecuación diferencial conforme el espaciado en la malla se aproxima a cero. La convergencia está fuertemente relacionada con las condiciones de frontera, la consistencia y la estabilidad del método numérico. Generalmente, la convergencia se estudia al repetir la solución numérica para diferentes mallas, con espaciados cada vez menores. Si el método es estable y todas las aproximaciones son consistentes, usualmente se converge en una solución independiente de la malla.

### **Conservación**

Las ecuaciones a resolver son leyes de conservación, por lo tanto, los esquemas numéricos también deben respetar esas leyes. Esto significa que en estado permanente y en ausencia de fuentes, la cantidad de una propiedad conservada que deja un volumen cerrado de control es igual a la cantidad que entra al volumen. Esta es una propiedad importante del método de solución, ya que impone una restricción sobre el error de la solución. Si la conservación de masa, movimiento y energía no se cumple, el error puede distribuir estas cantidades sobre todo el dominio de la solución de forma incorrecta.

### **Acotabilidad**

Físicamente, las cantidades como densidad, energía cinética y turbulencia siempre deben ser positivas, otras cantidades como la concentración deben estar entre 0% y 100%. En ausencia de fuentes algunas ecuaciones requieren que los valores mínimos y máximos de la variable se encuentren dentro de las fronteras del dominio. Todos los esquemas de alto orden afortunadamente pueden producir soluciones no acotadas, esto usualmente pasa sólo en mallas que son muy



burdas, así una solución con sobresaltos indica que los errores son grandes y la malla necesita refinarse.

### Exactitud

Las soluciones numéricas siempre introducen tres tipos de errores sistemáticos en su algoritmo:

- *Errores en el modelado*, los cuales se definen como la diferencia entre el flujo real y la solución exacta del modelo matemático.
- *Errores de discretización*, definidos como la diferencia entre la solución exacta de las ecuaciones de conservación y la solución exacta del sistema algebraico de ecuaciones obtenidas por la discretización de estas ecuaciones.
- *Errores por iteración o de convergencia*, definidos como la diferencia entre las soluciones iterativa y exacta de los sistemas algebraicos de ecuaciones.

### 3.1.3. Métodos de discretización

#### Método de diferencias finitas (FDM)

Es un viejo método para solucionar numéricamente ecuaciones en derivadas parciales, siendo un método fácil de usar con geometrías sencillas. En principio puede aplicarse a cualquier tipo de malla; sin embargo, es común su uso en mallas estructuradas. El punto de inicio es la ecuación de conservación en su forma diferencial. En cada punto de la malla, la ecuación es aproximada al reemplazar las derivadas parciales por aproximaciones en términos de los valores nodales de las funciones. El resultado es una ecuación por cada nodo de la malla, el valor de la variable en ese nodo y en los nodos vecinos aparecen como incógnitas. La expansión en series de Taylor o ajuste polinomial se usa para obtener las aproximaciones a la primera y segunda derivadas de las variables con respecto a la posición. Cuando es necesario, estos métodos se usan para obtener los valores de las variables en lugares distintos a los nodos (interpolación). En mallas estructuradas el método es muy simple y efectivo, permitiendo obtener esquemas de alto orden. Las principales desventajas son que la conservación no se logra en automático y en flujos complejos, la geometría se vuelve una restricción.

#### Método de volúmenes finitos (MVF)

Este método usa la forma integral de las ecuaciones de conservación como primer paso. El dominio de la solución se subdivide en volúmenes de control (VC), también llamados *celdas*; las ecuaciones de conservación se aplican en cada celda. En el centro de cada celda se coloca un nodo computacional donde se calculan los valores de la variable. La interpolación es aplicada para expresar los valores de la variable en la superficie del VC en términos de valores nodales. Como resultado se obtiene una ecuación algebraica por cada celda, en la que aparece un determinado

número de nodos vecinos. Además de poder ajustarse a cualquier tipo de malla, también es adecuado para geometrías complejas. El mallado define solamente las fronteras del VC y no necesita relacionarse a un sistema coordenado. El método es conservativo por construcción, tanto que las integrales de superficie (que representan los flujos convectivos y difusivos) son las mismas para los VC que comparten sus fronteras. La desventaja comparado con las diferencias finitas es que los métodos con órdenes mayores a dos son difíciles de implementar en tres dimensiones. Esto se debe a que el enfoque por volúmenes finitos requiere tres niveles de aproximación: interpolación, diferenciación e integración.

### Método del elemento finito (FEM)

Es similar al método de volúmenes finitos en muchos sentidos, ya que el dominio se divide en un conjunto de volúmenes discretos o elementos finitos; en 2D generalmente son triángulos o cuadriláteros, mientras que en 3D son tetraedros o hexaedros. La característica distintiva es que las ecuaciones son multiplicadas por una función de ponderación antes de que sean integradas sobre el dominio entero. En los métodos más simples, la solución se aproxima con una función lineal de forma dentro de cada elemento para garantizar la continuidad de la solución al cruzar las fronteras del elemento.

Esta aproximación se sustituye dentro de la integral ponderada de la ley de conservación y las ecuaciones a resolver se derivan porque se requiere que la derivada de la integral con respecto a cada valor nodal sea cero, esto corresponde a seleccionar la mejor solución dentro del grupo de funciones permitidas (la que tenga el menor residual). El resultado es un conjunto de ecuaciones algebraicas no lineales. La ventaja más importante es la capacidad de tratar con geometrías arbitrarias. Las mallas se refinan con facilidad y cada elemento simplemente se subdivide. Además de que existe una facilidad para realizar un análisis matemático, al mostrar ciertas propiedades óptimas para algunos tipos de ecuaciones. El principal inconveniente es compartido por cualquier método que usa un mallado no estructurado y es que las matrices de las ecuaciones linealizadas hacen difícil encontrar eficientemente una solución.

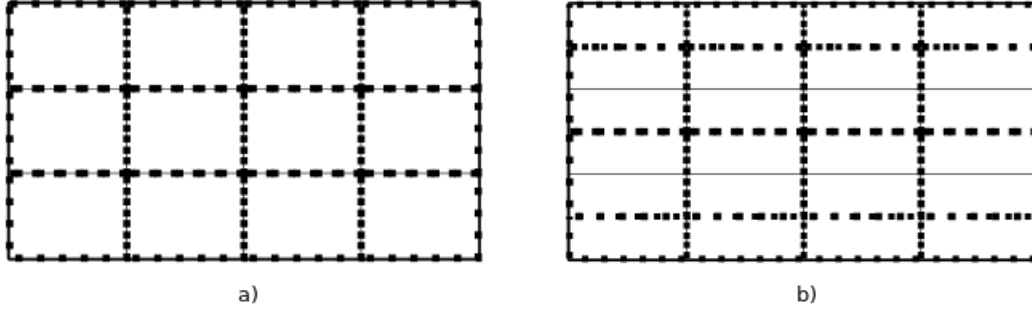
## 3.2. Método de volúmenes finitos

---

Después de mencionar los tres métodos principales de discretización, se describirá con mayor detalle el método de volúmenes finitos, la discretización de las ecuaciones y cómo se resuelven los sistemas generados. Ya que es el método implementado en esta tesis.

El costo de *discretizar* el dominio es la introducción de errores numéricos en la solución. Es importante controlar la magnitud del error reduciendo el tamaño de la celda, pero una reducción innecesaria del tamaño de la celda aumenta la potencia y tiempo requeridos para el cómputo. Por lo tanto, el objetivo es encontrar una solución rápida con la precisión suficiente.

Al definir la malla se debe considerar si el algoritmo de solución está centrado en la celda



**Figura 3.2:** Volúmenes de control en un mallado rectangular. a) algoritmo centrado en la celda , b) algoritmo centrado en los nodos [16].

o en los nodos. Un algoritmo centrado en la celda creará volúmenes de control idénticos a la malla y los nodos de la malla se sitúan en las intersecciones de los bordes de las celdas, como en la **figura 3.2**. Habiendo definido la malla se procede a discretizar las ecuaciones de transporte que en general están representadas por la ecuación **ecuación 3.1**, para una propiedad arbitraria  $\phi$  [8].

$$\frac{\partial \rho \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \phi \vec{u}) = \nabla \cdot (\Gamma \nabla \phi) + S_\phi \quad (3.1)$$

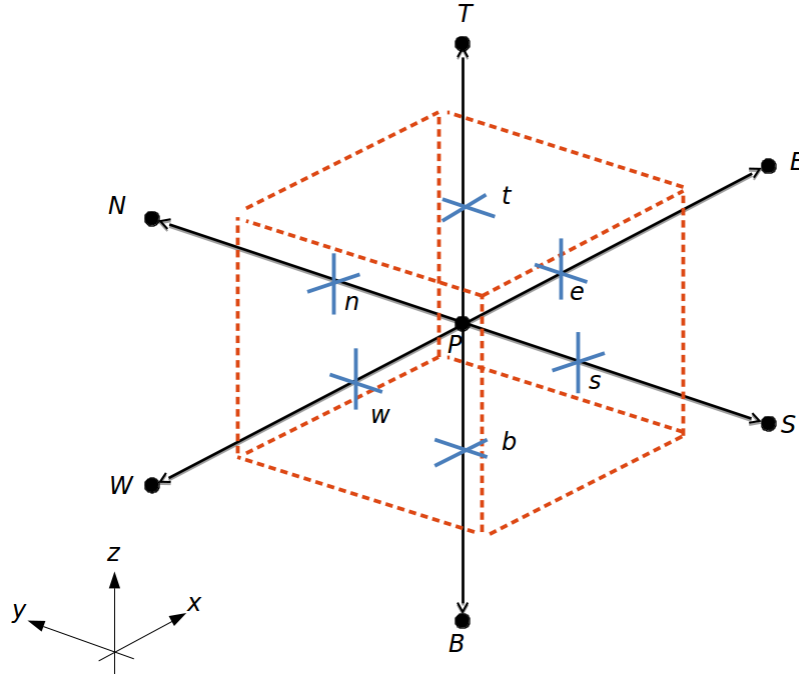
### 3.2.1. Discretización

Primeramente, el dominio y la celda utilizados para discretizar la **ecuación 3.2** se muestran en la **figura 3.3** . El nodo central  $P$  tiene seis nodos vecinos identificados como Oeste, Este, Sur, Norte , Inferior y Superior ( $W, E, S, N, B, T$ , respectivamente). La notación  $w, e, s, n, b$  y  $t$  es usada para las caras oeste, este, sur, norte, inferior y superior, respectivamente.

La **ecuación 3.1** se integra sobre un volumen de control finito VC y durante un paso de tiempo  $\Delta t$ . Para resolver las integrales se sustituyen las integrales de volumen en los términos convectivo y difusivo por integrales de superficie y se cambia el orden de integración en el término temporal, resultando la **ecuación 3.2** [8, 17].

$$\begin{aligned} \int_{VC} \left[ \int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} dt \right] dV + \int_t^{t+\Delta t} \left[ \int_{S_{VC}} \vec{n} \cdot (\rho \phi \vec{u}) dA \right] dt \\ = \int_t^{t+\Delta t} \left[ \int_{S_{VC}} \vec{n} \cdot (\Gamma \nabla \phi) dA \right] dt \\ + \int_t^{t+\Delta t} \left[ \int_{VC} S_\phi dV \right] dt \end{aligned} \quad (3.2)$$

La integral temporal se calcula con el uso de un parámetro de ponderación,  $\theta$ , tal que la propiedad  $\phi$  se evalúa en un tiempo  $t$  o un tiempo  $t + \Delta t$ , incluso como una combinación de ambos, según el valor que tome el parámetro de ponderación que varía entre 0 y 1. La integral



**Figura 3.3:** Celda en tres dimensiones con sus nodos vecinos [8].

$I_\phi$  con respecto al tiempo es

$$I_\phi = \int_t^{t+\Delta t} \phi_P dt = [\theta \phi_P + (1 - \theta) \phi_P^0] \Delta t \quad (3.3)$$

si

$$\begin{aligned} \theta = 0 &\implies I_t = \phi^0 \Delta t \\ \theta = 0.5 &\implies I_t = 0.5(\phi + \phi^0) \Delta t \\ \theta = 1 &\implies I_t = \phi \Delta t \end{aligned}$$

Cuando  $\theta = 0$  se trata de un esquema explícito, si  $0 < \theta \leq 1$  entonces resultan esquemas implícitos, si  $\theta = 0.5$  es el esquema Crank-Nicolson y si  $\theta = 1$  entonces es un esquema completamente implícito [8].

Utilizando un esquema de diferencias híbrido completamente implícito, la **ecuación 3.2** se convierte en la siguiente ecuación discretizada

$$\begin{aligned} a_p \phi_P = &a_W \phi_W + a_E \phi_E + a_S \phi_S + a_N \phi_N \\ &+ a_B \phi_B + a_T \phi_T + a_P^0 \phi_P^0 + S_u \end{aligned} \quad (3.4)$$

donde

$$a_p = a_W + a_E + a_S + a_N + a_B + a_T + a_P^0 + \Delta F - S_p \quad (3.5)$$

$$\boxed{a_P^0 = \frac{\rho_P^0 \Delta V}{\Delta t}} \quad (3.6)$$

El término fuente se representa como:

$$\boxed{\bar{S} \Delta V = S_u + S_P \phi_P} \quad (3.7)$$

$$\begin{aligned} a_W &= \text{máx} \left[ F_w, \left( D_w + \frac{F_w}{2} \right), 0 \right] & a_E &= \text{máx} \left[ -F_e, \left( D_e - \frac{F_e}{2} \right), 0 \right] \\ a_S &= \text{máx} \left[ F_s, \left( D_s + \frac{F_s}{2} \right), 0 \right] & a_N &= \text{máx} \left[ -F_n, \left( D_n - \frac{F_n}{2} \right), 0 \right] \\ a_B &= \text{máx} \left[ F_b, \left( D_b + \frac{F_b}{2} \right), 0 \right] & a_T &= \text{máx} \left[ -F_t, \left( D_t - \frac{F_t}{2} \right), 0 \right] \end{aligned} \quad (3.8)$$

$$\Delta F = F_e - F_w + F_n - F_s + F_t - F_b$$

En las expresiones anteriores, los valores de  $F$  y  $D$  se calculan como sigue:

$$\begin{aligned} F_w &= (\rho u)_w A_w & , & \quad D_w = \frac{\Gamma_w}{\delta x_{WP}} A_w & , & \quad F_e = (\rho u)_e A_e & , & \quad D_e = \frac{\Gamma_e}{\delta x_{PE}} A_e \\ F_s &= (\rho v)_s A_s & , & \quad D_s = \frac{\Gamma_s}{\delta y_{SP}} A_s & , & \quad F_n = (\rho v)_n A_n & , & \quad D_n = \frac{\Gamma_n}{\delta y_{PN}} A_n \\ F_b &= (\rho w)_b A_b & , & \quad D_b = \frac{\Gamma_b}{\delta z_{BP}} A_b & , & \quad F_t = (\rho w)_t A_t & , & \quad D_t = \frac{\Gamma_t}{\delta z_{PT}} A_t \end{aligned} \quad (3.9)$$

### 3.2.2. Solución de ecuaciones algebraicas

Las ecuaciones de conservación en un dominio dado, según el método de volúmenes finitos, resulta en un sistema algebraico de ecuaciones lineales que debe ser resuelto. La complejidad y el tamaño de dicho sistema de ecuaciones depende de la dimensión del problema, el número de nodos en la malla y el tipo de discretización que se haya aplicado.

Existen dos familias de técnicas para solucionar ecuaciones algebraicas lineales: *Métodos directos* y *métodos indirectos o iterativos*. Por ejemplo, como métodos directos están la regla de Cramer para la inversa de una matriz y la eliminación Gaussiana.

Por otro lado, los métodos iterativos están basados en la aplicación repetitiva de un algoritmo relativamente simple que lleva a una eventual convergencia después de cierto número de repeticiones. Como ejemplos se encuentran los métodos de Jacobi, de Gauss-Seidel y de Stone.

Enseguida se presentan brevemente los métodos iterativos de Jacobi y de Gauss-Seidel [8, 9]:

### Método de Jacobi

Considerando un sistema de  $n$  ecuaciones y  $n$  incógnitas en una matriz de forma  $\mathbf{A} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{b}$ , donde los coeficientes son

$$\sum_{j=1}^n a_{ij} x_j = b_i \quad (3.10)$$

La ecuación de iteración del método de Jacobi

$$x_i^{(k)} = \sum_{j=1, j \neq i}^n \left( \frac{-a_{ij}}{a_{ii}} \right) x_j^{(k-1)} + \frac{b_i}{a_{ii}} \quad (i = 1, 2, \dots, n) \quad (3.11a)$$

$$\mathbf{x}^{(k)} = \mathbf{T} \cdot \mathbf{x}^{(k-1)} + \mathbf{c} \quad (3.11b)$$

donde  $\mathbf{T}$  es la matriz de iteración y  $\mathbf{c}$  el vector constante, además los coeficientes de la matriz  $\mathbf{T}$  son los siguientes:

$$T_{ij} = \begin{cases} -a_{ij}/a_{ii} & \text{si } i \neq j \\ 0 & \text{si } i = j \end{cases} \quad (3.12)$$

### Método de Gauss-Seidel

La ecuación de iteración para el método de Gauss-Seidel tanto en forma indicial como matricial es la siguiente:

$$x_i^{(k)} = \sum_{j=1}^{i-1} \left( \frac{-a_{ij}}{a_{ii}} \right) x_j^{(k)} + \sum_{j=i+1}^n \left( \frac{-a_{ij}}{a_{ii}} \right) x_j^{(k-1)} + \frac{b_i}{a_{ii}} \quad (i = 1, 2, \dots, n) \quad (3.13a)$$

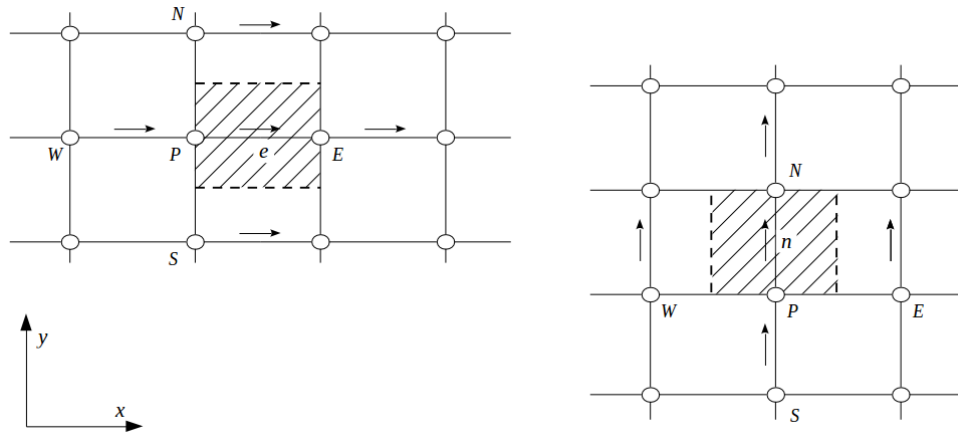
$$\mathbf{x}^{(k)} = \mathbf{T}_1 \mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{T}_2 \mathbf{x}^{(k-1)} + \mathbf{c} \quad (3.13b)$$

Los coeficientes de las matrices  $T_1$  y  $T_2$  son los siguientes:

$$T_{1ij} = \begin{cases} -a_{ij}/a_{ii} & \text{si } i > j \\ 0 & \text{si } i \leq j \end{cases} \quad (3.14a)$$

$$T_{2ij} = \begin{cases} 0 & \text{si } i \geq j \\ -a_{ij}/a_{ii} & \text{si } i < j \end{cases} \quad (3.14b)$$

En la solución iterativa de las ecuaciones algebraicas y en todos los esquemas empleados para el manejo de la no linealidad es deseable acelerar o desacelerar los cambios, entre iteraciones de las variables dependientes. Este proceso se llama sobre-relajación o sub-relajación, dependiendo



**Figura 3.4:** Volúmenes de control para  $u$  y  $v$  en una malla decalada [17].

de sí los cambios en la variable se aceleran o alentan.

La sobre-relajación también se usa en conjunción con el método Gauss-Seidel, el esquema que resulta se conoce como Sobre-Relajación Sucesiva. Una sub-relajación es útil para problemas donde la no linealidad de las ecuaciones provocan divergencia en la solución iterativa.

### 3.3. Algoritmo SIMPLE

En la sección 3.2 se formuló la discretización que permite resolver la ecuación diferencial general para una propiedad  $\phi$ , en la presencia de un campo de flujo dado. Sin embargo, salvo casos muy especiales, no es posible especificar el campo de flujo por lo que se deben calcular las componentes locales de velocidad y el campo de densidad con las ecuaciones de momento.

Además de las dificultades por la no linealidad de las ecuaciones de momento, la principal dificultad para el cálculo del campo de velocidad es determinar el campo de presiones, el cual forma parte del término fuente en la ecuación de momento. Un campo de presión correcto en la ecuación de momento resulta en un campo de velocidad que satisface la ecuación de continuidad.

Surgen además problemas cuando la diferencia de presión o el flujo de masa entre las caras opuestas de una celda se deben determinar usando algún tipo de interpolación entre los nodos adyacentes para asignar valores de presión o velocidad en las caras de la celda, lo cuál disminuye la precisión en la solución. Los problemas asociados con las no linealidades del arreglo de ecuaciones, la relación entre presión y velocidad pueden ser resueltos con una estrategia iterativa de solución, tal como el algoritmo SIMPLE de Patankar y Spalding (1972).

El algoritmo SIMPLE es esencialmente un procedimiento de suponer-correr para el cálculo de la presión en una malla decalada. Esto permite evaluar variables escalares como presión,

densidad, temperatura etc., en los puntos nodales ordinarios ( $N$ ,  $S$ ,  $E$ ,  $W$ ,  $T$  y  $B$ ) y calcular las componentes de la velocidad en las caras de la celda ( $n$ ,  $s$ ,  $e$ ,  $w$ ,  $t$  y  $b$ ) con el uso de una malla decalada. La **figura 3.4** muestra una malla decalada tanto en la dirección  $u$  como en la dirección  $v$ .

Las operaciones principales del método SIMPLE en el orden de su ejecución son las siguientes [17]:

1. Suponer el campo de presiones,  $p^*$ .
2. Resolver las ecuaciones de momento para obtener  $u^*$ ,  $v^*$  y  $w^*$ . El subíndice  $nv$  se refiere a los nodos vecinos y  $A$  al área perpendicular al flujo.

$$\begin{aligned}
 a_e u_e^* &= \sum a_{nv} u_{nv}^* + \bar{S} \Delta V_{\text{celda}} + a_P^0 + (p_P^* - p_E^*) A_e \\
 a_n v_n^* &= \sum a_{nv} v_{nv}^* + \bar{S} \Delta V_{\text{celda}} + a_P^0 + (p_P^* - p_N^*) A_n \\
 a_t w_t^* &= \sum a_{nv} w_{nv}^* + \bar{S} \Delta V_{\text{celda}} + a_P^0 + (p_P^* - p_T^*) A_t
 \end{aligned} \tag{3.15}$$

3. Resolver la ecuación de corrección para la presión,  $p'$ .

$$a_P p' = a_E p'_E + a_W p'_W + a_N p'_N + a_S p'_S + a_T p'_T + a_B p'_B + b \tag{3.16}$$

donde

$$\begin{aligned}
 a_E &= \rho_e d_e A_e & a_W &= \rho_w d_w A_w & a_N &= \rho_n d_n A_n \\
 a_S &= \rho_s d_s A_s & a_T &= \rho_t d_t A_t & a_B &= \rho_b d_b A_b \\
 a_P &= a_E + a_W + a_N + a_S + a_T + a_B \\
 d_e &= \frac{A_e}{a_e}, d_w = \frac{A_w}{a_w}, d_n = \frac{A_n}{a_n}, d_s = \frac{A_s}{a_s}, d_t = \frac{A_t}{a_t}, d_b = \frac{A_b}{a_b}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 b &= \frac{(\rho_P^0 - \rho_P) \Delta V}{\Delta t} + [(\rho u^* A)_w - (\rho u^* A)_e] \\
 &\quad + [(\rho v^* A)_s - (\rho v^* A)_n] + [(\rho w^* A)_b - (\rho w^* A)_t]
 \end{aligned}$$

4. Calcular la presión corregida,  $p_{\text{corr}} = p' + p^*$ .
5. Calcular las componentes de la velocidad:  $u$ ,  $v$  y  $w$ , a partir de los valores  $u^*$ ,  $v^*$  y  $w^*$ , usando las ecuaciones de corrección para la velocidad.



$$\begin{aligned}u_e &= u_e^* + d_e(p'_P - p'_E) \\v_n &= v_n^* + d_n(p'_P - p'_N) \\w_e &= w_e^* + d_t(p'_P - p'_T)\end{aligned}\tag{3.17}$$

6. Resolver las ecuaciones discretizadas para otras  $\phi$ 's .
7. Tratar la presión corregida  $p_{\text{corr}}$  como la nueva presión supuesta  $p^*$ , regresar al paso 2 y repetir el procedimiento hasta converger en una solución.



# Capítulo 4

## Simulación

### Introducción

En este capítulo se describe el sistema cilindro-pistón y las características del flujo a simular, tanto en compresión como en expansión, suponiendo un comportamiento de gas ideal y propiedades termofísicas constantes. Primeramente, se valida el modelo numérico para el flujo inducido por un pistón con cabeza plana que se mueve a  $\pm 10$  m/s, comparando los resultados con la literatura disponible. Posteriormente, se simula el flujo generado por un pistón con cabeza cóncava que se mueve a  $\pm 1$  m/s,  $\pm 5$  m/s y  $\pm 10$  m/s y se calcula el incremento en la energía interna del sistema debido a la disipación viscosa.

Adicionalmente, se presentan las consideraciones numéricas implementadas en *Phoenix*<sup>TM</sup> para generar una malla computacional dinámica. Lo que permite simular una región deformable, una región rígida y una móvil que contenga a la geometría del pistón.

También, se obtiene el campo de velocidades y de presiones para el pistón cóncavo, moviéndose a  $\pm 10$  m/s. Y así observar el movimiento radial del flujo (*squish*), desde la corona del pistón hacia el centro de la cavidad.

### 4.1. Compresión y expansión con pistón plano

---

Se asume un sistema adiabático conformado por un cilindro y un pistón con un aire en su interior. Cuando  $t \leq 0$  el gas se encuentra en condiciones de reposo, con presión y temperatura uniformes en todo el dominio. Las carreras de compresión y expansión ocurren cuando  $t > 0$ , siguiendo la Ley de Gas Ideal y a una determinada velocidad de pistón. Entonces, la presión y temperatura varían por trabajo de compresión o expansión; además, existe un calentamiento del fluido debido a la disipación viscosa, la cual dependerá de la velocidad del pistón.

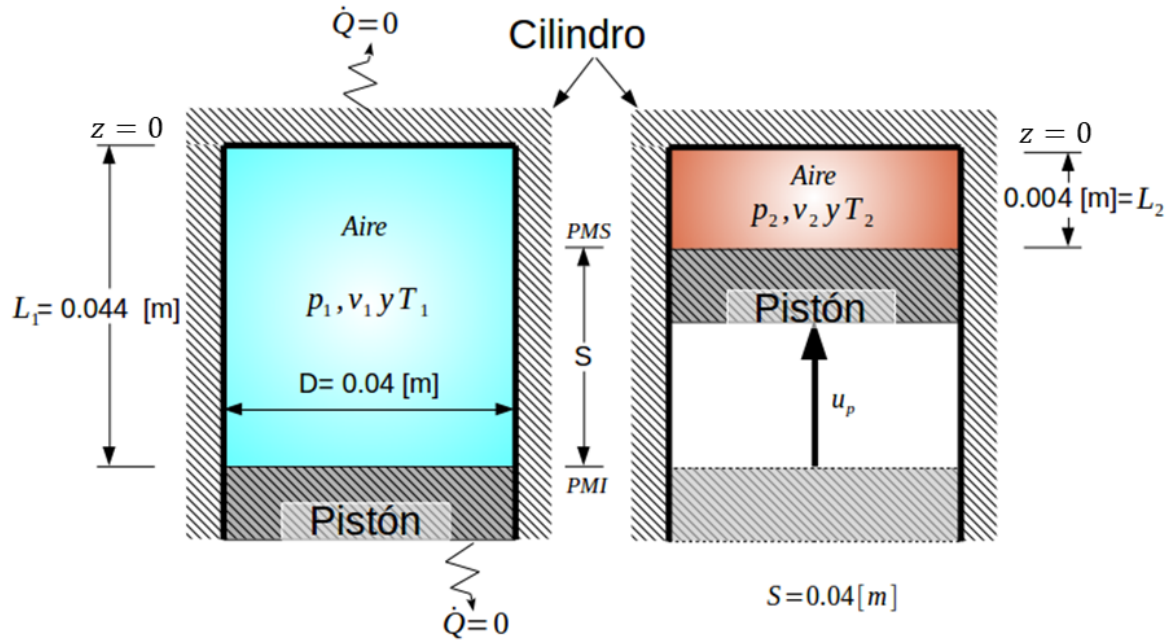
Para la validación, se utilizan los parámetros geométricos implementados en el artículo de Yusof et al. [7]. Estos parámetros son el diámetro del pistón  $D = 0.04$  m, la distancia máxima entre el pistón y la cabeza del cilindro  $L_1 = 0.044$  m y una relación de compresión  $r_c = 11$ . La

distancia mínima entre el pistón y la cabeza del cilindro  $L_2$ , y la carrera de compresión  $S$ , se calculan como sigue:

$$v_1 = \frac{\pi D^2}{4} L_1$$

$$v_2 = \frac{\pi D^2}{4} L_2 \quad \Rightarrow \quad r_c = \frac{v_1}{v_2} = \frac{L_1}{L_2} \quad (4.1)$$

$$\Rightarrow \quad S = L_1 - L_2 = L_1 - \frac{L_1}{r_c}$$



**Figura 4.1:** Descripción geométrica del sistema cuando el pistón plano se localiza en el punto muerto inferior (*PMI*) y en el punto muerto superior (*PMS*).

En la **figura 4.1** se representan los parámetros geométricos y condiciones de frontera que describen al sistema. La cabeza del cilindro o culata se encuentra en  $z = 0$ . Se establecen las propiedades termofísicas del aire:  $\mu = 1.862 \times 10^{-5}$  Pa·s,  $R = 287$  J/(kgK),  $\gamma = 1.4$ ,  $\lambda = 0.0261$  W/(mK), las cuales son constantes. Los valores iniciales de presión y temperatura cuando el pistón se encuentra en el *PMI* son  $p_i = 1.013 \times 10^5$  Pa y  $T_i = 300$  K, mientras que en el *PMS* se tiene que  $p_i = 2.90776 \times 10^6$  Pa y  $T_i = 782.85$  K.

El dominio es simétrico respecto al eje  $z$  y con condición de no deslizamiento en las superficies del pistón y cilindro. Se utilizan las ecuaciones de transporte instantáneas en coordenadas cilíndricas (**apéndice A**), por lo tanto se tiene que :

Condiciones iniciales

$$t \leq 0 \quad \longrightarrow \quad u_r = u_z = 0 \quad , \quad T = T_i \quad , \quad p = p_i \quad (4.2)$$

Condiciones de frontera

$$\begin{aligned} \text{en } r = d/2 \quad : \quad u_r = u_z = 0 \quad , \quad \frac{\partial T}{\partial r} = 0 \\ \text{en } r = 0 \quad : \quad \frac{\partial u_z}{\partial r} = 0, \quad u_r = 0 \quad , \quad \frac{\partial T}{\partial r} = 0 \\ \text{en la superficie del pistón} \quad : \quad u_z = u_p \quad , \quad u_r = 0 \quad , \quad \frac{\partial T}{\partial z} = 0 \\ \text{en } z = 0 \quad : \quad u_r = u_z = 0 \quad , \quad \frac{\partial T}{\partial z} = 0 \end{aligned} \quad (4.3)$$

Condiciones de simetría

$$u_\theta = 0 \quad \longrightarrow \quad u_r = u_r(r, z) \quad , \quad u_z = u_z(r, z) \quad (4.4)$$

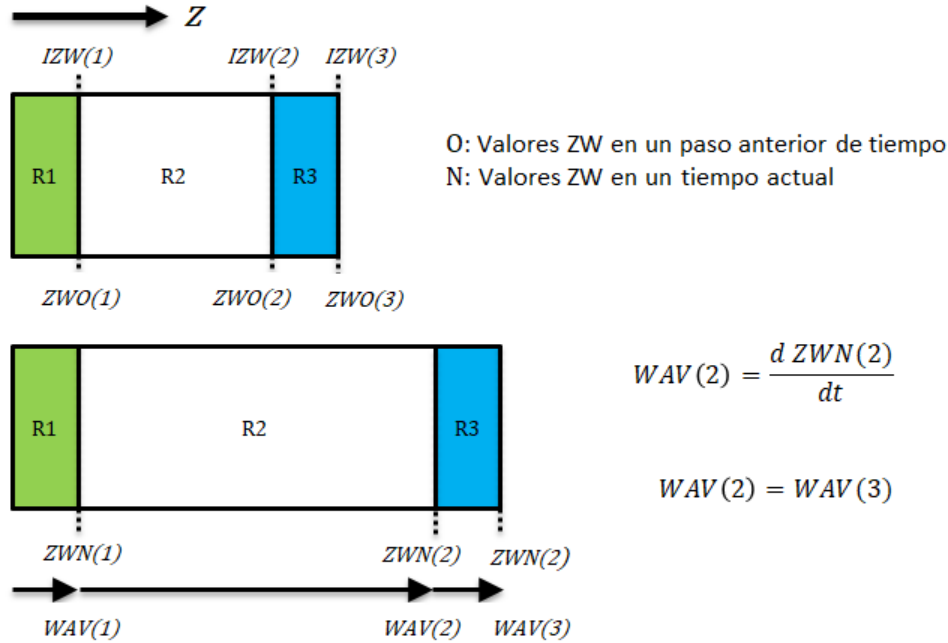
#### 4.1.1. Ajustes numéricos de la solución

La solución numérica del flujo se efectúa con *Phoenix*, implementando una malla dinámica para simular el movimiento del pistón dentro del cilindro. Se utiliza la subrutina *GXPIST* para generar dicha malla aplicando una velocidad en la dirección  $z$  (*W1AD=ZMOVE*) sobre un bloque de celdas. Esta subrutina divide la malla en tres regiones: estacionaria (R1), deformable (R2) y móvil (R3). La región móvil contiene al pistón y se mueve a velocidad constante o variable, la región deformable contiene al fluido de trabajo que se expande o contrae y la región estacionaria que no se deforma y tiene velocidad cero (**Fig. 4.2**).

La velocidad del pistón se controla con los parámetros *IZW1*, *AZW1*, *BZW1*, *CZW1* y *DZW1* que permiten tanto un movimiento cíclico en función de la geometría de un mecanismo pistón-bielacigüeñal, así como también una velocidad constante  $u_p$  al definir los parámetros de la siguiente forma: *IZW1*=línea de celdas a deformar, *AZW1*=*GRND1*, *BZW1*= $u_p$ , *CZW1*=0 y *DZW1*=0.

La malla tiene *NX* =1 celdas en la dirección angular, *NY* = 120 celdas en la dirección radial y *NZ*=121 celdas en la dirección axial. En la dirección axial se define *IZW1*=120 lo que indica que existe una región deformable de 120x120 celdas y una región móvil de 120x1 celdas. El tamaño del dominio es de *DX*=0.05 rad, *DY*=0.02 m, *DZ*=0.005 m cuando el pistón se encuentra en el *PMS* y *DZ*=0.045 m en el *PMI*.

La malla se debe refinar cerca de las fronteras para considerar los efectos de la pared, por



**Figura 4.2:** Regiones definidas en GXPIST antes y después de un paso de tiempo  $dt$  donde la región R2 se expande.  $WAV$  indica la velocidad con la que se mueven las celdas de las posiciones (1),(2) y (3). Se tiene que  $WAV(2)$  es igual a la velocidad del pistón  $u_p$ .

medio de una distribución potencial ( $FRC = (NP_i/NP)^a$ ) de los nodos de las celdas, con  $a = 1.4$ . Esta distribución es decreciente en  $r$  y simétrica en  $z$  logrando así que la malla sea más fina cerca de la culata, pistón y pared del cilindro. Se usa una función de pared del tipo Log-Law para fricción en pared lisa. Las velocidades de compresión y expansión son  $u_p = \pm 10$  m/s y el tiempo en que se recorre la distancia  $S = 0.04$  m es de  $t_{sim} = 4 \times 10^{-3}$  s.

El tamaño de paso de tiempo se estima usando un  $CFL \leq 0.1$ , con un tamaño de celda crítico de  $6 \times 10^{-6}$  m que ocurre cuando el pistón se encuentra en el  $PMS$  y sobre la superficie del pistón, a una velocidad de 10 m/s. Así, el paso de tiempo mínimo es  $dt = 6 \times 10^{-8}$  s, por lo que el número mínimo de pasos requeridos es de  $6.7 \times 10^4$ , se escoge un número de pasos de  $8 \times 10^4$ , con un  $dt = 5 \times 10^{-8}$  s y un  $CFL = 0.0833$ .

En la literatura, para el flujo inducido por un pistón plano, los modelos tanto laminar como el de turbulencia  $k - \epsilon$ , presentan una discrepancia entre sí del 0.02 % en los valores de presión [7]. Además, ya que una geometría cóncava genera un flujo turbulento por squish, entonces se opta por el modelo de turbulencia  $k - \epsilon$  estándar, tanto con un pistón plano como con uno cóncavo. Así, de este modo poder comparar y validar los resultados obtenidos con el pistón cóncavo.

El número de barridos máximo en todo el dominio se estableció en 300 y 100 iteraciones para resolver la presión y temperatura en las ecuaciones lineales. Relajación lineal  $LINRLX=1$  para la presión y relajaciones del tipo falso paso de tiempo de  $FALSDT=1E-03$  para las velocidades y  $FALSDT=1E-05$  para la temperatura.

### 4.1.2. Resultados y validación

La solución requirió de un tiempo aproximado de 22 horas (1324 minutos) en el Clúster del Instituto de Ingeniería, Tonatiuh, de la UNAM. Los datos generados por la simulación se recopilaron y exportaron para visualizarse en *Tecplot*<sup>™</sup> y las curvas se graficaron usando *SciDavis*<sup>™</sup>.

En la **figura 4.3** se muestra la malla deformada por compresión en tres diferentes momentos, donde se puede apreciar que la región estacionaria se encuentra sobre la frontera  $z=0$ , la región deformable termina en el bloque de celdas  $NZ=120$  y la región móvil que contiene al pistón se aprecia como un bloque de celdas con el mismo espesor de  $1 \times 10^{-3}$  m, durante todo el proceso de compresión. Sin embargo, todas las celdas de la región móvil están bloqueadas por el pistón el cual tiene características de un sólido de pared lisa.

El campo de velocidades resultante se presenta en la **figura 4.4**, en los mismos tiempos de la **figura 4.3**. Se observa el efecto de pared sobre la superficie del cilindro ( $r = 2 \times 10^{-2}$  m), mostrando una región de mayor velocidad axial (W1) sobre el pistón y cerca del cilindro, con un máximo de  $-10$  m/s. La región de menor velocidad se registra cerca de la culata con valores que van desde  $0$  m/s a  $-1$  m/s.

Las curvas de presión y temperatura promedio ( $p_{prom}$ ,  $T_{promedio}$ , respectivamente) para el proceso de compresión se presentan en la gráfica de la **figura 4.5**, donde la presión final es de  $2.9085 \times 10^6$  Pa y la temperatura final de  $783.037$  K, en la expansión se tienen valores finales de  $101\,336.4$  Pa y  $300.11$  K. En la **figura 4.6** se grafica la relación de valores promedio alcanzados por la solución numérica ( $p_{prom}$ ) y los valores reversibles ( $p_{rev}$ ) tanto para la compresión como para la expansión. En ambos procesos se observa que la presión promedio se encuentra siempre por encima de la presión reversible, siendo las relaciones para la compresión de  $1.00024$  y para la expansión de  $1.00036$ , ambos valores al final del proceso respectivo.

Calculando el exponente politrópico con la **ecuación 2.20** y con los valores finales de presión y volumen específico se obtiene  $n_{comp} = 1.4001$  y  $n_{exp} = 1.3998$ , para compresión y expansión respectivamente. Utilizando también la **ecuación 2.22** con una velocidad de pistón de  $\pm 10$  m/s y una temperatura media de  $541.452$  K sobre el proceso reversible, se tiene  $n_{comp} = 1.412$  y  $n_{exp} = 1.388$ . Calculando los porcentajes de error respecto a lo obtenido por la **ecuación 2.22** se obtiene  $\%e_{comp} = 0.85$  y  $\%e_{exp} = -0.843$ , para compresión y expansión respectivamente.

Como objetivo se estableció calcular el incremento en la energía interna durante un proceso irreversible donde existe disipación viscosa, por lo tanto utilizando la **ecuación 4.5** y multiplicando por  $100$  se obtiene el porcentaje de incremento en la energía interna respecto al trabajo de compresión o expansión.

En la **figura 4.7** la curva  $\Delta e/(-W)$  está en función de la posición  $z$  del pistón y las temperaturas registradas en ese punto del proceso, mostrando que al final de la carrera de compresión el  $0.0388\%$  del trabajo se convirtió en energía interna, la curva es creciente conforme el volumen dentro del cilindro decrece.

Sin embargo, en el proceso de expansión la curva  $\Delta e/W$  inicia con un valor máximo de

0.0369 % y finaliza con un 0.0224 %. Los incrementos  $\Delta T/\Delta v$  son mayores cerca del PMS que del PMI, por lo tanto los  $\Delta e$  son mayores cerca del PMS, ya que  $\Delta e \propto \Delta T$ .

*Compresión*

$$\frac{\Delta e}{-w} = \frac{T_{prom} - T_{rev}}{T_{prom} - T_i} \quad (4.5)$$

*Expansión*

$$\frac{\Delta e}{w} = \frac{T_{prom} - T_{rev}}{T_i - T_{prom}} \quad (4.6)$$

Con lo anterior se puede concluir que el modelo funciona con suficiente sensibilidad para simular el comportamiento del aire durante un proceso irreversible en el cual existe disipación viscosa, ya que siempre las presiones y temperaturas se encuentran por encima de los valores descritos por el modelo de gas ideal.

Esto se valida con los resultados obtenidos en el trabajo de Yusof et al. [7] donde los porcentajes en los incrementos de energía interna son :  $\Delta e/(-W) = 0.039\%$  y  $\Delta e/W = 0.021\%$ . Por lo tanto, los errores de los incrementos en la energía obtenidos en la simulación respecto a los resultados del artículo, son de  $-0.5\%$  en compresión y  $4.7\%$  en expansión. Comparando los exponentes politrópicos obtenidos en la simulación con los valores calculados por la **ecuación 2.22**, se llega a errores menores del 1 %.

## 4.2. Compresión y expansión con pistón cóncavo

---

Ahora se plantea un sistema similar al descrito en la sección anterior; sin embargo, con modificaciones en la geometría del pistón y en la velocidad del pistón. El pistón ahora tiene una geometría semielíptica que además de un flujo axial induce un flujo radial desde la corona (distancia mínima entre la cabeza del pistón y la culata) hacia la cavidad.

Se proponen tres velocidades para compresión y expansión:  $\pm 1$  m/s,  $\pm 5$  m/s y  $\pm 10$  m/s. Simular los procesos a distintas velocidades permite comparar los flujos generados y los incrementos de energía interna en el sistema, ya que como se ha mencionado, esto se relaciona con las velocidades inducidas por el movimiento del pistón.

La geometría cóncava con forma de elipse se selecciona así, debido a que los pistones con cabeza rebajada pueden tener una forma hemiesférica o semielíptica. Además, este perfil permite simetría respecto al eje axial del pistón y tiene una corona plana (o anillo de squish); además, el efecto en el borde del pistón es similar al generado por el borde del pistón plano. Adicionalmente, se busca que la distancia entre la corona y la culata no sea demasiado pequeña, ya que se generaría un tamaño de celda aún menor que requeriría un paso de tiempo más pequeño y por lo tanto más tiempo de cómputo. En la **figura 4.8** se muestra el semiperfil del pistón utilizado con sus dimensiones y sobre el plano  $r - z$ . El semieje mayor es de  $1 \times 10^{-2}$  m orientado en  $r$  y el semieje menor de  $5 \times 10^{-3}$  m orientado en  $z$ . Se aplica un radio para el redondeo de  $2 \times 10^{-3}$  m, entre la



corona del pistón, la cual tiene un espesor de  $10^{-3}$  m, y la cavidad elíptica con una profundidad de  $5 \times 10^{-3}$  m.

La nueva geometría del pistón requiere cambiar las distancias  $L_1$  y  $L_2$ , las cuales determinan el tamaño mínimo y máximo del dominio, datos importantes para deformar la malla. Utilizando la relación de compresión y la carrera del pistón de la sección anterior,  $r_c = 11$  y  $S = 4 \times 10^{-2}$  m, entonces  $L_1 = 4.7843 \times 10^{-2}$  m y  $L_2 = 7.843 \times 10^{-3}$  m. En la **figura 4.9** se representan las dimensiones generales del dominio sobre  $r-z$  cuando el pistón pasa desde  $L_1$  hasta  $L_2$  y viceversa, con una velocidad  $u_p$ . Las condiciones iniciales y de frontera, así como las propiedades del aire son las mismas a las presentadas en las páginas 38 y 39.

### 4.3. Ajustes numéricos de la solución

Según las **figuras 4.8** y **4.9**, el tamaño del dominio computacional en la dirección angular es  $DX=0.05$  rad, dirección radial  $DY=0.02$  m y dirección axial  $DZ=4.78432 \times 10^{-2}$  m para la compresión y  $DZ=4.7832 \times 10^{-2}$  m para la expansión. La geometría elíptica del pistón requiere un refinamiento de la malla por lo que se divide el dominio en varias regiones y cada región con un determinado número de celdas.

En la **figura 4.9b** se muestran las regiones  $A, B$  y  $C$  en la dirección  $z$  y las regiones  $D, E$  y  $F$  en la dirección  $r$ , cada región tiene asignada una dimensión y número de celdas. La región  $A$  tiene un tamaño de celda menor cerca de la corona del pistón y de la culata, para lograr esto se utiliza una distribución potencial simétrica con un exponente  $a = 1.9$ .

En cambio, la región  $D$  tiene un tamaño de celda menor cerca de la pared del cilindro usando una distribución asimétrica con  $a = 1.2$ . Las demás regiones tienen una distribución homogénea del tamaño de celda con  $a = 1$  y la dirección angular tiene  $NX=1$  celda.

El número de pasos de tiempo y el tamaño  $dt$  se estima con la distancia mínima de la celda, con la velocidad del pistón y un  $CFL = 0.1$ . El tamaño mínimo de la celda ocurre cuando el pistón se encuentra en el  $PMS$  y es de  $8 \times 10^{-7}$  m. En el  $PMI$  el tamaño mínimo de la celda es de  $1 \times 10^{-5}$  m. Se aplica una distribución potencial con un exponente  $a = 1.151$  para ajustar el tamaño de paso de tiempo como sigue:

- $\pm 1$  m/s donde  $9 \times 10^{-8} \text{ s} < dt < 5.6 \times 10^{-7} \text{ s}$  con 40 000 pasos.
- $\pm 5$  m/s donde  $1.8 \times 10^{-8} \text{ s} < dt < 1.12 \times 10^{-7} \text{ s}$  con 80 000 pasos.
- $\pm 10$  m/s donde  $9 \times 10^{-9} \text{ s} < dt < 5.6 \times 10^{-7} \text{ s}$  con 80 000 pasos.

Para aplicar la malla dinámica por medio de la subrutina **GXPIST** se definen los parámetros para la región deformable  $IZW1=80$  (región  $A$ ) y las velocidades del pistón  $BZW1=\pm 1$  m/s,  $\pm 5$  m/s y  $\pm 10$  m/s. En la **figura 4.10** se muestra la malla completa antes de deformar y cuando ha recorrido una distancia de  $S = 0.02$  m, además se incluye la malla sin las celdas bloqueadas por el pistón.

Para resolver las ecuaciones lineales generadas el número de iteraciones para las presiones y temperaturas es de 100 y para las velocidades es de 50. El número de barridos iterativos sobre todo el dominio en cada paso de tiempo es de 1000 y con relajaciones del tipo lineal para la presión con un valor de 1, para las velocidades y temperatura del tipo falso paso de tiempo, con valores de  $1 \times 10^{-3}$  para las velocidades y de  $1 \times 10^{-5}$  para las temperaturas.

#### 4.4. Resultados

---

Las soluciones numéricas de los procesos con velocidades de  $\pm 5$  m/s y  $\pm 10$  m/s requirieron un tiempo aproximado de 75 h (4525 min) y de casi 35 h (2123 min) para la velocidad de  $\pm 1$  m/s. Se presentan los campos de presión y velocidad para los dos procesos a una velocidad de  $\pm 10$  m/s, en distintos momentos determinados por las posiciones que el pistón toma durante su carrera,  $S = 4 \times 10^{-4}$  m,  $2 \times 10^{-2}$  m y  $4 \times 10^{-2}$  m.

En la **figura 4.11** se presentan los campos de presión y velocidad durante la compresión cuando el pistón apenas empieza a moverse,  $S = 4 \times 10^{-4}$  m, donde se observa el campo de presión con un valor mayor dentro de la cavidad y menor en la culata. Existe una región en el fluido que se mueve con la velocidad del pistón y otra cercana en la culata donde el fluido se encuentra en reposo. Se observan las velocidades desarrolladas tanto en dirección radial (V1) como axial (W1), en la dirección radial se alcanzan velocidades cercanas a  $-1$  m/s.

De igual forma en la **figura 4.12** se muestran las velocidades y presiones, pero cuando el pistón ya ha recorrido una distancia  $S = 2 \times 10^{-2}$  m se observa que la presión ahora es mayor en la culata, las velocidades radial y axial cambian la forma de sus perfiles. La velocidad radial se apega a la curvatura de la cavidad y alcanza una velocidad de  $-3.5$  m/s, la velocidad axial ocurre principalmente sobre las superficies perpendiculares al movimiento del pistón y es por eso que las mayores velocidades en esta dirección se dan sobre la corona y en el fondo de la cavidad, esto ocurre en todo el recorrido del pistón y también durante la expansión.

Cuando el pistón llega al final de su carrera, como se muestra en la **figura 4.13**, ocurre el flujo *squish* debido a la reducción importante del volumen entre la corona y la culata lo que provoca que el flujo vaya hacia la cavidad. Como se puede observar se registra una mayor presión en la reducción y una menor en el centro de la cavidad, esto provoca un flujo radial importante justo sobre el redondeo de la corona registrando una velocidad de hasta  $-13$  m/s.

De igual manera, para la expansión se presentan los campos de presiones y velocidades en  $S = 4 \times 10^{-4}$  m,  $2 \times 10^{-2}$  m y  $4 \times 10^{-2}$  m. En la **figura 4.14** se observa un campo similar al de la **figura 4.13**, registrando una mayor presión en la reducción y un flujo radial de  $13$  m/s, en sentido opuesto a lo que ocurre al final de la carrera de compresión.

Cuando el pistón ha recorrido la mitad de la carrera (**Fig. 4.15**), se observa que la velocidad radial ya no se ajusta a la curva de la cavidad sino que el perfil se aleja una distancia de  $8 \times 10^{-3}$  m, registrando un máximo sobre la corona de  $2.4$  m/s. Al final de la carrera la velocidad radial tiene un perfil creciendo desde el pistón hasta casi  $9 \times 10^{-3}$  m y con una velocidad cercana

$u_p$ (m/s)	-1	-5	-10	1	5	10
$p_f$ (Pa)	2909159.17	2910554.67	2911950.85	101397.85	101445.85	101494.5
$T_f$ (K)	783.225	783.600	783.977	300.288	300.432	300.576
$p_f/p_{f,rev}$	1.00048	1.00096	1.00144	1.00096	1.00140	1.00190
$\Delta p_f$ (Pa)	1394.84	2790.34	4186.52	97.21	145.85	194.51
$n_{vel}$	1.4012	1.4060	1.4120	1.3988	1.3940	1.3880
$n_{sim}$	1.4002	1.4004	1.4006	1.3996	1.3994	1.3992
$e_n$ (%)	0.071	0.400	0.814	-0.057	-0.386	-0.800
$\Delta e/(\pm W)$ (%)	0.0778	0.1550	0.2329	0.0597	0.0895	0.1194

Tabla 4.1: Valores finales a distintas velocidades de compresión o expansión con el pistón cóncavo.

a 3m/s sobre la corona del pistón, como lo muestra la **figura 4.16**. La **figura 4.16a**, que representa el campo de presiones, tiene una diferencia entre los valores máximos y mínimos registrados de 59 Pa. Esto implica que la presión dentro del sistema es casi homogénea y que la resolución del mallado produce un pixelado en los contornos del campo de presiones.

Se grafican las curvas  $p_{prom}/p_{rev}$  para cada una de las velocidades de pistón. En la **figura 4.17** se muestran estas curvas tanto para compresión como para expansión. Se puede observar que la mayor velocidad de pistón registra la mayor relación  $p_{prom}/p_{rev}$ , mostrándose además, que conforme el pistón avanza en su carrera la relación de presiones aumenta del mismo modo que ocurre con el pistón plano.

En complemento a lo anterior, se grafica la diferencia de presiones, como se muestra en las gráficas de la **figura 4.18**. En ellas se nota que durante la compresión el  $\Delta p$  tiene un incremento notable pasando la mitad de la carrera llegando a valores del orden de  $10 \times 10^3$  Pa. Sin embargo, durante la expansión el incremento es notorio al iniciar la carrera y decrece conforme el pistón continúa su movimiento, se llegan a valores del orden de  $1 \times 10^2$  Pa. Además, a mayor velocidad el  $\Delta p$  es mayor porque existe una relación directa con  $p_{prom}/p_{rev}$ , ya que el residual sobre 1 es el  $\Delta p$  relativo al valor reversible. Los resultados anteriores se pueden comparar con los presentados en la gráfica de la **figura 1.3a**, en el capítulo 1, donde también se observa que a mayor velocidad las curvas  $p_{prom}/p_{rev}$  también registran valores superiores.

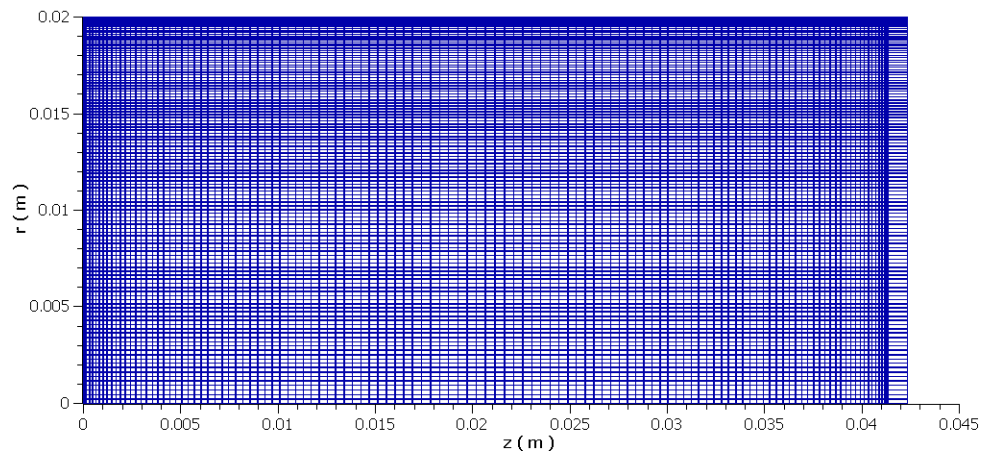
Ahora, se grafica la relación entre el incremento de energía interna y el trabajo realizado sobre el fluido(o por el fluido), las curvas que resultan se muestran en la **figura 4.19** y están en función de la posición  $z$  del pistón. Se observa que la forma de las curvas es similar tanto en compresión como en expansión, mostrando que el aumento de energía interna es mayor cuando el pistón se encuentra cercano al PMS.

Además, se puede observar en las gráficas antes mencionadas, que a mayor velocidad, mayor es la conversión de energía cinética en energía interna por disipación viscosa. Para analizar el

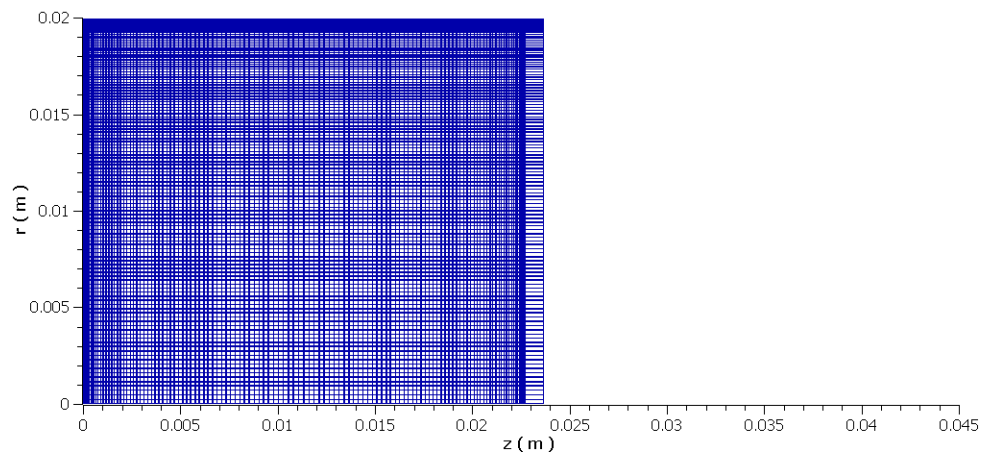
proceso en general se recurre a determinar los valores finales alcanzados en cada proceso, esto se enlista en la **tabla 4.1**, donde a cada velocidad corresponde un valor de  $p_f$ ,  $T_f$ ,  $p_f/p_{r,rev}$ ,  $\Delta p_f$ ,  $n_{vel}$ ,  $n_{sim}$ , %e (entre  $n_{vel}$ ,  $n_{sim}$ ) y  $\Delta e/(\pm W)$ .

De la sección de validación, con el pistón plano moviéndose a  $\pm 10$  m/s se obtuvo que  $\Delta e/(-W) = 0.0388\%$  y  $\Delta e/(W) = 0.0224\%$ , para compresión y expansión, respectivamente. Comparando estos resultados con los de la **tabla 4.1** a las mismas velocidades de  $\pm 10$  m/s, se observa que para la compresión el pistón cóncavo registra un incremento en la energía interna 6 veces superior al registrado por el pistón plano, y 5.33 veces mayor en la expansión. Esto indica, que un flujo bidimensional con generación de squish provoca un mayor incremento en la energía interna, porque la disipación viscosa es mayor; en comparación con un flujo principalmente axial, producido por un pistón plano. El flujo squish es favorable para la combustión cuando se busca un mayor mezclado del aire con el combustible y en consecuencia el rendimiento del motor aumenta.

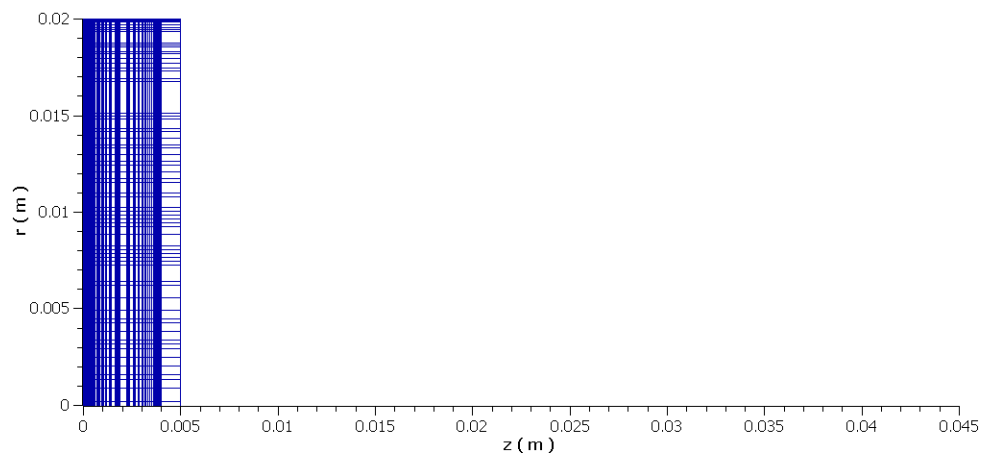
Los exponentes politrópicos  $n_{vel}$  y  $n_{sim}$  se calcularon de la misma forma que el pistón plano (**Ecs. 2.20** y **2.22**) y la cantidad  $\Delta e/(\pm W)$  con las **ecuaciones 4.5** y **4.6**.



(a)  $t = 2.5 \times 10^{-4}$  s y  $S = 2.5 \times 10^{-3}$  m.

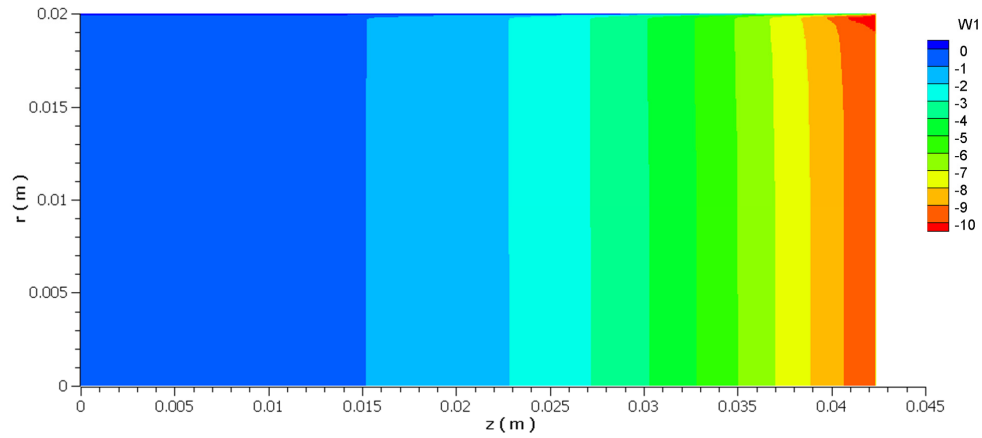


(b)  $t = 2 \times 10^{-3}$  s y  $S = 0.02$  m

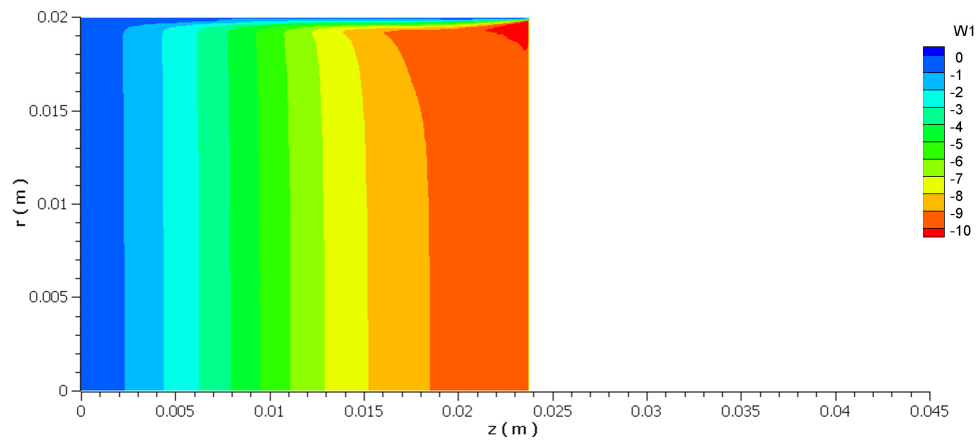


(c)  $t = 4 \times 10^{-3}$  s y  $S = 0.04$  m.

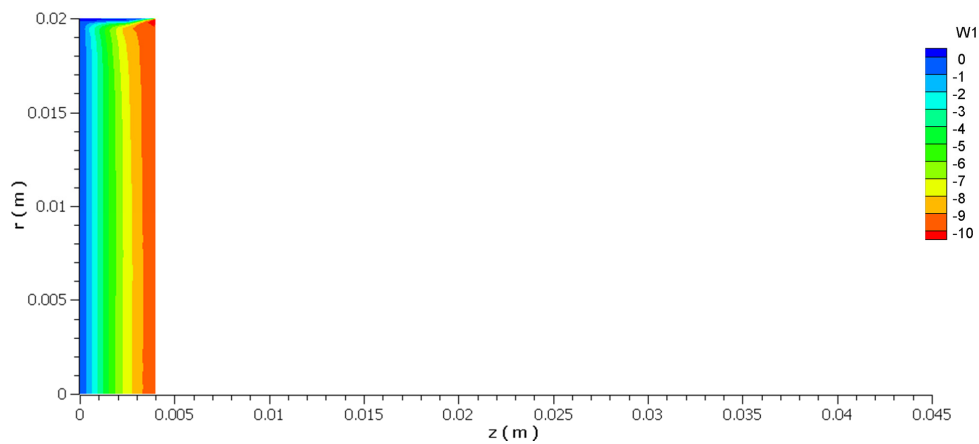
**Figura 4.3:** Malla deformada con pistón de geometría plana (compresión).



(a)  $t = 2.5 \times 10^{-4}$  s y  $S = 2.5 \times 10^{-3}$  m

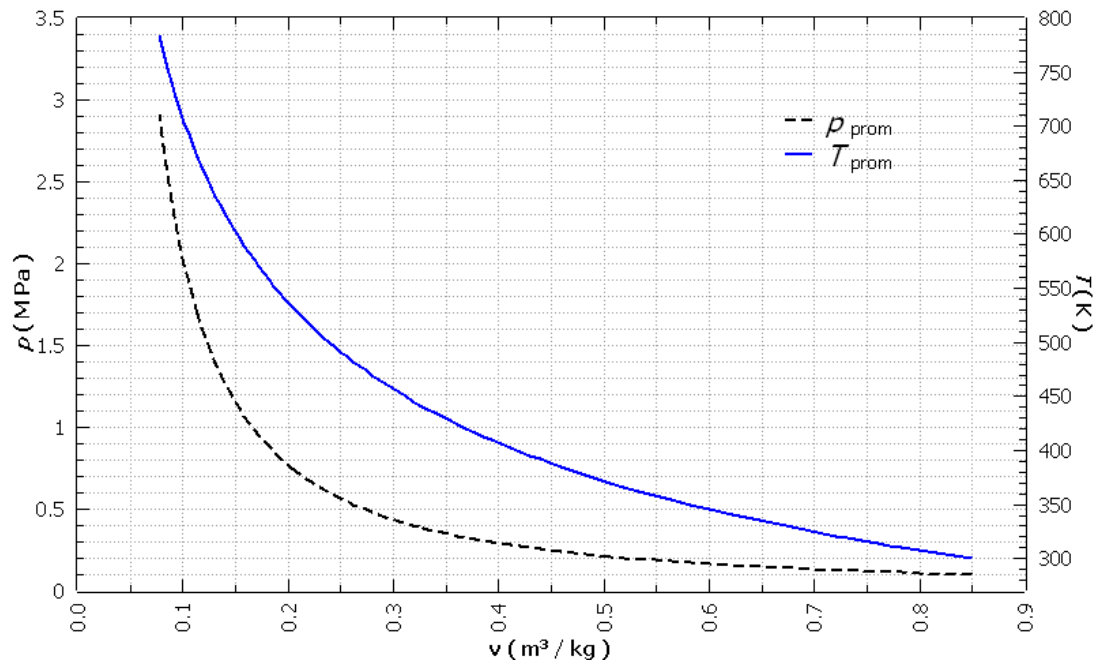


(b)  $t = 2 \times 10^{-3}$  s y  $S = 0.02$  m

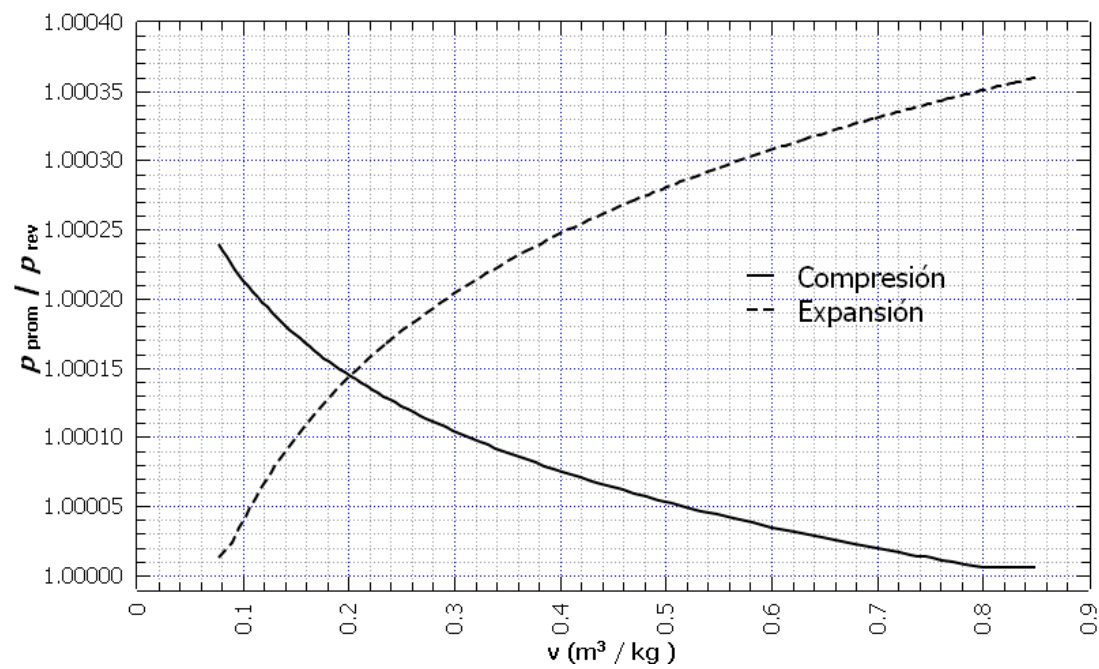


(c)  $t = 4 \times 10^{-3}$  s y  $S = 0.04$  m

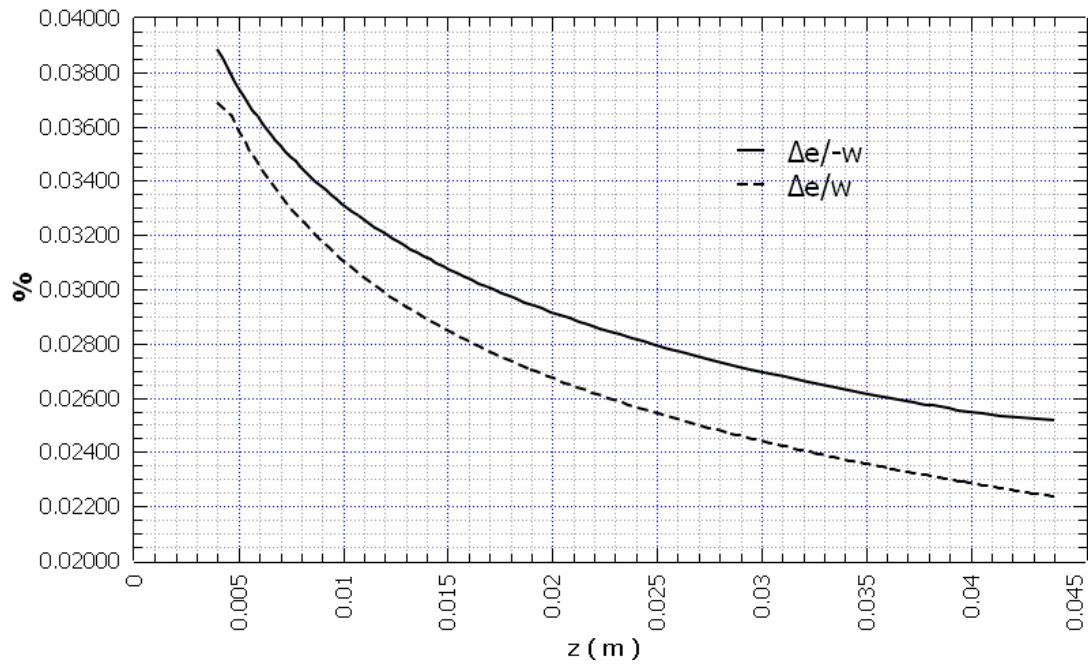
**Figura 4.4:** Campo de velocidades generado por un pistón de geometría plana durante el proceso de compresión.



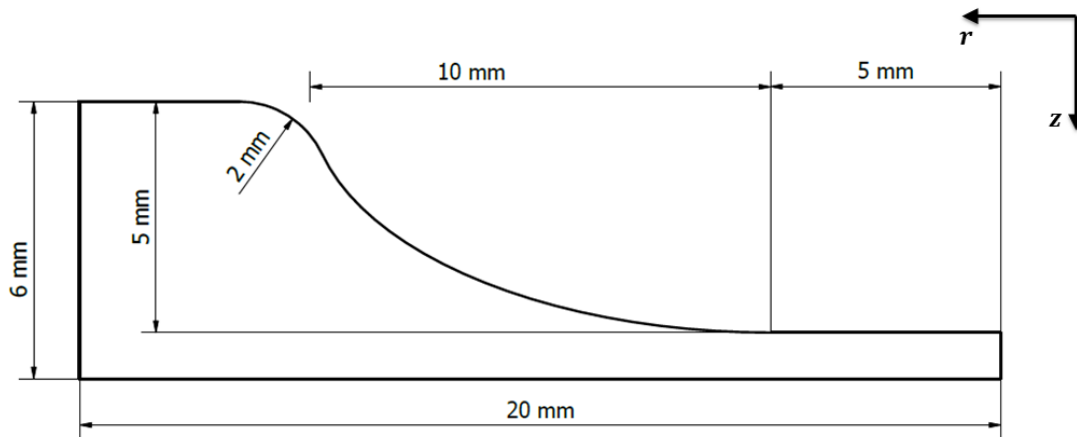
**Figura 4.5:** Curvas  $P_{prom} - v$  y  $T_{prom} - v$  durante el proceso de compresión con un pistón de cabeza plana.



**Figura 4.6:** Curva  $p_{prom}/p_{rev} - v$  para los procesos de compresión y expansión con un pistón de cabeza plana y  $u_p = -10$  m/s

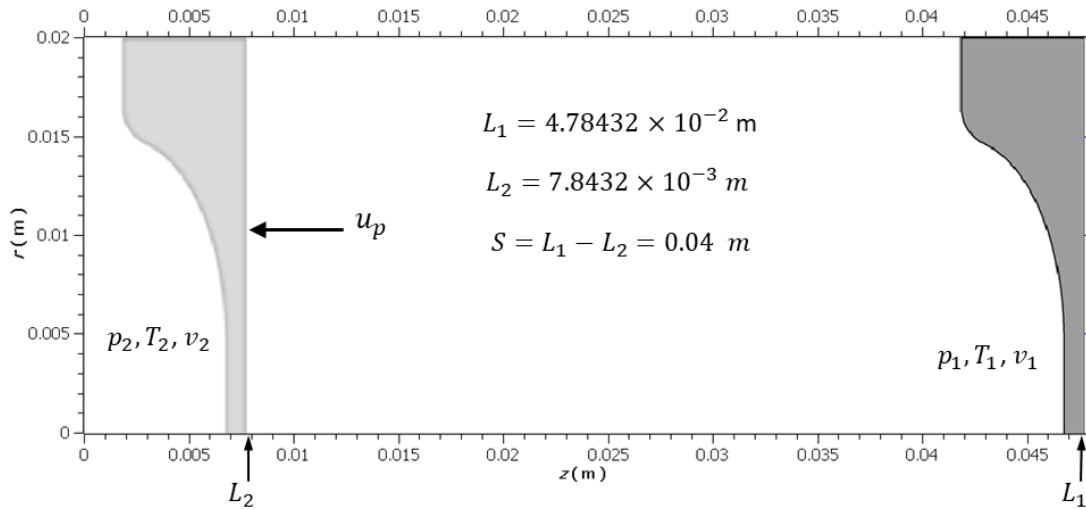


**Figura 4.7:** Porcentaje de incremento de la energía interna respecto al trabajo de compresión.

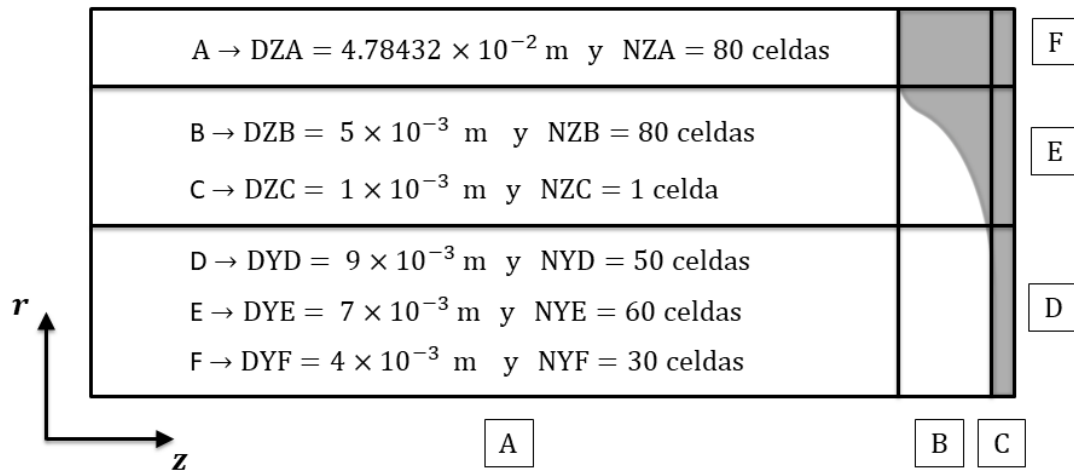


**Figura 4.8:** Dimensiones del pistón cóncavo



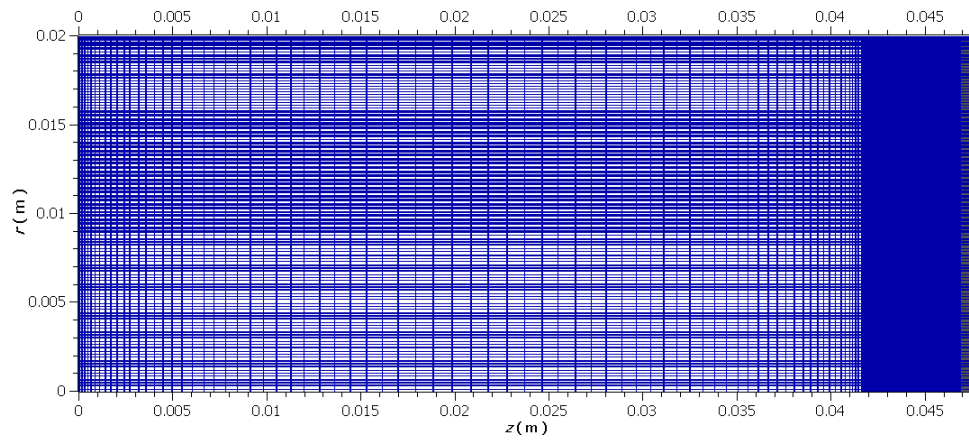


(a) Dimensiones del dominio computacional según  $L_1$  y  $L_2$

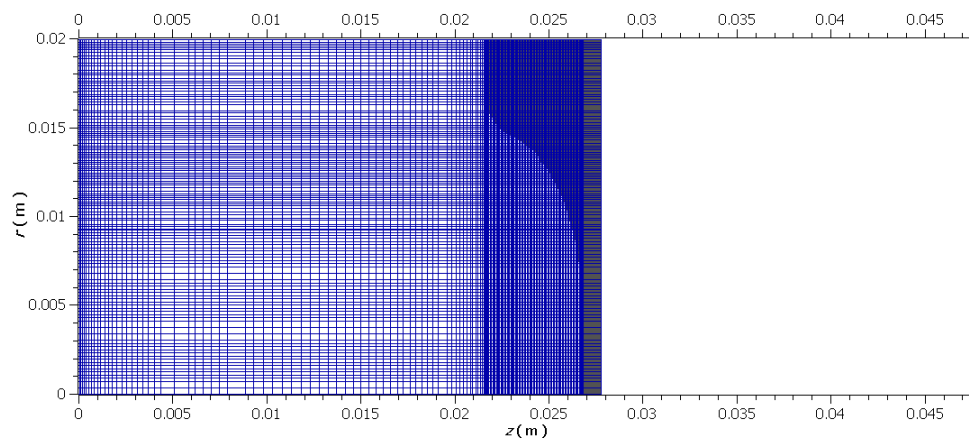


(b) Subdivisión del dominio computacional en las direcciones  $r$  y  $z$ .

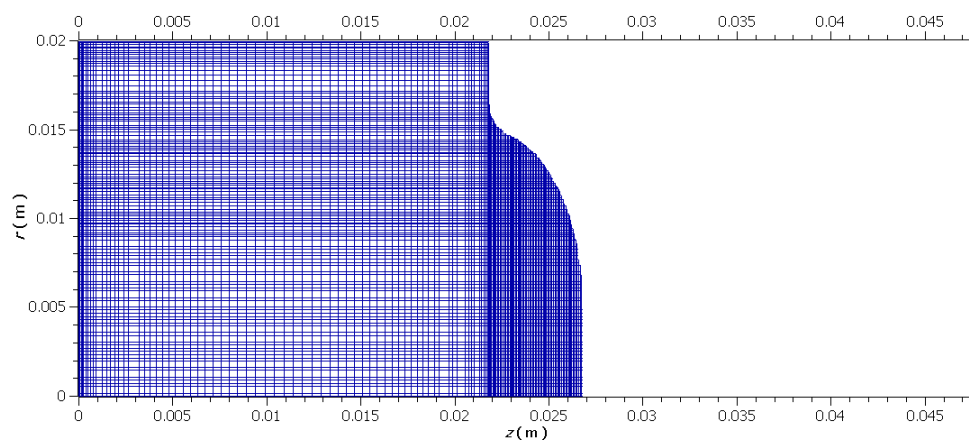
**Figura 4.9:** Diagrama del dominio y subdivisión para generar la malla computacional.



(a) Malla completa sin deformar,  $t = 0$  s y  $S = 0.0$  m.

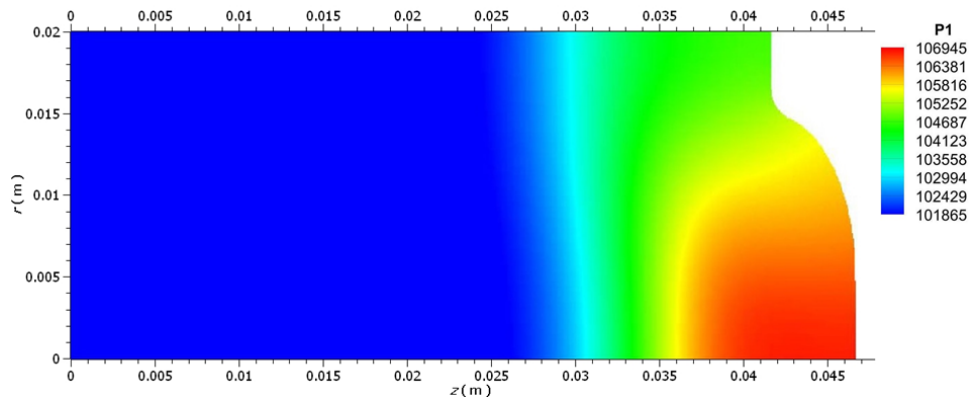


(b) Malla completa deformada,  $t = 2 \times 10^{-3}$  s y  $S = 0.02$  m

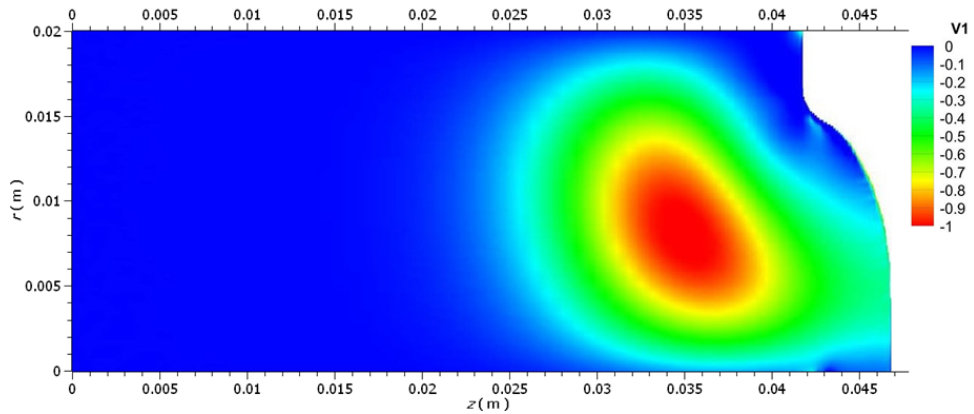


(c) Malla deformada en  $t = 4 \times 10^{-3}$  s y  $S = 0.04$  m sin las celdas bloqueadas por la geometría del pistón.

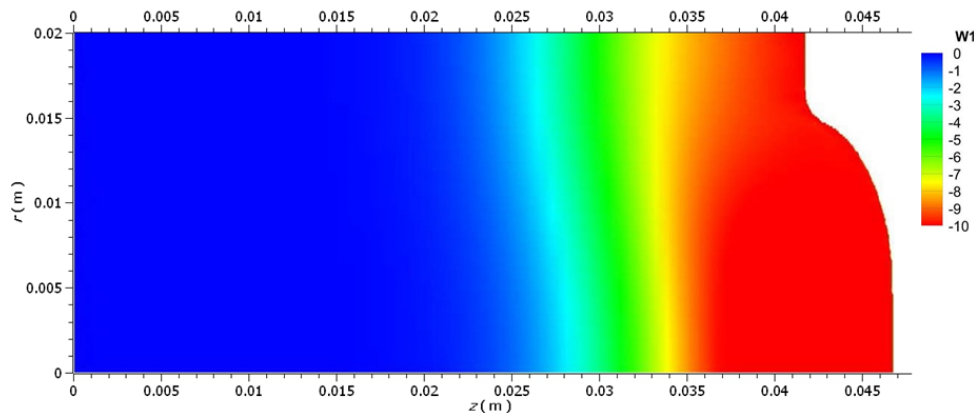
**Figura 4.10:** Malla dinámica utilizada en la simulación



(a) Campo de presiones.

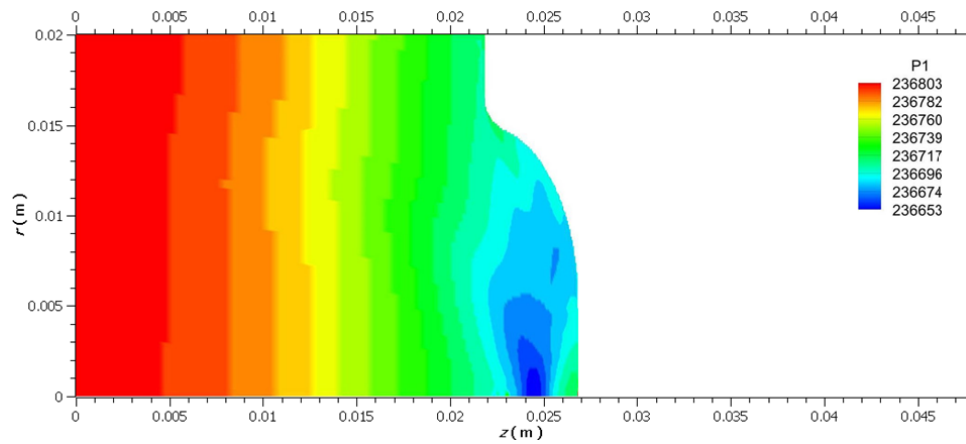


(b) Campo de velocidades en la dirección radial.

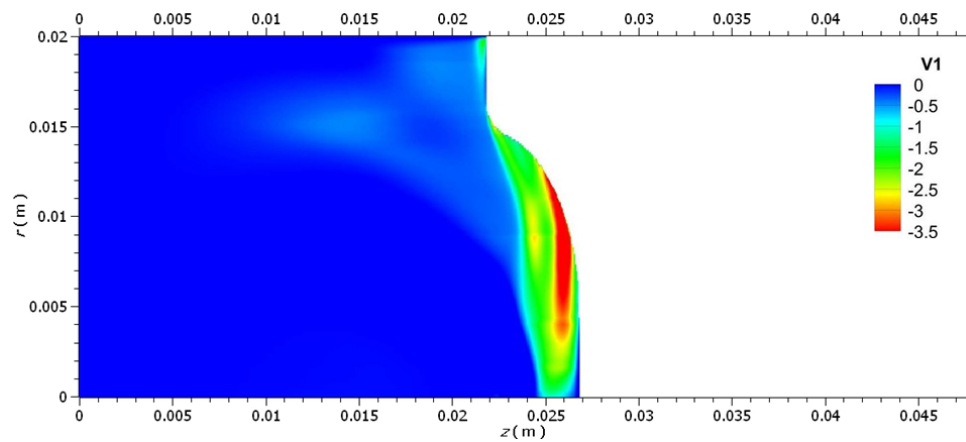


(c) Campo de velocidades en la dirección axial.

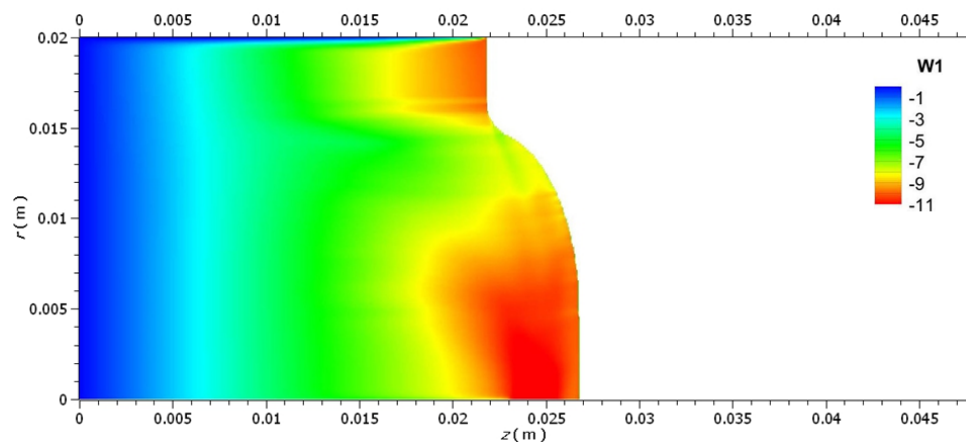
**Figura 4.11:** Campos de presión y velocidades cuando el pistón cóncavo ha recorrido una distancia de  $S = 4 \times 10^{-4}$  m con una velocidad de  $-10$  m/s.



(a) Campo de presiones.

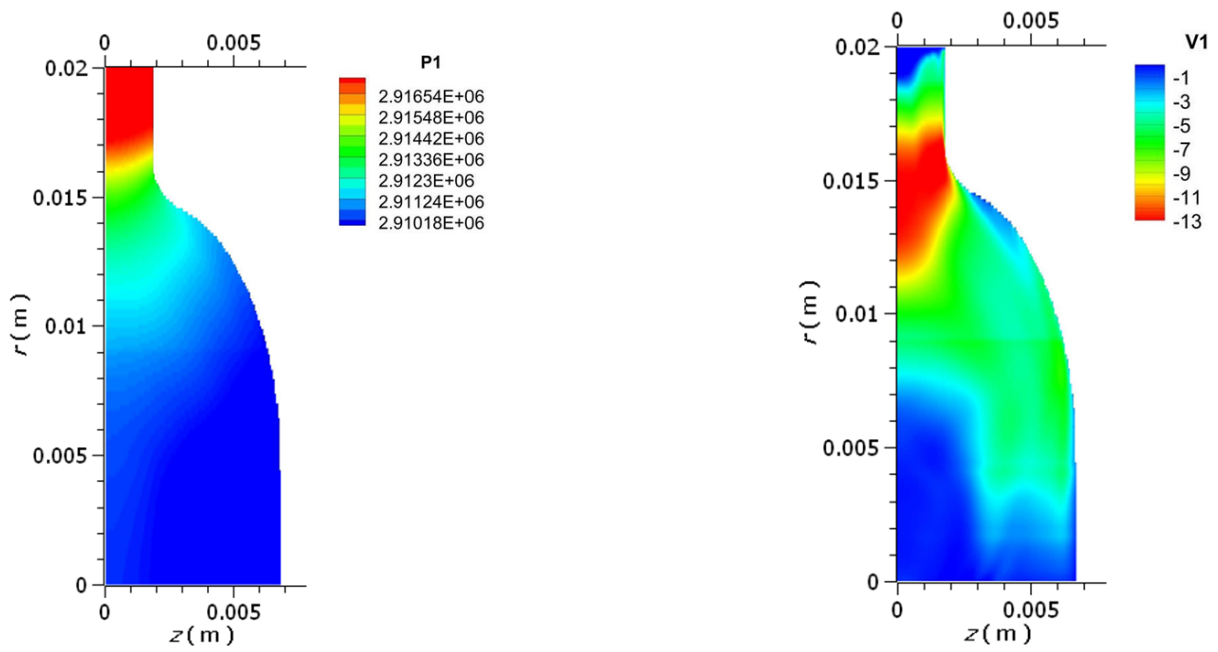


(b) Campo de velocidades en la dirección radial.



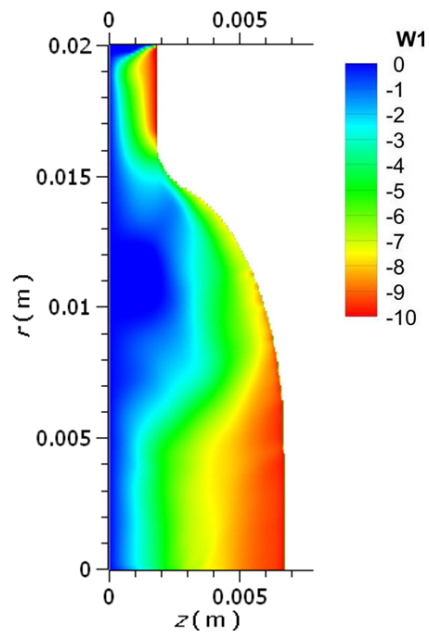
(c) Campo de velocidades en la dirección axial.

**Figura 4.12:** Campos de presión y velocidades cuando el pistón ha recorrido una distancia de  $S = 2 \times 10^{-2}$  m con una velocidad de  $-10$  m/s.



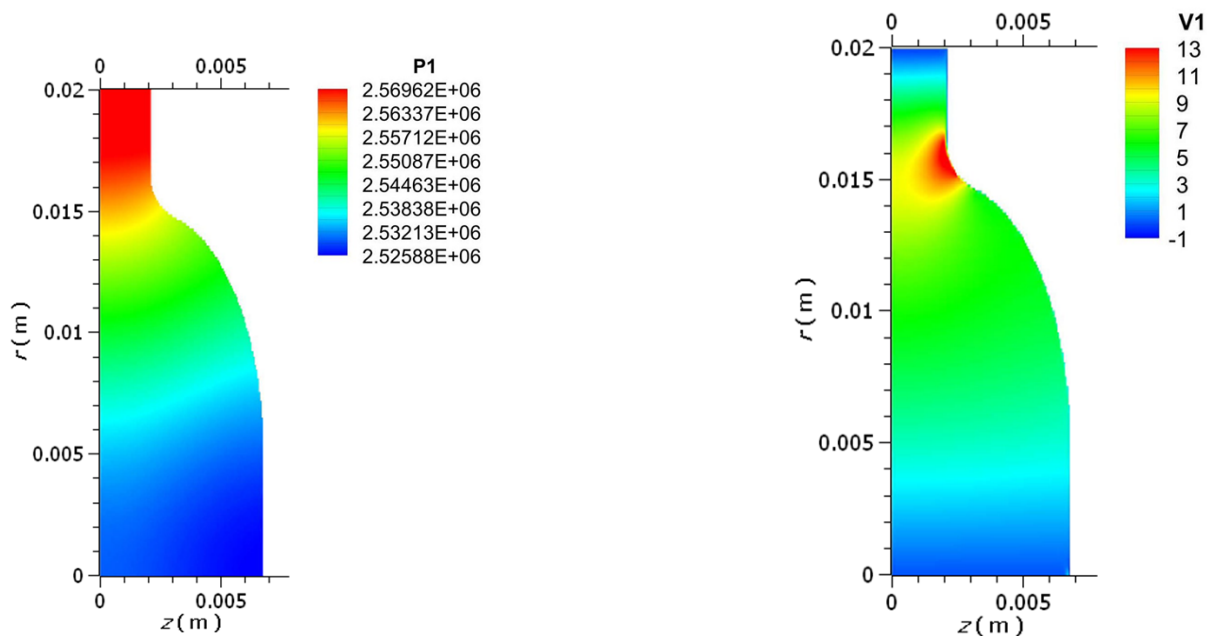
(a) Campo de presiones.

(b) Campo de velocidades en la dirección radial.



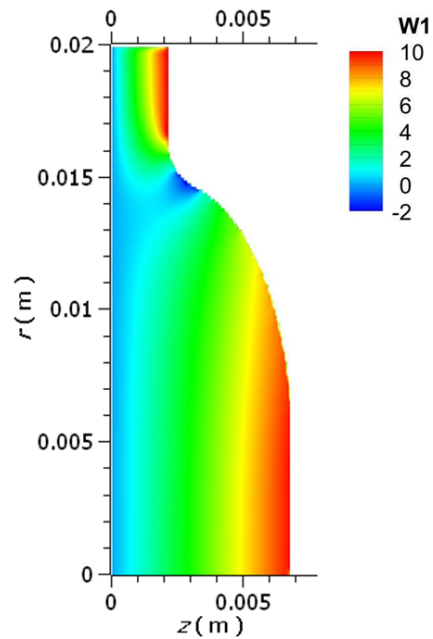
(c) Campo de velocidades en la dirección axial.

**Figura 4.13:** Campos de presión y velocidades cuando el pistón ha recorrido una distancia de  $S = 4 \times 10^{-2}$  m con una velocidad de  $-10$  m/s.



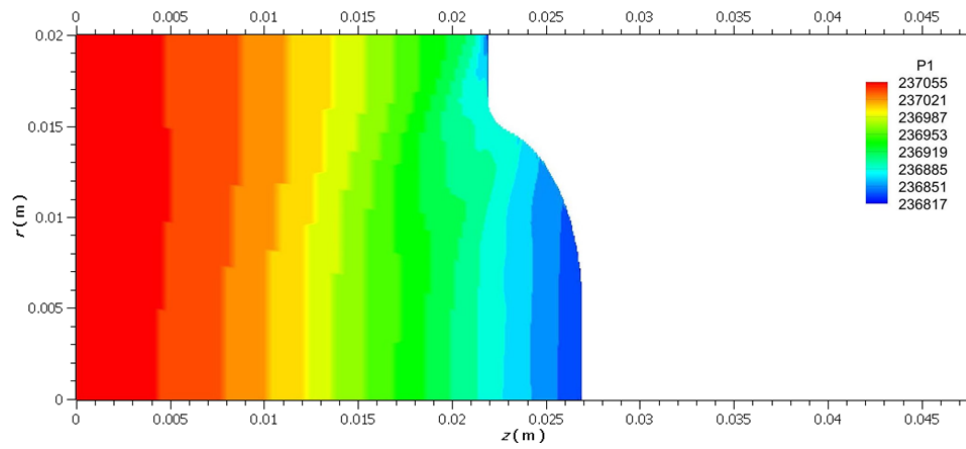
(a) Campo de presiones.

(b) Campo de velocidades en la dirección radial.

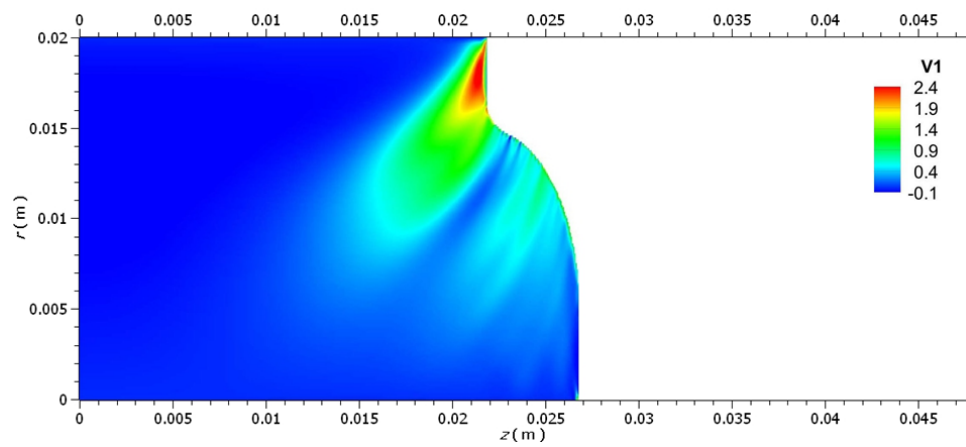


(c) Campo de velocidades en la dirección axial.

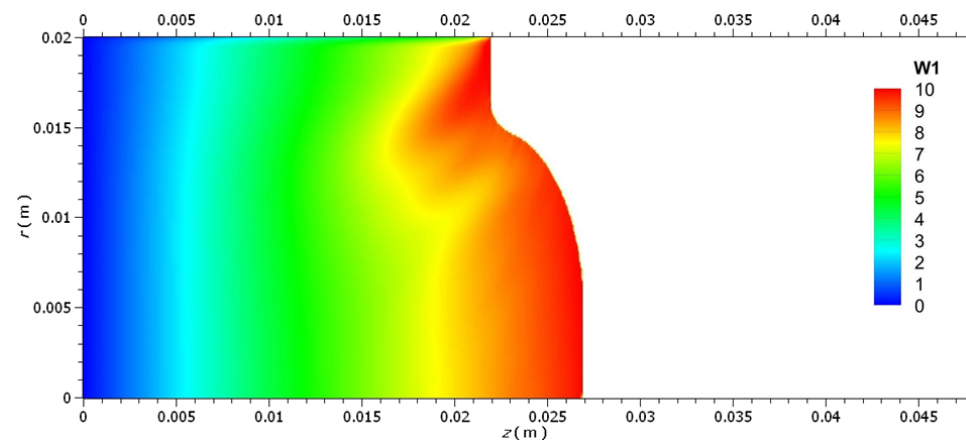
**Figura 4.14:** Campos de presión y velocidades cuando el pistón ha recorrido una distancia de  $S = 4 \times 10^{-4}$  m con una velocidad de 10 m/s.



(a) Campo de presiones.

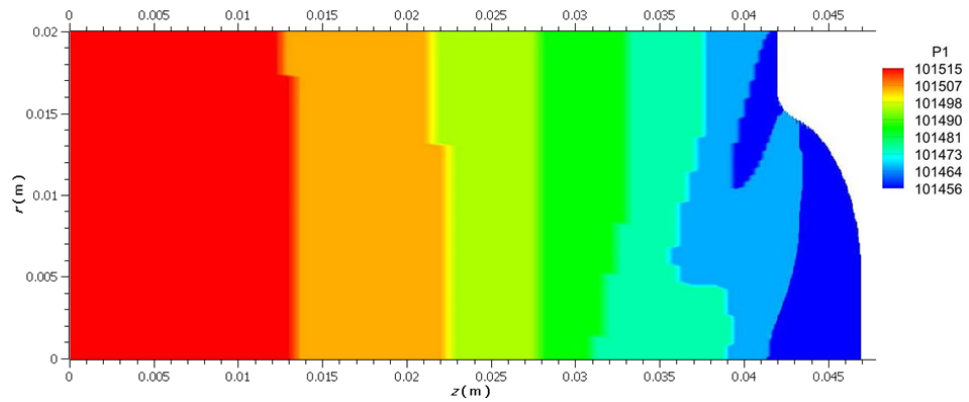


(b) Campo de velocidades en la dirección radial.

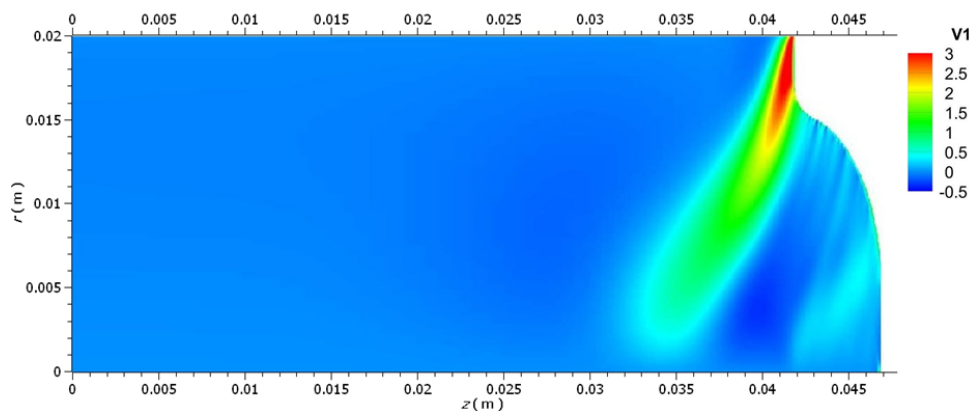


(c) Campo de velocidades en la dirección axial.

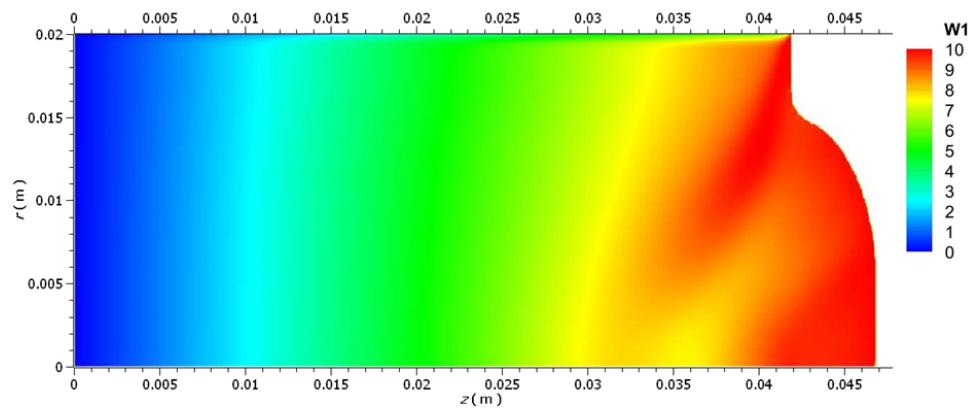
**Figura 4.15:** Campos de presión y velocidades cuando el pistón ha recorrido una distancia de  $S = 2 \times 10^{-2}$  m con una velocidad de 10 m/s.



(a) Campo de presiones



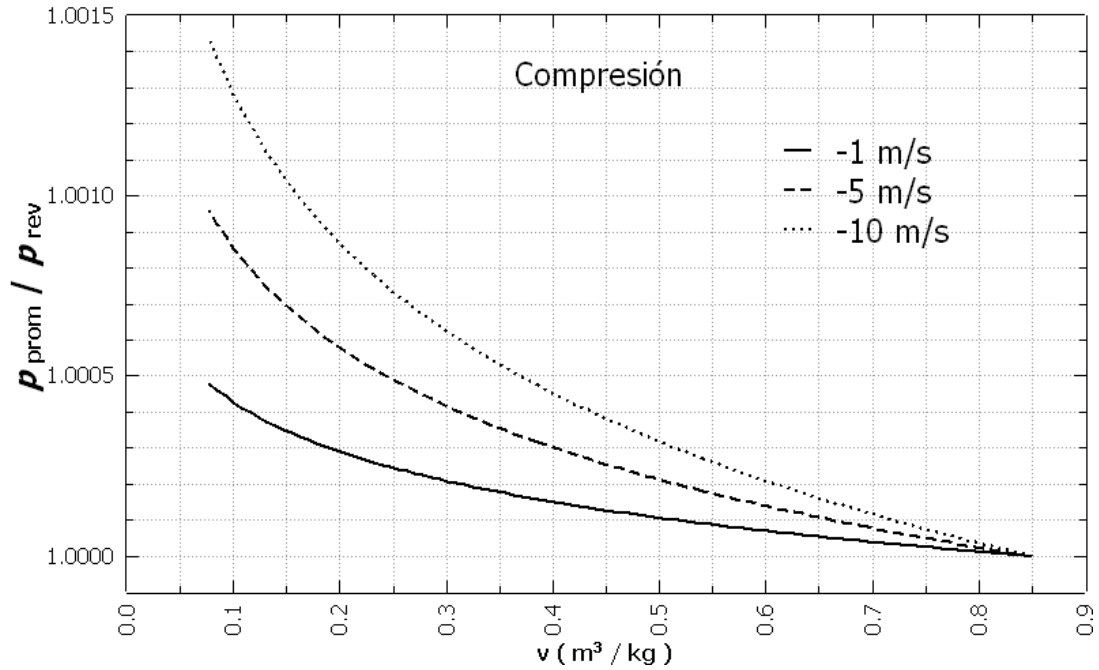
(b) Campo de velocidades en la dirección radial.



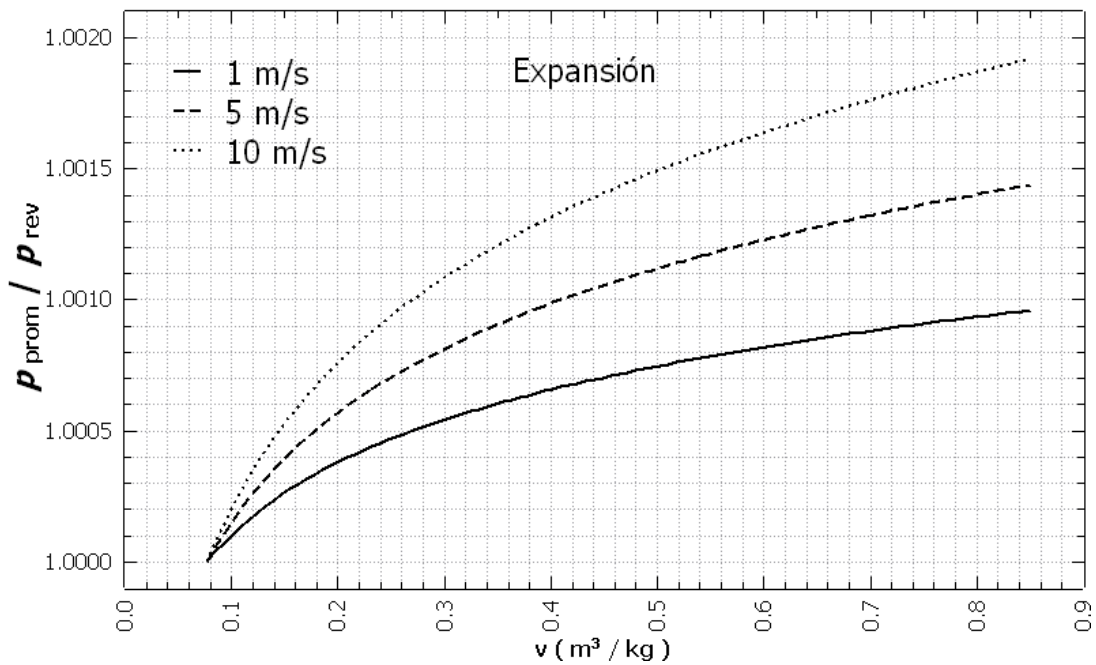
(c) Campo de velocidades en la dirección axial.

**Figura 4.16:** Campos de presión y velocidades cuando el pistón ha recorrido una distancia de  $S = 4 \times 10^{-2}$  m con una velocidad de 10 m/s.



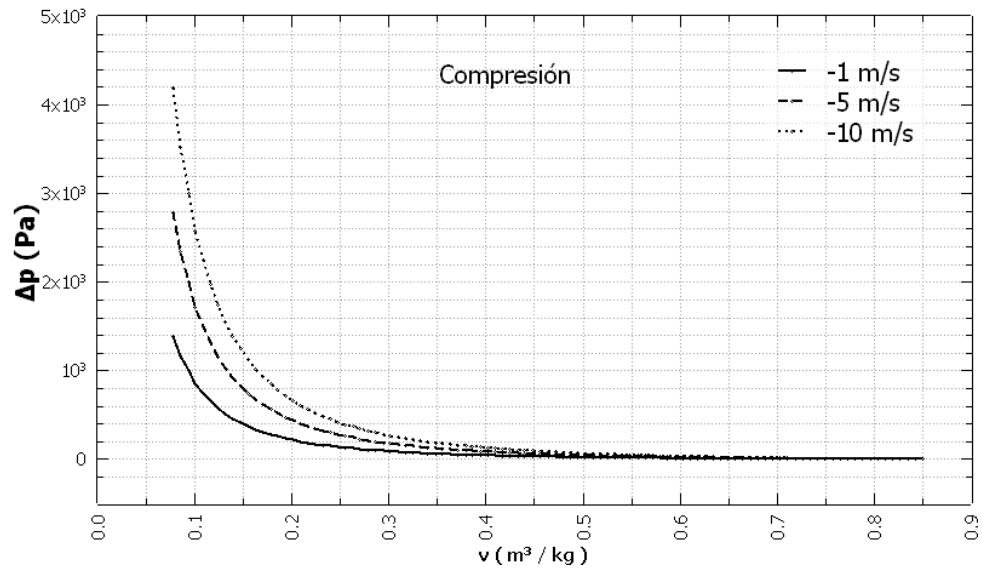


(a)

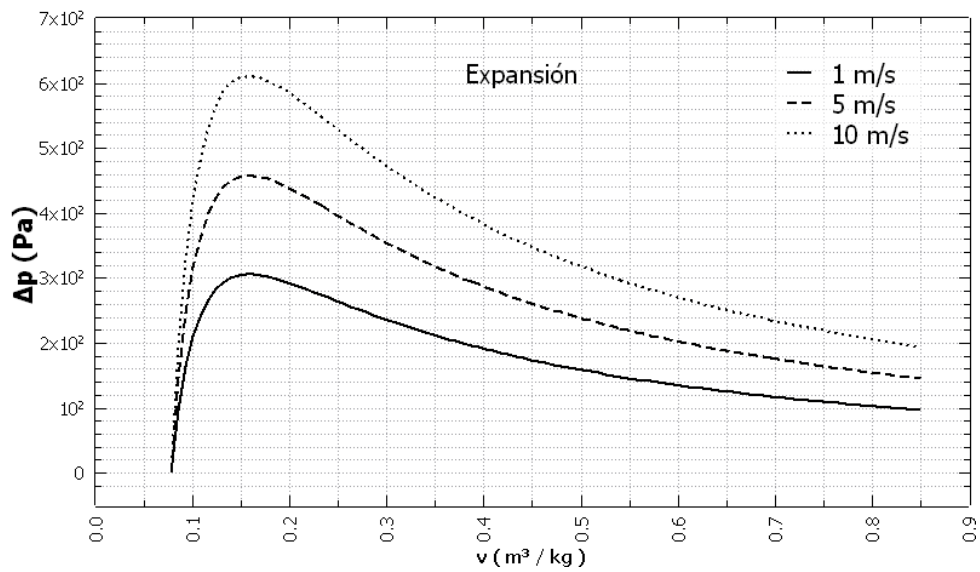


(b)

**Figura 4.17:** Relación de presiones,  $p_{\text{prom}}/p_{\text{rev}}$ , a distintas velocidades de pistón durante (a) compresión y (b) expansión.

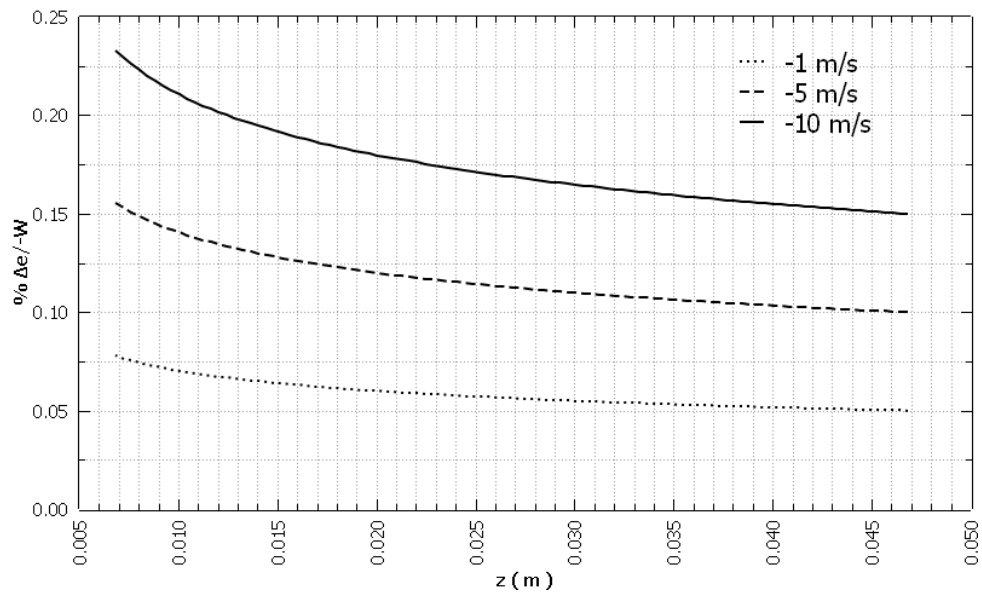


(a)

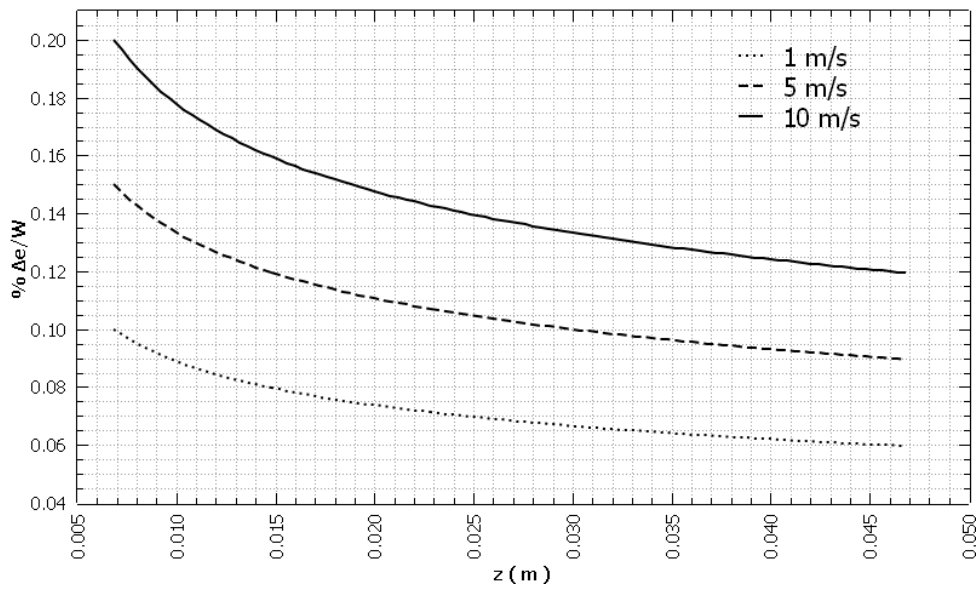


(b)

**Figura 4.18:** Diferencia de presión  $\Delta p$  entre la presión promedio de la simulación y la presión reversible a distintas velocidades durante (a) compresión y (b) expansión.



(a)



(b)

**Figura 4.19:** Incremento de la energía interna respecto al trabajo realizado a distintas velocidades de pistón durante (a) compresión y (b) expansión.



## Capítulo 5

# Conclusiones

Se simularon los procesos de compresión y expansión dentro de un sistema cilindro-pistón con paredes adiabáticas y a distintas velocidades; utilizando aire como fluido de trabajo y modelando su comportamiento como gas ideal. Los procesos ocurren de forma irreversible debido a la conversión de una parte de la energía cinética en energía térmica (incremento en energía interna), esto por efecto de la disipación viscosa.

Se utilizó el software *Phoenix*<sup>TM</sup>, implementando librerías propias del software para generar una malla dinámica que permita simular el movimiento del pistón, compresión y expansión del gas. En el artículo de Yusof [7] se simula un flujo laminar, debido a que tanto un modelo laminar como uno turbulento presentan una discrepancia entre sí del 0.02 %, para valores de presión. Sin embargo, se utiliza el modelo de turbulencia  $k - \epsilon$  estándar en la validación; así como en la simulación del flujo con el pistón cóncavo.

Las condiciones iniciales y de frontera son las utilizadas en [7]; seleccionando una porción del dominio tridimensional, del tipo cuña para una solución bidimensional, reduciendo el tiempo de cómputo. Las fronteras no permiten el flujo de calor y las propiedades termofísicas del aire son constantes.

Se efectúan la compresión y expansión a una velocidad de  $\pm 10$  m/s con el pistón plano para validar el modelo numérico, comparando con los resultados obtenidos en los trabajos de [7]; los errores para el incremento en la energía interna son de  $-0.5\%$  en compresión y  $4.7\%$  en expansión.

Para los procesos de compresión y expansión con el pistón cóncavo se tienen las siguientes conclusiones, a partir de las gráficas, tablas y campos de presión-velocidad:

- Durante la compresión y expansión, cuando inicia el movimiento del pistón se produce un campo de presión que transmite el movimiento a lo largo de la dirección  $z$ , desde el pistón hacia la culata. Sin embargo, durante la compresión la presión es mayor sobre la superficie del pistón y es menor en la expansión.

- El pistón plano genera un flujo principalmente axial, mientras que el pistón cóncavo genera un flujo tanto axial como radial. En compresión, el flujo radial va desde la corona hacia el centro de la cavidad y en la expansión desde la cavidad hacia la corona. La simulación de los dos procesos es a tres velocidades de pistón:  $\pm 1$  m/s,  $\pm 5$  m/s y  $\pm 10$  m/s.
- Al final de la compresión se genera un *squish*, debido a la reducción de volumen en la corona, registrándose presiones y velocidades elevadas en esta región. En el caso del pistón a  $-10$  m/s se alcanzan velocidades radiales de hasta  $-13$  m/s y una presión máxima en la corona de  $2.9165 \times 10^6$  Pa, y dentro de la cavidad una presión mínima de  $2.9102 \times 10^6$  Pa. Al inicio de la expansión se genera un movimiento squish con una velocidad de  $13$  m/s, que va desde la cavidad hacia la corona.
- El incremento de la presión respecto a los valores reversibles se pueden traducir en una  $\Delta p$  final. Esta diferencia de presión, a una velocidad de  $-10$  m/s tiene un valor de  $4186.52$  Pa y a  $-1$  m/s tiene un valor de  $1394.84$  Pa; la diferencia de presión es  $300\%$  mayor a  $-10$  m/s que a  $-1$  m/s. De igual manera, a  $10$  m/s se tiene un incremento de  $194.51$  Pa y a  $1$  m/s de  $97.21$  Pa. El incremento en la presión es  $200\%$  mayor a  $10$  m/s que a  $1$  m/s.
- El incremento en la energía interna respecto a los trabajos de compresión o expansión, a una velocidad de  $-10$  m/s fue de  $0.2329\%$  y para  $10$  m/s de  $0.1194\%$ . Mientras que a  $-1$  m/s es de  $0.0778\%$  y a  $1$  m/s de  $0.0597\%$ . Se concluye que a mayor velocidad de compresión o expansión el incremento en la energía interna es mayor; aunque el proceso de compresión presenta el mayor incremento en la energía interna, según los datos obtenidos.
- El pistón cóncavo produce mayor disipación viscosa durante la compresión que durante la expansión. Comparado respecto a lo obtenido con el pistón plano a la misma velocidad  $\pm 10$  m/s, se obtiene que el incremento en la energía interna es  $6$  veces superior en compresión y  $5.33$  veces superior en expansión. El incremento en la energía interna se debe a la generación de irreversibilidad, por disipación viscosa. Por lo tanto, la generación de un flujo radial y axial, sumado a la generación de squish cuando el pistón cóncavo está cerca del *PMS* en compresión o expansión, aumentan la irreversibilidad del sistema al incrementar la energía interna.

En trabajos futuros, la geometría y velocidad del pistón, así como la disipación viscosa, pueden ayudar con el estudio de otros movimientos que se producen dentro de la cámara de combustión como el swirl y el tumble. Esto significa, añadir una dimensión al modelo y resolver el flujo, ahora, en tres dimensiones. Posteriormente, estudiar los efectos en el mezclado del aire con el combustible, en la combustión y en la transferencia de calor; además de los procesos de admisión y escape de gases.

## Apéndice A

# Ecuaciones de transporte instantáneas

Se anexan las ecuaciones de transporte instantáneas en coordenadas cilíndricas, las cuales se encuentran en el libro *Transport Phenomena* de Bird et al. [10].

### Ecuación de continuidad

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (\rho r u_r) + \frac{1}{r} \frac{\partial \rho u_\theta}{\partial \theta} + \frac{\partial \rho u_z}{\partial z} = 0 \quad (\text{A.1})$$

debido a la simetría en la geometría del pistón

### Ley de Newton para viscosidad

Usando la hipótesis de Stokes  $\lambda = -\frac{2}{3}\mu$ , donde  $\vec{u} = (u_r, u_\theta, u_z)$ , se obtiene el tensor  $\tau$

$$\tau_{rr} = \mu \left[ 2 \frac{\partial u_r}{\partial r} \right] - \frac{2}{3} \mu (\nabla \cdot \vec{u}) \quad (\text{A.2a})$$

$$\tau_{\theta\theta} = \mu \left[ 2 \left( \frac{1}{r} \frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} + \frac{u_r}{r} \right) \right] - \frac{2}{3} \mu (\nabla \cdot \vec{u}) \quad (\text{A.2b})$$

$$\tau_{zz} = \mu \left[ 2 \frac{\partial u_z}{\partial z} \right] - \frac{2}{3} \mu (\nabla \cdot \vec{u}) \quad (\text{A.2c})$$

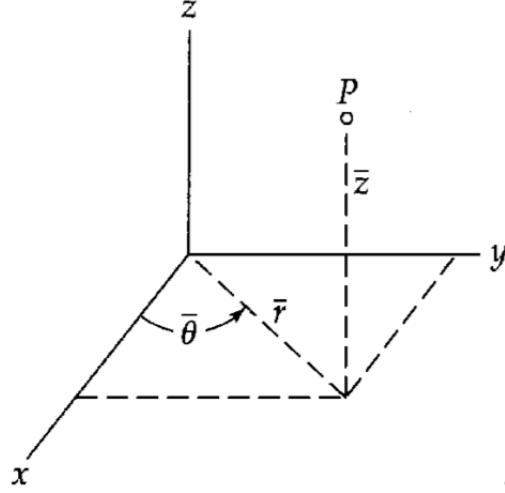


Figura A.1: Coordenadas cilíndricas  $(r, \theta, z)$ .

$$\tau_{r\theta} = \tau_{\theta r} = \mu \left[ r \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{u_\theta}{r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial u_r}{\partial \theta} \right] \quad (\text{A.2d})$$

$$\tau_{\theta z} = \tau_{z\theta} = \mu \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial u_z}{\partial \theta} + \frac{\partial u_\theta}{\partial z} \right] \quad (\text{A.2e})$$

$$\tau_{zr} = \tau_{rz} = \mu \left[ \frac{\partial u_r}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial r} \right] \quad (\text{A.2f})$$

en las cuales

$$\nabla \cdot \vec{u} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r u_r) + \frac{1}{r} \frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} + \frac{\partial u_z}{\partial z} \quad (\text{A.2g})$$

### Ecuaciones de movimiento en términos de $\tau$

$$\rho \left( \frac{\partial u_r}{\partial t} + u_r \frac{\partial u_r}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r} \frac{\partial u_r}{\partial \theta} + u_z \frac{\partial u_r}{\partial z} + \frac{u_\theta^2}{r} \right) = -\frac{\partial p}{\partial r} + \rho g_r + S_{Mr} + \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \tau_{rr}) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \tau_{\theta r} + \frac{\partial}{\partial z} \tau_{zr} - \frac{\tau_{\theta\theta}}{r} \right] \quad (\text{A.3a})$$

$$\rho \left( \frac{\partial u_\theta}{\partial t} + u_r \frac{\partial u_\theta}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r} \frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} + u_z \frac{\partial u_\theta}{\partial z} + \frac{u_r u_\theta}{r} \right) = -\frac{1}{r} \frac{\partial p}{\partial \theta} + \rho g_\theta + S_{M\theta} + \left[ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \tau_{r\theta}) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \tau_{\theta\theta} + \frac{\partial}{\partial z} \tau_{z\theta} \right] \quad (\text{A.3b})$$



$$\rho \left( \frac{\partial u_z}{\partial t} + u_r \frac{\partial u_z}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r} \frac{\partial u_z}{\partial \theta} + u_z \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) = -\frac{\partial p}{\partial z} + \rho g_z + S_{Mz} + \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \tau_{rz}) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \tau_{\theta z} + \frac{\partial}{\partial z} \tau_{zz} \right] \quad (\text{A.3c})$$

## Función de disipación para un fluido newtoniano

Utilizando también la hipótesis de Stokes se obtiene la siguiente expresión para  $\Phi$

$$\begin{aligned} \Phi = & 2\mu \left[ \left( \frac{\partial u_r}{\partial r} \right)^2 + \left( \frac{1}{r} \frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} + \frac{u_r}{r} \right)^2 + \left( \frac{\partial u_z}{\partial z} \right)^2 \right] + \mu \left[ r \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{u_\theta}{r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial u_r}{\partial \theta} \right]^2 \\ & + \mu \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial v_z}{\partial \theta} + \frac{\partial u_\theta}{\partial z} \right]^2 + \mu \left[ \frac{\partial v_r}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial r} \right]^2 - \frac{2\mu}{3} \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r u_r) + \frac{1}{r} \frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} + \frac{\partial u_z}{\partial z} \right]^2 \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

## Ecuación de energía

En términos de la energía interna  $e$  y suponiendo un material isotrópico ( $\kappa \rightarrow k$ ), tenemos la siguiente expresión:

$$\begin{aligned} \rho \left( \frac{\partial e}{\partial t} + u_r \frac{\partial e}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r} \frac{\partial e}{\partial \theta} + u_z \frac{\partial e}{\partial z} \right) = & -p \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r u_r) + \frac{1}{r} \frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} + \frac{\partial u_z}{\partial z} \right] \\ & + k \left[ \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 T}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right] + \Phi + S_e \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$



# Apéndice B

## Archivos Q1

### B.1. Compresión y expansión con pistón plano

```
TALK=F; RUN(1, 1)
*****
Q1 created by VDI menu, Version 2009, Date 24/09/09
CPVNAM=VDI;SPPNAM=Core
*****
IRUNN = 1 ;LIBREF = 0
*****
Group 1. Run Title
TEXT(COMPRESION-EXPANSIÓN PISTON PLANO )
*****
Group 2. Transience
STEADY=F
    *Set overall time and no. of steps
    **/-10 m/s
RSET(U,0.,4E-03,80000)
*****
Groups 3, 4, 5 Grid Information
    * Overall number of cells, RSET(M,NX,NY,NZ,tolerance)
RSET(M,1,120,121,1E-5)
    * Cylindrical-polar grid
CARTES=F
*****
Group 6. Body-Fitted coordinates
*****
Group 7. Variables: STOREd,SOLVEd,NAMED
    * Non-default variable names
NAME(135)=DWDZ ;NAME(136)=DWDY
NAME(137)=DWDX ;NAME(138)=DVDZ
NAME(139)=DVDY ;NAME(140)=DVDX
NAME(141)=DUDZ ;NAME(142)=DUDY
NAME(143)=DUDX ;NAME(144)=DIVW
```

```

NAME(145)=EPKE ;NAME(146)=TEM1
NAME(147)=KOND ;NAME(148)=DEN1
NAME(149)=ENUL ;NAME(150)=SPH1
  * Solved variables list
SOLVE(P1,U1,V1,W1,TEM1)
  * Stored variables list
STORE(SPH1,ENUL,DEN1,KOND,EPKE)
STORE(DIVW)
  * Additional solver options
SOLUTN(P1,Y,Y,Y,N,N,Y)
SOLUTN(U1,Y,Y,Y,N,N,Y)
SOLUTN(V1,Y,Y,Y,N,N,Y)
SOLUTN(W1,Y,Y,Y,N,N,Y)
SOLUTN(TEM1,Y,Y,Y,N,N,Y)
TURMOD(KEMODL)
STORE(DUDX,DUDY,DUDZ)
STORE(DVDX,DVDY,DVDZ)
STORE(DWDX,DWDY,DWDZ)
*****
  Group 8. Terms & Devices
TERMS (P1 ,Y,Y,Y,Y,Y,Y)
TERMS (TEM1,Y,Y,Y,Y,Y,Y)
NEWRH1 = T
NEWENL = T
U1AD =0. ;V1AD =0.
W1AD = ZMOVE
*****
  Group 9. Properties
  * Domain material index is 2 signifying:
  * Air using Ideal Gas Law, STP
SETPRPS(1, 2)
RHO1 = GRND5
RHO1A =0. ;RHO1B =3484.320557E-06
RHO1C =714.285714E-03
ENUL =15.89E-06
ENULA =-4.94679E-06 ;ENULB =4.58394E-08
ENULC =8.0974E-11
DRH1DP = GRND5
DV01DT =3.33E-03
PRNDTL(TEM1)=-26.3E-03
CP1=1007
PRT(EP)=1.314
*****
  Group 10. Inter-Phase Transfer Processes
*****
  Group 11. Initialise Var/Porosity Fields
  *Compresión
FIINIT(P1)=101300 ;FIINIT(TEM1)=300.

```

```

*Expansión
*FIINIT(P1)=2.90776E+06 ;FIINIT(TEM1)=782.85
*****
Group 12. Convection and diffusion adjustments
No PATCHes used for this Group
*****
Group 13. Boundary & Special Sources
No PATCHes used for this Group
EGWF = T
*****
Group 14. Downstream Pressure For PARAB
*****
Group 15. Terminate Sweeps
LSWEEP = 300
RESFAC =1.0E-5
SELREF = T
*****
Group 16. Terminate Iterations
*****
Group 17. Relaxation
RELAX(P1 ,LINRLX,1.)
RELAX(V1 ,FALSDT,1E-03 )
RELAX(W1 ,FALSDT,1E-03 )
RELAX(TEM1 ,FALSDT,1E-05 )
*****
Group 18. Limits
VARMAX(TEM1)=800. ;VARMIN(TEM1)=0.
VARMAX(P1)=3E+06. ;VARMIN(P1)=0.
*****
Group 19. EARTH Calls To GROUND Station
NAMGRD =CONV
ISG62=0; PARSOL=T
GENK = T
IZW1 = 120
AZW1 = GRND1 ;BZW1 =-10.
      *BZW1 =+/- 10.0
CZW1 =0. ;DZW1 =0.
SPEDAT(SET,CUTCELL,FRCMN,R,1.0E-03)
SPEDAT(SET,CUTCELL,FRCMX,R,0.999)
*****
Group 20. Preliminary Printout
*****
Group 21. Print-out of Variables
INIFLD = T
SUBWGR = T
OUTPUT(P1 ,Y,Y,Y,Y,Y)
OUTPUT(U1 ,Y,Y,Y,Y,Y)
OUTPUT(V1 ,Y,Y,Y,Y,Y)

```

```

OUTPUT(W1 ,Y,Y,Y,Y,Y)
OUTPUT(SPH1,N,N,Y,Y,N,N)
*****
Group 22. Monitor Print-Out
IXMON = 1 ;IYMON = 29 ;IZMON = 1
NPRMON = 100000
NPRMNT = 1
TSTSWP = 1
*****|*****
Group 23.Field Print-Out & Plot Control
NPRINT = 100000
NTPRIN = 100000 ;ISTPRF = 1 ;ISTPRL = 100001
YZPR = T ;NUMCLS = 6
ISWPRF = 1 ;ISWPRL = 100000
No PATCHes used for this Group
*****
Group 24. Dumps For Restarts
IDISPA = 1 ;IDISPB = 0 ;IDISPC = 0
CSG1 = 'A'
GVIEW(P,0.972094,-0.091636,-0.215953)
GVIEW(UP,0.116447,0.987621,0.105098)

*Compresión
> DOM, SIZE, 5.000000E-02, 2.000000E-02, 4.50000000E-02
*Expansión
*> DOM, SIZE, 5.000000E-02, 2.000000E-02, 5.00000000E-03
> DOM, MONIT, 2.500000E-02, 9.500000E-03, 1.833333E-04
> DOM, SCALE, 1.000000E+00, 1.000000E+00, 1.000000E+00
> DOM, INCREMENT, 1.000000E-02, 1.000000E-02, 1.000000E-02
> GRID, RSET_X_1, 1, 1.000000E+00
> GRID, RSET_Y_1, 120,-1.400000E+00
> GRID, RSET_Z_1, -120, 1.400000E+00
> GRID, RSET_Z_2, 1, 1.00000000E+00
> DOM, T_AMBIENT, 3.000000E+02
> DOM, P_AMBIENT, 1.013000E+05
> DOM, INI_AMB, YES
> DOM, INI_BUOY, YES

> OBJ, NAME, PARED
> OBJ, POSITION, 0.000000E+00, 2.000000E-02, 0.000000E+00
> OBJ, SIZE, TO_END, 1.000000E-03, 4.500000E-02
> OBJ, DOMCLIP, NO
> OBJ, GEOMETRY, polcu8
> OBJ, TYPE, BLOCKAGE
> OBJ, COLOR-MODE, DEFAULT2
> OBJ, COLOR-VAL, 30
> OBJ, MATERIAL, 198,Solid with smooth-wall friction
> OBJ, TIME_LIMITS, ALWAYS_ACTIVE

```

```

> OBJ,    WALL_CO,    GENERAL-LOG-LAW

> OBJ,    NAME,       CABEZA
> OBJ,    POSITION,    0.000000E+00, 0.000000E+00,-1.000000E-03
> OBJ,    SIZE,       TO_END,      2.100000E-02, 1.000000E-03
> OBJ,    DOMCLIP,    NO
> OBJ,    GEOMETRY,   polcu8
> OBJ,    TYPE,       BLOCKAGE
> OBJ,    MATERIAL,   198,Solid with smooth-wall friction
> OBJ,    TIME_LIMITS, ALWAYS_ACTIVE
> OBJ,    WALL_CO,    GENERAL-LOG-LAW

> OBJ,    NAME,       PISTON
> OBJ,    POSITION,    0.000000E+00, 0.000000E+00, AT_END
> OBJ,    SIZE,       TO_END,      2.000000E-02, 1.000000E-03
> OBJ,    GEOMETRY,   polcu8
> OBJ,    TYPE,       BLOCKAGE
> OBJ,    MATERIAL,   198,Solid with smooth-wall friction
> OBJ,    TIME_LIMITS, ALWAYS_ACTIVE
> OBJ,    WALL_CO,    GENERAL-LOG-LAW

END

```

## B.2. Compresión y expansión con pistón cóncavo

```

TALK=F;RUN( 1, 1)
*****
Q1 created by VDI menu, Version 2009, Date 24/09/09
CPVNAM=VDI;SPPNAM=Core
*****
IRUNN = 1 ;LIBREF = 0
*****
Group 1. Run Title
TEXT(COMPRESION-EXPANSIÓN PISTON CONCAVO )
*****
Group 2. Transience
STEADY=F
* Set overall time and no. of steps
  *RSET(U,TO,T,NT)
  *TO=0.
  **/- 10 m/s -> T=4.0E-03, NT=80000
  **/- 5 m/s -> T=8.0E-03, NT=80000
  **/- 1 m/s -> T=4.0E-02, NT=40000

* Modify regions
  *RSET(T,IREG,NT,A)
  *IREG=1, A=+/- 1.151

```

```

      *-10 m/s
RSET(U,0.,4.0E-03,80000)
RSET(T,1,80000,-1.151)
      *10 m/s
      *RSET(T,1,80000,1.151)
*****
  Groups 3, 4, 5  Grid Information
    * Overall number of cells, RSET(M,NX,NY,NZ,tolerance)
RSET(M,2,140,161,1.0E-05)
    * Cylindrical-polar grid
CARTES=F
*****
  Group 6. Body-Fitted coordinates
*****
  Group 7. Variables: STOREd,SOLVEd,NAMED
    * Non-default variable names
NAME(135)=DWDZ ;NAME(136)=DWDY
NAME(137)=DWDX ;NAME(138)=DVDZ
NAME(139)=DVDY ;NAME(140)=DVDX
NAME(141)=DUDZ ;NAME(142)=DUDY
NAME(143)=DUDX ;NAME(144)=DIVW
NAME(145)=EPKE ;NAME(146)=TEM1
NAME(147)=KOND ;NAME(148)=DEN1
NAME(149)=ENUL ;NAME(150)=SPH1
    * Solved variables list
SOLVE(P1,V1,W1,TEM1)
    * Stored variables list
STORE(SPH1,ENUL,DEN1,KOND,EPKE)
STORE(DIVW)
    * Additional solver options
SOLUTN(P1,Y,Y,Y,N,N,Y)
SOLUTN(V1,Y,Y,Y,N,N,Y)
SOLUTN(W1,Y,Y,Y,N,N,Y)
SOLUTN(TEM1,Y,Y,Y,N,N,Y)
TURMOD(KEMODL)
STORE(DUDX,DUDY,DUDZ)
STORE(DVDX,DVDY,DVDZ)
STORE(DWDX,DWDY,DWDZ)
*****
  Group 8. Terms & Devices
TERMS (P1 ,Y,Y,Y,Y,Y)
TERMS (TEM1,Y,Y,Y,Y,Y)
NEWRH1 = T
NEWENL = T
U1AD =0. ;V1AD =0.
W1AD = ZMOVE
*****
  Group 9. Properties

```



```

* Domain material index is 2 signifying:
* Air using Ideal Gas Law, STP
SETPRPS(1, 2)
RHO1 = GRND5
RHO1A =0. ;RHO1B =3484.320557E-06
RHO1C =714.285714E-03
ENUL =15.89E-06
ENULA =-4.94679E-06 ;ENULB =4.58394E-08
ENULC =8.0974E-11
DRH1DP = GRND5
DVO1DT =3.33E-03
PRNDTL(TEM1)=-26.3E-03
CP1=1007
PRT(EP)=1.314
*****
Group 10. Inter-Phase Transfer Processes
*****
Group 11. Initialise Var/Porosity Fields
*Compresión
FIINIT(P1)=101300 ;FIINIT(TEM1)=300.
*Expansión
*FIINIT(P1)=2.90776E+06 ;FIINIT(TEM1)=782.85
INIADD = F
*****
Group 12. Convection and diffusion adjustments
No PATCHes used for this Group
*****
Group 13. Boundary & Special Sources
No PATCHes used for this Group
EGWF = T
*****
Group 14. Downstream Pressure For PARAB
*****
Group 15. Terminate Sweeps
LSWEEP = 1000
RESFAC =1E-5
SELREF = T
*****
Group 16. Terminate Iterations
LITER(P1)=100; ENDIT(P1)=1.0E-05
LITER(V1)=50 ; ENDIT(V1)=1.0E-04
LITER(W1)=50 ; ENDIT(W1)=1.0E-04
LITER(TEM1)=100; ENDIT(TEM1)=1.0E-05
*****
Group 17. Relaxation
RELAX(P1 ,LINRLX,1.)
RELAX(V1 ,FALSDT,1E-03 )
RELAX(W1 ,FALSDT,1E-03)

```

```

RELAX(TEM1 ,FALSDT,1E-05)
*****
  Group 18. Limits
VARMAX(P1)=3E+06 ;VARMIN(P1)=0
VARMAX(TEM1)=800. ;VARMIN(TEM1)=0.
*****
  Group 19. EARTH Calls To GROUND Station
ISG62 = 0; PARSOL = T
NAMGRD =CONV
GENK = T
IZW1 = 80
AZW1 = GRND1 ;BZW1 =-10.
      *BZW1=+/- 1, +/- 5, +/- 10
CZW1 =0. ;DZW1 =0.
SPEDAT(SET,CUTCELL,FRCMN,R,1.0E-03)
SPEDAT(SET,CUTCELL,FRCMX,R,0.999)
*****
  Group 20. Preliminary Printout
*****
  Group 21. Print-out of Variables
INIFLD = T
SUBWGR = T
OUTPUT(P1 ,Y,Y,Y,Y,Y,Y)
OUTPUT(V1 ,Y,Y,Y,Y,Y,Y)
OUTPUT(W1 ,Y,Y,Y,Y,Y,Y)
OUTPUT(TEM1,Y,Y,Y,Y,Y,Y)
*****
  Group 22. Monitor Print-Out
IXMON = 1 ;IYMON = 1 ;IZMON = 1
NPRMON = 100000
NPRMNT = 1
TSTSWP = 1
*****
  Group 23.Field Print-Out & Plot Control
NPRINT = 100000
NTPRIN =100000; NUMCLS=6
YZPR = T;ISTPRF=1; ISTPRL=100001
ISWPRF = 1 ;ISWPRL = 100000
  No PATCHes used for this Group
*****
  Group 24. Dumps For Restarts
IDISPA = 10 ;IDISPB = 0 ;IDISPC = 0
CSG1   ='A'

GVIEW(P,-0.868732,-0.363308,0.336619)
GVIEW(UP,-0.352441,0.930977,0.095224)

```

\*Compresión

```

> DOM,    SIZE,          5.000000E-02, 2.000000E-02, 4.78430E-02
      *Expansión
      *> DOM,    SIZE,          5.000000E-02, 2.000000E-02, 7.8430E-03
> DOM,    MONIT,        2.500000E-02, 1.991666E-02, 4.075000E-02
> DOM,    SCALE,        1.000000E+00, 1.000000E+00, 1.000000E+00
> DOM,    INCREMENT,    1.000000E-02, 1.000000E-02, 1.000000E-02
> GRID,   RSET_X_1,      2, 1.000000E+00
> GRID,   RSET_Y_1,      50, 1.000000E+00
> GRID,   RSET_Y_2,      60, 1.000000E+00
> GRID,   RSET_Y_3,      30, -1.200000E+00
> GRID,   RSET_Z_1,     -80, 1.900000E+00
> GRID,   RSET_Z_2,     -80, 1.000000E+00
> GRID,   RSET_Z_3,      1, 1.000000E+00
> DOM,    T_AMBIENT,    3.000000E+02
> DOM,    P_AMBIENT,    1.013000E+05
> DOM,    INI_AMB,      NO
> DOM,    INI_BUOY,     NO

> OBJ,    NAME,         PARED
> OBJ,    POSITION,      0.000000E+00, 2.000000E-02, 0.000000E+00
> OBJ,    SIZE,         TO_END,      1.000000E-03, TO_END
> OBJ,    DOMCLIP,      NO
> OBJ,    GEOMETRY,     polcu8
> OBJ,    TYPE,         BLOCKAGE
> OBJ,    COLOR-MODE,   DEFAULT2
> OBJ,    COLOR-VAL,    30
> OBJ,    MATERIAL,     198,Solid with smooth-wall friction
> OBJ,    TIME_LIMITS,  ALWAYS_ACTIVE
> OBJ,    WALL_CO,      GENERAL-LOG-LAW

> OBJ,    NAME,         CABEZA
> OBJ,    POSITION,      0.000000E+00, 0.000000E+00,-1.000000E-03
> OBJ,    SIZE,         TO_END,      2.100000E-02, 1.000000E-03
> OBJ,    DOMCLIP,      NO
> OBJ,    GEOMETRY,     polcu8
> OBJ,    TYPE,         BLOCKAGE
> OBJ,    MATERIAL,     198,Solid with smooth-wall friction
> OBJ,    TIME_LIMITS,  ALWAYS_ACTIVE
> OBJ,    WALL_CO,      GENERAL-LOG-LAW

> OBJ,    NAME,         PISTON
> OBJ,    POSITION,      0.000000E+00, 4.993752E-03, AT_END
> OBJ,    SIZE,         9.995834E-04, 1.500625E-02, 6.000000E-03
> OBJ,    GEOMETRY,     pistonrebanada
> OBJ,    ROTATION24,   20
> OBJ,    GRID,         NO
> OBJ,    TYPE,         BLOCKAGE
> OBJ,    MATERIAL,     198,Solid with smooth-wall friction

```

```
> OBJ,    TIME_LIMITS, ALWAYS_ACTIVE
> OBJ,    WALL_CO,      GENERAL-LOG-LAW

> OBJ,    NAME,        PISTON2
> OBJ,    POSITION,     0.000000E+00, 0.000000E+00, AT_END
> OBJ,    SIZE,       TO_END,      TO_END,      1.000000E-03
> OBJ,    GEOMETRY,   polcu8
> OBJ,    GRID,       NO
> OBJ,    TYPE,       BLOCKAGE
> OBJ,    MATERIAL,   198,Solid with smooth-wall friction
> OBJ,    TIME_LIMITS, ALWAYS_ACTIVE
> OBJ,    WALL_CO,      GENERAL-LOG-LAW

> OBJ,    NAME,        PISTON3
> OBJ,    POSITION,     0.000000E+00, 0.000000E+00, AT_END
> OBJ,    SIZE,       TO_END,      1.6000E-02,      6.0000E-03
> OBJ,    DOMCLIP,    NO
> OBJ,    GEOMETRY,   polwire
> OBJ,    TYPE,       NULL
> OBJ,    COLOR-MODE, USER
> OBJ,    COLOR-VAL,  30
> OBJ,    OPAQUE,     50

> OBJ,    NAME,        PISTON4
> OBJ,    POSITION,     0.000000E+00, 0.000000E+00, AT_END
> OBJ,    SIZE,       TO_END,      9.0000E-03,      9.00000E-04
> OBJ,    DOMCLIP,    NO
> OBJ,    GEOMETRY,   polwire
> OBJ,    TYPE,       NULL
> OBJ,    COLOR-MODE, USER
> OBJ,    COLOR-VAL,  30
> OBJ,    OPAQUE,     50

END
```

# Bibliografía

- [1] M.J. Moran, H.N. Shapiro, and D.D. Boettner. *Fundamentals of Engineering Thermodynamics, 7th Edition*. Wiley Global Education, 2010.
- [2] T.J. Chung. *Computational Fluid Dynamics*. Cambridge University Press, 2010.
- [3] Y.A. Çengel and M.A. Boles. *Thermodynamics: An Engineering Approach*. McGraw-Hill, 2011.
- [4] W.W. Pulkrabek. *Engineering Fundamentals of the Internal Combustion Engine*. Prentice Hall, 1997.
- [5] L Saravanakumar, Ramesh Bapu B. R, B Durga, Prasad D Sharath, Christy Anand, R Nagarajan, E Prasad, and Suryani Gani. Analysis and effect of squish generation using cfd on variable compression ratio c.i engine. 1, 01 2012.
- [6] Aly I. Taleb, Paul Sapin, Christoph Barfuß, Drazen Fabris, and Christos N. Markides. CFD analysis of thermally induced thermodynamic losses in the reciprocating compression and expansion of real gases. *Journal of Physics: Conference Series*, 821:012016, mar 2017.
- [7] Siti Nurul Akmal Yusof, Yutaka Asako, Mohammad Faghri, Lit Ken Tan, and Nor Azwadi bin Che Sidik. Numerical analysis for irreversible processes in a piston-cylinder system. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 124:1097 – 1106, 2018.
- [8] H.K. Versteeg and W. Malalasekera. *An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Approach*. Longman Scientific & Technical, 1995.
- [9] J.H. Ferziger and M. Perić. *Computational Methods for Fluid Dynamics*. Springer, 2002.
- [10] R.B. Bird, W.E. Stewart, and E.N. Lightfoot. *Transport Phenomena*. John Wiley and Sons, Inc., 2002.
- [11] J.N. Reddy. *An Introduction to Continuum Mechanics*. Cambridge University Press, 2013.
- [12] F.M. White. *Viscous Fluid Flow*. McGraw-Hill, 1974.

- [13] Y.A. Çengel and J.M. Cimbala. *Mecánica de Fluidos: Fundamentos y Aplicaciones*. McGraw-Hill, 2006.
- [14] I.G. Currie. *Fundamental Mechanics of Fluids*. Marcel Dekker, Inc., 2003.
- [15] S Petrescu, B Borcila, M Costea, E Banches, G Popescu, N Boriaru, C Stanciu, and C Dobre. Concepts and fundamental equations in thermodynamics with finite speed. *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, 147:012144, aug 2016.
- [16] B. Andersson, R. Andersson, L. Håkansson, M. Mortensen, R. Sudiyo, and B. van Wachem. *Computational Fluid Dynamics for Engineers*. Cambridge University Press, 2011.
- [17] S.V. Patankar. *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. McGraw-Hill, 1980.