

3 ECUACIONES DE GOBIERNO [6]

3.1 Ecuaciones de gobierno del fenómeno

En un marco de referencia cartesiano x, y, z las ecuaciones de flujo compresible de Navier – Stokes pueden ser escritas de la forma:

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}_i}{\partial x_i} = \mathbf{S} \quad (3.1)$$

Donde \mathbf{S} son los términos de Svente definidos por

$$\mathbf{S} = {}^T (0, -g(\rho - \rho_0), 0, 0, ug(\rho - \rho_0), 0) \quad (3.2)$$

\mathbf{U} es un vector de cinco componentes definido por

$$\mathbf{U} = {}^T (\rho, \rho u_1, \rho u_2, \rho u_3, \rho e, \rho z_f) \quad (3.3)$$

Se considera además que $\mathbf{u} = (u_1, u_2, u_3)$ es el vector velocidad, ρ es la densidad.

También el vector velocidad se escribe como $\mathbf{u} = (u, v, w)$. La ecuación (3.1) representa la evolución de la densidad, cantidad de movimiento y energía total definida para un gas ideal como

$$\rho e = \rho C_v T + \frac{1}{2} \rho (u_1^2 + u_2^2 + u_3^2) \quad (3.4)$$

En este trabajo los efectos gravitacionales en la ecuación de energía son proporcionales al Ma^2 y como $Ma \ll 1$, se desprecian dichos efectos.

\mathbf{F}_i son flujos donde $\forall i \in \{1, 2, 3\}$, y para un fluido Newtoniano esta dado por,

$$\mathbf{F}_i = \begin{pmatrix} \rho u_i \\ \rho u_i u_1 + p \delta_{i1} - 2\mu S_{i1} \\ \rho u_i u_2 + p \delta_{i2} - 2\mu S_{i2} \\ \rho u_i u_3 + p \delta_{i3} - 2\mu S_{i3} \\ (\rho e + p)u_i - 2\mu u_j S_{ij} - k \frac{\partial T}{\partial x_i} \\ \rho z_f u_i - D \frac{\partial Z_f}{\partial x_i} \end{pmatrix} \quad (3.5)$$

$k = \rho C_p \kappa$ es la conductividad térmica y κ la difusividad térmica. δ_{ij} es el índice de Kronecker y S_{ij} es el componente divergencia del tensor deformación y finalmente el término Z_f es un escalar pasivo que tiene una función similar a un trazador de la propagación del fluido (aire caliente). Despreciando la viscosidad, S_{ij} se escribe,

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \mathbf{u}) \delta_{ij} \right) \quad (3.6)$$

La viscosidad molecular se establece a través de la ley empírica Sutherland,

$$\mu(T) = \mu(T_{ref}) \left(\frac{T}{T_{ref}} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{1 + \frac{S}{T_{ref}}}{1 + \frac{S}{T}} \quad (3.7)$$

Donde S , T_{ref} y $\mu(T_{ref})$ son funciones del gas. La conductividad $k(T)$ se obtiene asumiendo que el número molecular de Prandtl es,

$$Pr = \frac{\nu}{k} = \frac{C_p \mu(T)}{k(T)} \quad (3.8)$$

Para este análisis se considera de $Pr = 0.7$. La ecuación clásica de estado para gas ideal referente a la presión estática p , la temperatura T , y la densidad ρ ,

$$p = R \rho T \quad (3.9)$$

cierra el sistema, con $R = C_p - C_v$. También se debe recordar que $\gamma = \frac{C_p}{C_v}$ es constante. Debe observarse que el término forzado es equivalente a la imposición de un gradiente de presión de un flujo medio y constituye un camino conveniente y convencional para alcanzar de manera numérica la homogeneidad en la dirección del flujo.

3.2 Esquema numérico y modelo de turbulencia

3.2.1 Simulación de Grandes Escalas (LES)

La técnica LES (Large-eddy simulation) consiste en simular únicamente las grandes escalas del flujo; las pequeñas escalas, o menores al tamaño local de la malla, son filtradas, y su efecto sobre el movimiento de las grandes escalas es modelado a partir de un modelo sub-malla. Las ecuaciones de LES son encontradas por la aplicación de un filtro espacial $G_\Delta(x)$ de tamaño Δ en las ecuaciones de Navier – Stokes. Esto elimina las escalas más pequeñas que el filtro, llamado escala sub – malla. Matemáticamente, la operación de filtrado corresponde a la integral de convolución de alguna cantidad $f(x,t)$ del flujo por la función filtro $G_\Delta(x)$, en la forma,

$$\bar{f}(x,t) = \int f(y,t) G_\Delta(x-y) dy \quad (3.10)$$

La ecuación 3.10 es la parte filtrada libre de pequeñas escalas, o de la parte sub-malla. La parte sub-malla es la desviación del flujo actual con respecto al campo filtrado. La variable original estará dada por la suma de la parte filtrada más la parte sub-malla.

$$f = \bar{f} + f' \quad (3.11)$$

Sustituyendo, las variables originales por su definición LES, ecuación 3.11, en las ecuaciones compresibles de Navier – Stokes produce,

$$\frac{\partial \bar{U}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{F}_1}{\partial x_1} + \frac{\partial \bar{F}_2}{\partial x_2} + \frac{\partial \bar{F}_3}{\partial x_3} = S \quad , \quad (3.12)$$

con

$$\overline{\rho e} = \overline{\rho C_v T} + \frac{1}{2} \overline{\rho (u_1^2 + u_2^2 + u_3^2)} \quad , \quad (3.13)$$

y

$$\bar{\rho} = \overline{\rho RT} \quad . \quad (3.14)$$

Reacuérdesse que la barra significa, valor filtrado.

Para desarrollar un protocolo tan cercano como sea posible al formalismo incompresible, es común en modelos de turbulencia estadística, flujos compresibles y en LES introducir el promedio de Favre, el promedio de Favre se obtiene a partir de los valores filtrados y se denota por \tilde{f} definido como:

$$\tilde{f} = \frac{\overline{\rho f}}{f} \quad (3.15)$$

Entonces se tiene que,

$$S = {}^T (0, -g(\bar{\rho} - \rho_{ref}), 0, 0, ug(\bar{\rho} - \rho_{ref}), 0) \quad (3.16)$$

$$U = {}^T (\bar{\rho}, \bar{\rho} \tilde{u}_1, \bar{\rho} \tilde{u}_2, \bar{\rho} \tilde{u}_3, \bar{\rho} \tilde{e}, \bar{\rho} Z_f) \quad (3.17)$$

y la energía total resuelta se rescribe,

$$\overline{\rho e} = \bar{\rho} \tilde{e} = \bar{\rho} C_v \tilde{T} + \frac{1}{2} \overline{\rho (u_1^2 + u_2^2 + u_3^2)} \quad (3.18)$$

Los flujos \bar{F}_i de la ecuación 3.12 son,

$$\bar{\mathbf{F}}_i = \begin{pmatrix} \bar{\rho} \tilde{u}_i \\ \overline{\rho u_i u_1} + \bar{p} \delta_{i1} - \overline{2\mu S_{i1}} \\ \overline{\rho u_i u_2} + \bar{p} \delta_{i2} - \overline{2\mu S_{i2}} \\ \overline{\rho u_i u_3} + \bar{p} \delta_{i3} - \overline{2\mu S_{i3}} \\ (\bar{\rho} e + \bar{p}) u_i - \overline{2\mu u_j S_{ij}} - k \frac{\partial T}{\partial x_i} \\ \overline{\rho z_f u_i} - D \frac{\partial Z_f}{\partial x_i} \end{pmatrix} \quad (3.19)$$

con la ecuación filtrada de estado,

$$\bar{p} = \bar{\rho} R \tilde{T} \quad (3.20)$$

Al sustituir las variables originales, aparecen en la ecuación de cantidad de movimiento los términos sub-malla, que son relaciones entre la parte filtrada de las velocidades y es originado por el carácter no lineal de los términos convectivos. Matemáticamente, tienen un parecido a los esfuerzos de Reynolds obtenidos al aplicar un promediado de Reynolds a las ecuaciones de Navier-Stokes. Sin embargo, físicamente, los esfuerzos sub-malla representan las interacciones entre las pequeñas y grandes escalas

Se puede introducir el tensor esfuerzo – submalla \bar{T} con componentes,

$$T_{ij} = -\overline{\rho u_i u_j} + \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j, \quad (3.21)$$

el cual se puede dividir en sus partes isotrópica y desviador, la siguiente ecuación lo denota:

$$T_{i,j} = \underbrace{T_{ij} - \frac{1}{3} T_{ll} \delta_{ij}}_{\tau_{i,j}} + \frac{1}{3} T_{ll} \delta_{ij} \quad (3.22)$$

El término en llave se modela a partir de la aproximación de Boussinesq que considera que es función de una viscosidad turbulenta y de S_{ij} . Esta parte del

tensor, representa físicamente el efecto de las pequeñas escalas sobre las grandes.

Entonces, las ecuaciones (3.19) y ~~(3.20)~~ pueden ser leídas como,

$$\bar{\mathbf{F}}_i = \begin{pmatrix} \bar{\rho}\tilde{u}_i \\ \bar{\rho}\tilde{u}_1\tilde{u}_1 + (\bar{p} - \frac{1}{3}T_{ii})\delta_{i1} - \tau_{i1} - \overline{2\mu S_{i1}} \\ \bar{\rho}\tilde{u}_1\tilde{u}_2 + (\bar{p} - \frac{1}{3}T_{ii})\delta_{i2} - \tau_{i2} - \overline{2\mu S_{i2}} \\ \bar{\rho}\tilde{u}_1\tilde{u}_3 + (\bar{p} - \frac{1}{3}T_{ii})\delta_{i3} - \tau_{i3} - \overline{2\mu S_{i3}} \\ \overline{(\rho e + p)u_i} - \overline{2\mu u_j S_{ij}} - k \frac{\partial T}{\partial x_i} \\ \overline{\rho z_f u_i} - D \frac{\partial Z_f}{\partial x_i} \end{pmatrix} \quad (3.23)$$

y

$$\bar{\rho}e = \bar{\rho}C_v\tilde{T} + \frac{1}{2}\bar{\rho}(\tilde{u}_1^2 + \tilde{u}_2^2 + \tilde{u}_3^2) - \frac{1}{2}T_{ii} \quad (3.24)$$

El término T_{ij} , se puede despreciar o modelar. En este caso se desprecia a partir de una formulación elegante que fue propuesta por Comte & Lesieur (1997), a través de la introducción de una macro – presión y una macro – temperatura definida como,

$$\varpi = \bar{p} - \frac{1}{3}T_{ii} \quad (3.25)$$

y la macro – temperatura,

$$\vartheta = \tilde{T} - \frac{1}{2C_v\bar{\rho}}T_{ii} \quad (3.26)$$

La ecuación filtrada de estado (3.20) puede ser escrita como,

$$\varpi = \bar{\rho}R\vartheta + \frac{3\gamma - 5}{6}T_{ii} \quad (3.27)$$

La ventaja principal de esta ecuación es que podemos derivar un sistema cerrado de ecuaciones en las cuales el desconocido T_{ii} del tensor sub-malla no aparece

explícitamente más extenso. De hecho, puede ser demostrado que la energía total se escribe,

$$\overline{\tilde{\rho}e} = \overline{\rho} C_v \mathcal{G} + \frac{1}{2} \overline{\rho} \left(\tilde{u}_1^2 + \tilde{u}_2^2 + \tilde{u}_3^2 \right) \quad (3.28)$$

Además, para $\gamma = 1.4$, fue demostrado por Comte y Lesieur (1997) que se justifica completamente despreciar el segundo término del lado derecho de la ecuación (3.25). Podemos entonces escribir,

$$\varpi \approx \overline{\rho} R \mathcal{G} \quad (3.29)$$

Esto hace que ϖ sea calculable si $\overline{\rho}$ y \mathcal{G} son conocidas.

Al igual que en la ecuación de cantidad de movimiento, en la ecuación de energía se crea un nuevo termino que indica el flujo de calor sub-malla, denotado por Q , con componentes,

$$Q_i = -\overline{(\rho e + p)u_i} + (\overline{\rho \tilde{e}} + \varpi)u_i \quad (3.30)$$

La expresión exacta para los flujos filtrados entonces se convierte en,

$$\overline{\mathbf{F}}_i = \begin{pmatrix} \overline{\rho \tilde{u}_i} \\ \overline{\rho \tilde{u}_i \tilde{u}_1} + \varpi \delta_{i1} - \tau_{i1} - \overline{2\mu S_{i1}} \\ \overline{\rho \tilde{u}_i \tilde{u}_2} + \varpi \delta_{i2} - \tau_{i2} - \overline{2\mu S_{i2}} \\ \overline{\rho \tilde{u}_i \tilde{u}_3} + \varpi \delta_{i3} - \tau_{i3} - \overline{2\mu S_{i3}} \\ (\overline{\rho \tilde{e}} + \varpi) \tilde{u}_i - Q_i - \overline{2\mu u_j S_{ij}} - k \frac{\partial T}{\partial x_i} \\ \overline{\rho z_f u_i} - D \frac{\partial Z_f}{\partial x_i} \end{pmatrix} \quad (3.31)$$

El sistema descrito arriba se puede cerrar haciendo uso de los modelos sub-malla, comúnmente basados en una viscosidad turbulenta y en un Prandtl turbulento,

$$\tau_{ij} \approx \bar{\rho} \nu_t \tilde{S}_{ij} \quad (3.32)$$

$$Q_i \approx \bar{\rho} C_p \frac{\nu_t}{Pr_t} \frac{\partial \vartheta}{\partial x_i} \quad (3.33)$$

Los términos restantes no calculables son los términos de viscosidad molecular y difusivo, que se pueden considerar de menor importancia cuando el número de Reynolds es suficientemente grande. Por lo tanto simplemente se puede reemplazar ~~(3.29)~~ por,

$$\bar{\mathbf{F}}_i \approx \begin{pmatrix} \bar{\rho} \tilde{u}_i \\ \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_1 + \varpi \delta_{i1} - \tau_{i1} - \frac{2\mu S_{i1}}{\bar{\rho}} \\ \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_2 + \varpi \delta_{i2} - \tau_{i2} - \frac{2\mu S_{i2}}{\bar{\rho}} \\ \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_3 + \varpi \delta_{i3} - \tau_{i3} - \frac{2\mu S_{i3}}{\bar{\rho}} \\ (\bar{\rho} \tilde{e} + \varpi) \tilde{u}_i - 2(\mu + \rho \nu_t) \tilde{S}_{ij} \tilde{u}_j - \left[\bar{k} + \bar{\rho} C_p \frac{\nu_t}{Pr_t} \right] \frac{\partial \vartheta}{\partial x_i} \\ \overline{\rho z_f u_i} - D \frac{\partial Z_f}{\partial x_i} \end{pmatrix} \quad (3.34)$$

En donde $\bar{\mu}$ y \bar{k} son ligadas con ϑ a través de la relación de Sutherland (3.7), un número de Prandtl molecular constante es asumido $Pr = C_p \frac{\bar{\mu}(\vartheta)}{\bar{k}(\vartheta)} = 0.7$. Obsérvese

que uno de los aspectos notables de esta formulación es que el sistema LES se puede deducir fácilmente de las ecuaciones compresibles de Navier – Stokes originales con los cambios siguientes:

$$\begin{aligned} u_i &\rightarrow \tilde{u}_i, \quad \rho \rightarrow \bar{\rho}, \quad T \rightarrow \vartheta, \quad p \rightarrow \varpi, \\ e &\rightarrow \tilde{e}, \quad \mu \rightarrow \bar{\mu} + \bar{\rho} \nu_t, \quad k \rightarrow \bar{k} + \bar{\rho} C_p \frac{\nu_t}{Pr_t} \end{aligned}$$

Esto proporciona al código numérico un fácil uso para el LES sin modificaciones severas.

Las expresiones para v_t y Pr_t utilizadas en las siguientes simulaciones compresibles corresponden a los modelos incompresibles descritos en Métails y Lesieur (1996), la única diferencia es que aquí se utiliza un promedio de Favre, antes descrito. Nuestro modelo submalla es el modelo selectivo de la función de la estructura propuesto por David (1993), la viscosidad local del remolino, esta dada por,

$$v_t(x, \Delta, t) = C_{ssf} \Delta \sqrt{\tilde{F}_2(x, \Delta, t)} \quad (3.35)$$

Donde C_{ssf} puede ser expresado como función de la constante de Kolmogorov C_K : $C_{ssf} = f\left(C_K^{-\frac{3}{2}}\right)$. C_{ssf} toma el valor de 0.104 para $C_K = 1.4$. Δ se toma igual a $(\Delta x \Delta y \Delta z)^{\frac{1}{3}}$, donde Δx , Δy y Δz , son los tamaños de la malla locales en las tres direcciones espaciales.

$\tilde{F}_2(x, \Delta, t)$ es la función de estructura de segundo orden de la velocidad construida con el campo \tilde{u} . \tilde{F}_2 es calculado en el punto x con un promedio estadístico local de las diferencias de la velocidad de cuadro de los seis puntos más cercanos que rodean al punto x en la malla computacional. La interpolación se basó sobre la ley de $\frac{2}{3}$ de Kolmogorov que se usa para la función estructura de la velocidad.

Según lo propuesto por David (1993), la viscosidad turbulenta se considera nula cuando la turbulencia no es lo suficientemente tridimensional. El criterio para tres dimensiones es definido como sigue: considérese en un momento dado que el ángulo entre el vector de vorticidad en un punto dado de la malla y su medio aritmético de los seis puntos vecinos más cercanos. La viscosidad turbulenta se cancela en los puntos donde este ángulo es más pequeño que 20° . Finalmente, el número de Prandtl turbulento se toma igual a 0.6, con lo que cierra la ecuación de la energía.

El código numérico usa coordenadas generalizadas. La adaptación a las coordenadas generalizadas se realiza introduciendo una matriz Jacobiana que transforma una geometría compleja de malla no uniforme o geometría curvilínea, en un sistema de coordenadas Cartesiano (x, y, z) , dentro de una geometría ortogonal simple con malla uniforme en el sistema de coordenadas generalizadas (ξ_1, ξ_2, ξ_3) donde las ecuaciones se pueden resolver más fácilmente. Para este caso, simplemente consiste en una transformación de una malla no uniforme en el espacio físico (x, y, z) dentro de una malla uniforme en el espacio computacional (ξ_1, ξ_2, ξ_3) . Cada término en la matriz Jacobiana inversa (\mathbf{J}^{-1}) se expresa como funciones analíticas de las medidas $\frac{\partial x_i}{\partial \xi_j}$. Las medidas son introducidas y calculadas por el esquema interno de primer orden, entonces la matriz (\mathbf{J}) es calculada directamente de (\mathbf{J}^{-1}) .

La ecuación 3.1 se puede volver a escribir como,

$$\frac{\partial \hat{U}}{\partial t} + \frac{\partial \hat{F}}{\partial \xi_1} + \frac{\partial \hat{G}}{\partial \xi_2} + \frac{\partial \hat{H}}{\partial \xi_3} = \hat{S} \quad (3.36)$$

con

$$\left. \begin{aligned} \hat{U} &= \frac{U}{J}, \\ \hat{F} &= \frac{1}{J} \left[\left(\frac{\partial \xi_1}{\partial x_1} \mathbf{F} \right) + \left(\frac{\partial \xi_1}{\partial x_2} \mathbf{G} \right) + \left(\frac{\partial \xi_1}{\partial x_3} \mathbf{H} \right) \right], \\ \hat{G} &= \frac{1}{J} \left[\left(\frac{\partial \xi_2}{\partial x_1} \mathbf{F} \right) + \left(\frac{\partial \xi_2}{\partial x_2} \mathbf{G} \right) + \left(\frac{\partial \xi_2}{\partial x_3} \mathbf{H} \right) \right], \\ \hat{H} &= \frac{1}{J} \left[\left(\frac{\partial \xi_3}{\partial x_1} \mathbf{F} \right) + \left(\frac{\partial \xi_3}{\partial x_2} \mathbf{G} \right) + \left(\frac{\partial \xi_3}{\partial x_3} \mathbf{H} \right) \right], \\ \hat{S} &= \frac{1}{J} \mathbf{S}. \end{aligned} \right\} \quad (3.37)$$

J es el determinante de la matriz (\mathbf{J}) y U es función de las coordenadas cartesianas y del tiempo.

3.2.2 Esquema Numérico

El sistema en coordenadas generalizadas se resuelve por medio de una extensión del completo esquema explícito McCormack, de segundo orden en el tiempo y cuarto orden en el espacio, desarrollado por Gottlieb & Turkel (1976). Debe observarse que cuando se usa U tiende a ser reemplazada por \bar{U} definida por la ecuación (2.16) cuando la técnica LES es considerada. El esquema numérico es un esquema corrector – predictor definido en una dimensión por,

Predictor

$$U_j^{(1)} = U_j^{(n)} + \frac{1}{6} \lambda \left(-f_{j+2}^{(n)} + 8f_{j+1}^{(n)} - 7f_j^{(n)} \right) + (\delta t) S_j^{(n)}, \quad (3.38)$$

Corrector

$$U_j^{(n+1)} = \frac{1}{2} \left(U_j^{(n)} + \left(U_j^{(1)} \right) \right) + \frac{1}{12} \lambda \left(7f_{j-2}^{(1)} - 8f_{j-1}^{(1)} + f_j^{(1)} \right) + \frac{1}{2} (\delta t) S_j^{(1)}. \quad (3.39)$$

Los índices (n) , $(n+1)$ y (1) simbolizan respectivamente para los valores de la función al tiempo t , tiempo $t + \delta t$ y al paso – sub – tiempo. Obsérvese que las discretizaciones espaciales intermedias son esquemas no centrados de primer orden con un predictor adelantado (*upwind*) y un corrector atrasado (*downwind*). Como se especifica arriba el esquema resultante es de cuarto orden en el espacio.

La formulación generalizada en tres dimensiones se escribe:

Predictor

$$\begin{aligned} U_{i,j,k}^1 = & U_{i,j,k}^n - J_{i,j,k}^P \left[\frac{\Delta t}{\Delta \xi_1} \left[\frac{7}{6} \left(\hat{F}_{i+1,j,k}^n - \hat{F}_{i,j,k}^n \right) - \frac{1}{6} \left(\hat{F}_{i+2,j,k}^n - \hat{F}_{i+1,j,k}^n \right) \right] \right. \\ & + \frac{\Delta t}{\Delta \xi_2} \left[\frac{7}{6} \left(\hat{G}_{i+1,j,k}^n - \hat{G}_{i,j,k}^n \right) - \frac{1}{6} \left(\hat{G}_{i+2,j,k}^n - \hat{G}_{i+1,j,k}^n \right) \right] \\ & \left. + \frac{\Delta t}{\Delta \xi_3} \left[\frac{7}{6} \left(\hat{G}_{i+1,j,k}^n - \hat{G}_{i,j,k}^n \right) - \frac{1}{6} \left(\hat{G}_{i+2,j,k}^n - \hat{G}_{i+1,j,k}^n \right) \right] \right] \end{aligned} \quad (3.40)$$

Corrector

$$\begin{aligned}
 U_{i,j,k}^{n+1} = & \frac{1}{2} [U_{i,j,k}^1 + U_{i,j,k}^n] - \frac{1}{2} J_{i,j,k}^C \left[\frac{\Delta t}{\Delta \xi_1} \left[\frac{7}{6} (\hat{F}_{i,j,k}^1 - \hat{F}_{i-1,j,k}^1) - \frac{1}{6} (\hat{F}_{i-1,j,k}^1 - \hat{F}_{i-2,j,k}^1) \right] \right. \\
 & + \frac{\Delta t}{\Delta \xi_2} \left[\frac{7}{6} (\hat{G}_{i,j,k}^1 - \hat{G}_{i-1,j,k}^1) - \frac{1}{6} (\hat{G}_{i-1,j,k}^1 - \hat{G}_{i-2,j,k}^1) \right] \\
 & \left. + \frac{\Delta t}{\Delta \xi_3} \left[\frac{7}{6} (\hat{G}_{i,j,k}^1 - \hat{G}_{i-1,j,k}^1) - \frac{1}{6} (\hat{G}_{i-1,j,k}^1 - \hat{G}_{i-2,j,k}^1) \right] \right] \quad (3.41)
 \end{aligned}$$

3.3 Modelo de Combustión por medio de Fracción de Mezcla [7]

Aunque ya ha sido programado un modelo de combustión, en este trabajo no fue utilizado. Sin embargo dicho modelo se utilizará en la continuación del trabajo.

En la técnica LES no se posee un mallado lo suficientemente fino para poder resolver la difusión entre el combustible y el oxígeno, por lo cual se emplea un modelo de combustión de Fracción de Mezcla

El modelo de combustión de Fracción de Mezcla se basa en asumir que los fenómenos de convección y radiación para grandes escalas pueden ser simulados de forma directa, no obstante los procesos físicos ocurren en pequeñas longitudes y en cortas escalas de tiempo, por lo cual se representan de manera aproximada. La naturaleza de las aproximaciones empleadas es necesariamente una función de la resolución espacial y temporal en los límites de cálculo, tal como nuestro entendimiento del problema.

La rapidez de los procesos químicos que controlan la liberación de energía de combustión, a menudo se desconoce para los incendios. Debido a los recursos actuales de la computación, obtener una descripción detallada de los procesos de combustión queda fuera de nuestro alcance, incluso si se llegará a conocer la resolución espacial y temporal en los límites impuestos. De este modo, el modelo adoptado aquí se basa en suponer que la combustión es controlada por una mezcla. Esto implica que todos los elementos involucrados en la combustión son

capaces de ser descritos en términos de una fracción de mezcla $Z_f(x,t)$. La fracción de mezcla es una cantidad conservada que representa la fracción de materia en un punto dado en el flujo de combustible. Las relaciones entre la fracción de la masa de cada elemento y la fracción de mezcla se conocen como "relaciones de estado". La relación de estado de la fracción de masa del oxígeno proporciona la información necesaria para calcular la velocidad del consumo local de la masa del oxígeno. La forma de la relación de estado surge de la teoría clásica de la difusión laminar en la flama, la cual es en ciertas partes una función lineal. Esto lleva a un modelo de "frente de flama", donde la flama es una superficie bidimensional incrustada en un espacio tridimensional. La velocidad local del calor liberado se calcula a partir del consumo local de oxígeno en la superficie de la flama, en el supuesto de que la tasa de liberación de calor es directamente proporcional a la tasa de consumo de oxígeno y a su vez independiente del carburante se trate. Esta relación, originalmente fue propuesta por Huggett [8], dicha relación es la base de la calorimetría por oxígeno.

Se comenzará con la relación más general de la reacción de combustión



Los números ν_i son los coeficientes estequiométricos de todo el proceso de combustión, las reacciones entre el combustible "F" con el oxígeno "O" producen un número de productos "P". La ecuación estequiométrica (3.42) implica que la tasa de consumo de masa para el combustible y la oxidación esta relacionada por:

$$\frac{\dot{m}_F}{\nu_F M_F} = \frac{\dot{m}_O}{\nu_O M_O} \quad (3.43)$$

La fracción de mezcla Z_f se define como:

$$Z_f = \frac{sY_F - (Y_O - Y_O^\infty)}{sY_F + Y_O^\infty} ; s = \frac{\nu_O M_O}{\nu_F M_F} \quad (3.44)$$

Para este trabajo, la fracción de mezcla varía desde $Z_f = 1$ en una región que contiene únicamente combustible hasta $Z_f = 0$ donde la fracción de masa del oxígeno toma su valor ambiente Y_o^∞ . Note que Y_F^l es la fracción de combustible en el flujo de combustión. Las cantidades M_F y M_o son los pesos moleculares del combustible y del oxígeno respectivamente. La fracción de mezcla satisface así la ley de conservación

$$\rho \frac{DZ_f}{Dt} = \nabla \cdot \rho D \nabla Z_f \quad (3.45)$$

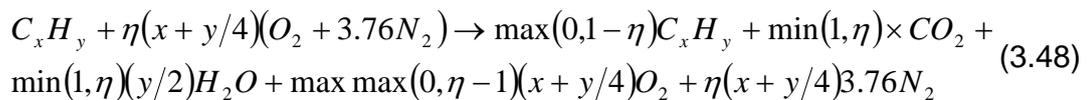
obtenida de una combinación lineal de las ecuaciones de la conservación del combustible y del oxígeno. El término Z_{Fast} nos indica la suposición que la reacción química es “rápida” lo cual significa que ocurren las reacciones que consumen al combustible y al oxidante tan velozmente que el combustible y el oxidante no pueden coexistir. El requisito de que el combustible y el oxidante desaparecen simultáneamente define una llama superficie como:

$$Z_f(x, t) = Z_{Fast} \quad ; \quad Z_{Fast} = \frac{Y_o^\infty}{sY_F^l + Y_o^\infty} \quad (3.46)$$

La suposición de que el combustible y el oxidante no pueden coexistir lleva a la “relación de estado” entre la fracción Y_o y Z de la masa del oxígeno

$$Y_o(Z_f) = \begin{cases} Y_o^\infty (1 - Z_f/Z_{Fast}) & Z_f < Z_{Fast} \\ 0 & Z_f > Z_{Fast} \end{cases} \quad (3.47)$$

Las relaciones de ambos reactivos y productos pueden ser derivadas considerando la reacción ideal siguiente de un combustible de hidrocarburo:



Aquí η es un parámetro que va desde 0 (todo el combustible sin el oxígeno) al infinito (todo el oxígeno sin el combustible). Una correspondencia entre η y Z_f se obtiene mediante la aplicación de la definición de Z_f la ecuación. (3.44) a la izquierda de la ecuación. (3.48). Las fracciones de masa de los productos de la reacción infinitamente rápida (incluyendo el exceso de combustible u oxígeno) pueden obtenerse en el lado derecho de la ecuación. (3.48). Una expresión para la tasa local de liberación de calor se puede derivar de las ecuaciones de la conservación y de la relación de estado para el oxígeno. El punto de partida es la relación de Huggett ^[8] para la velocidad de liberación de calor como una función del consumo de oxígeno

$$\dot{q}''' = \Delta H_0 \dot{m}_0''' \quad (3.49)$$

En este sentido, ΔH_0 es la rapidez del calor liberado por unidad de masa de oxígeno consumido, entalpía de combustión, (alrededor de 13100 kJ/kg para la mayoría de los combustibles). La ecuación de la conservación de la masa del oxígeno

$$\rho \frac{DY_0}{Dt} = \nabla \cdot \rho D \nabla Y_0 + \dot{m}_0''' \quad (3.50)$$

puede transformarse en una expresión local para la rapidez de liberación de calor utilizando ecuación de conservación para la fracción de mezcla, ecuación (*.45) y el estado de relación de oxígeno $Y_0(Z_f)$.

$$-\dot{m}_0''' = \nabla \cdot \left(\rho D \frac{dY_0}{dZ_f} \nabla Z_f \right) - \rho D \nabla^2 Z_f = \rho D \frac{d^2 Y_0}{dZ_f^2} |\nabla Z_f|^2 \quad (3.51)$$

Ninguna de estas expresiones locales para la velocidad del consumo de oxígeno son particularmente convenientes para aplicarse numéricamente debido a la discontinuidad de $Y_0(Z_f)$ en $Z_f < Z_{Fast}$. Sin embargo, una expresión de la velocidad de consumo de oxígeno por unidad de superficie del frente de flama se

puede derivar de la ecuación (3.51) mediante la integración de \dot{m}_0''' sobre un pequeño volumen que corta al frente de flama.

Trabajando con los términos centrales de la ecuación (3.51) y señalando que dY_0/dZ_f es constante en un lado del frente de flama y cero por el otro, la integral del volumen se puede reescribir como integral de la superficie sobre el frente de flama aplicando el teorema de la divergencia y considerando la cancelación de algunos términos en el límite exterior del volumen de control. En este punto, es más conveniente expresar la rapidez del consumo de oxígeno en unidades de masa por unidad de tiempo por unidad de área superficie del frente de flama:

$$-\dot{m}_0''' = \frac{dY_0}{dZ_f} \bigg|_{Z_f < Z_{Fast}} \rho D \nabla Z_f \cdot n \quad (3.52)$$

En el algoritmo numérico, la rapidez de liberación local de calor es calculada primero localizando el frente de flama, posteriormente se calcula la rapidez de liberación local de calor por unidad de superficie, finalmente se distribuye esta energía en las celdas de la malla cortadas por el frente de flama.