



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE INGENIERÍA

**Análisis numérico de un chorro de
nitrógeno: supercrítico y transcrito**

TESIS

Que para obtener el título de

INGENIERO MECÁNICO

P R E S E N T A

MÉNDEZ QUERO JORGE

DIRECTOR DE TESIS

Dr. CHRISTIAN LAGARZA CORTÉS



Ciudad Universitaria, CDMX., 2024

RESUMEN

El estudio de los chorros (en especial los de densidad variable) ha cobrado gran importancia en las últimas décadas debido a su utilidad en diferentes campos de la ingeniería, por lo que el analizarlo desde distintas áreas (experimental, computacional, etc.) da paso a tener un mejor entendimiento, así como de su funcionalidad. En esta tesis se estudia el comportamiento del núcleo denso y potencial de los chorros de densidad variable, la zona de autosimilaridad además de las características de la turbulencia en las zonas mencionadas anteriormente. El estudio se realiza por medio de una simulación numérica de dos casos que tienen como base los experimentos de Mayer. Para la descripción de la turbulencia se utiliza la técnica LES, mientras que para obtener el comportamiento de un gas real se hace uso de la ecuación de estado de Soave-Redlich-Kwong y los Métodos de Chung para las propiedades de transporte. Con los resultados obtenidos se puede concluir que los contornos de densidad y temperatura no evolucionan de la misma forma, aunque estén directamente relacionados para ambos casos y esto se comprueba al observar que rompen en diferentes posiciones axiales. El núcleo denso rompe primero en comparación con el potencial para ambos casos). Para el caso transcrito, el núcleo denso rompe 4D aguas abajo del núcleo denso para el caso supercrítico, esto se debe a la aparición y efecto del escudo térmico en el primer caso. La turbulencia de la región del cortante, previo a la región de pseudosimilaridad es altamente anisotrópica.

ABSTRACT

The study of variable-density jets has become increasingly important in recent decades due to their wide-ranging applications in engineering. Analyzing these jets from various perspectives, including experimental and computational approaches, is crucial for gaining a better understanding of their behavior and practical applications. This thesis examines the behavior of the dense and potential core of variable density jets, as well as the self-similarity zone and the characteristics of turbulence within these zones. The study is conducted through numerical simulations of two cases based on Mayer's experiments. The Large Eddy Simulation (LES) technique is used to describe turbulence, while the behavior of a real gas is determined using the Soave-Redlich-Kwong equation of state and the Chung methods for transport properties. The results indicate that the density and temperature contours do not evolve in the same way, despite being directly related in both cases, transcritical and supercritical. It is observed that they break at different axial positions, with the dense core breaking first compared to the potential core in both cases again. In the transcritical case, the dense core breaks 4D downstream of the dense core for the supercritical case, due to the appearance and effect of the heat shield. Furthermore, the turbulence in the shear region before the pseudosimilarity region is highly anisotropic.

AGRADECIMIENTOS

Esta tesis está dedicada a todas las personas que estuvieron ahí, que confiaron en mí, no dejaron que me diera por vencido y me motivaron a seguir adelante: Jorge, Juanita, Erika, Aura, Diana, Raúl y Gabriel.

GRACIAS POR SU APOYO INCONDICIONAL.

Agradezco el apoyo brindado a este trabajo por el Instituto de Ingeniería de la UNAM, particularmente al Dr. Martín Salinas Vázquez y al Dr. Christian Lagarza Cortés. El cómputo numérico realizado fue llevado a cabo en el Clúster Tonatiuh (Instituto de Ingeniería, UNAM).

ÍNDICE

Resumen.....	2
Abstract	2
Agradecimientos	3
Capítulo 1. Introducción	6
1.1 Chorros.....	8
1.2 Fronteras y medio circundante.....	10
1.3 Tipos de chorros.....	11
1.4 Fluido supercrítico	11
1.5 Chorro en estado supercrítico.....	14
1.6 Objetivos	16
Capítulo 2. ECUACIONES DE GOBIERNO Y MÉTODOS NUMÉRICOS.....	17
2.1 Métodos de cálculo para la simulación.....	18
2.2 Simulación numérica de grandes escalas (LES).....	19
2.3 Métodos numéricos.....	19
2.4 Mapas de Anisotropía Invariante (AIM).....	20
Capítulo 3. Propiedades Térmicas y de Transporte	22
3.1 Ecuación de estado.....	23
3.2 Método de Cardano ²¹	25
3.3 Propiedades termodinámicas	28
3.4 Propiedades conservativas a primitivas (P, T) ^{7, 22}	30
3.5 Propiedades de transporte.....	31
3.6 Viscosidad dinámica (μ)	32
3.7 Conductividad térmica (λ).....	33
Capítulo 4. Configuración, condiciones iniciales y de frontera.....	35
4.1 Experimento de Mayer.....	35
4.2 Configuración numérica	36
4.3 Condiciones de frontera ²⁵	37
4.4 Condiciones empleadas y consideraciones especiales en la simulación	39
Capítulo 5. Resultados	40
5.1 Núcleo potencial y denso	41
5.2 Pseudosimilaridad	47
5.3 Mapas de anisotropía invariante	48

Capítulo 6. Conclusiones.....	50
Apéndice.....	51
A.1 Cálculo de la densidad	51
A.2 Propiedades termodinámicas de un gas real.....	52
A.2.1 Energía Interna	52
A.2.2 Capacidad térmica a volumen constante	55
A.2.3 Ecuación polinómica del TRC (Thermodynamics Research Center)	56
A.2.4 Capacidad térmica a presión constante	57
A.2.5 Velocidad del sonido	59
A.3 Propiedades de transporte.....	59
A.3.1 Viscosidad.....	60
A.3.2 Conductividad Térmica	63
Referencias.....	66

CAPÍTULO 1. INTRODUCCIÓN

Los fluidos son una parte fundamental de la vida cotidiana, estos se presentan desde el aire que respiramos, las cascadas, ríos, lagos, el fluido transportado en tuberías, hasta el combustible empleado para el funcionamiento de automóviles, barcos, entre otros. Es por esta razón que el área encargada del estudio del comportamiento de los fluidos y sus propiedades toma relevancia, es decir, la mecánica de fluidos.

La mecánica de fluidos se define como la rama de la física que estudia los fluidos aplicando los principios de la mecánica clásica. Esta área se encarga de estudiar principalmente los fluidos bajo dos condiciones, en reposo (hidrostática) y en movimiento (fluidodinámica). La última condición, reconoce tres regímenes importantes (**Fig. 1**), los cuales son: laminar, transición y turbulento. En el primero, el fluido fluye de forma ordenada en capas o láminas paralelas sin interrupción o cruzamiento entre ellas (debido principalmente al efecto viscoso); mientras que el flujo en transición ocurre cuando una perturbación comienza a alterar el movimiento ordenado del flujo intermitentemente. Desde luego, las propiedades del fluido y del flujo deben ser adecuadas para este cambio (principalmente a un aumento de la velocidad, reduciendo el efecto en la viscosidad). Así, el flujo comienza a inestabilizarse presentando indicios de movimientos desordenados. Cuando la perturbación vuelve al flujo lo suficientemente inestable, deja de ser amortiguada, esta crece y eventualmente lleva al flujo a tener un comportamiento altamente desordenado, iniciando el llamado régimen de flujo turbulento [1]. El criterio principal para identificar de mejor manera que tipo de flujo se tiene, es un número adimensional que relaciona las propiedades del flujo y del fluido (densidad, velocidad, longitud característica y viscosidad), todas estas amalgamadas en dos términos, fuerzas inerciales y fuerzas viscosas, es decir, el número de Reynolds (Re).

$$Re = \frac{\text{Fuerzas de Inercia}}{\text{Fuerzas Viscosas}} = \frac{\rho UL}{\mu}$$

Donde ρ , es la densidad, U es la velocidad promedio, L es una longitud característica del flujo o superficie que interactúa con el flujo y μ es la viscosidad. Para flujos internos, como ductos y tuberías, se tiene el flujo laminar para $Re < 2000$, mientras que para el flujo turbulento $Re > 4000$ y para el caso de la transición los valores se encuentran en $2000 < Re < 4000$ [2]. Para flujos externos, como fenómenos de capa límite, el criterio ingenieril para flujo turbulento es de $Re > 500\,000$.

De los tipos de fluidos que se presentaron, el más complicado, desafiante y aún sin resolver es el turbulento; según Shoberi [4] esto se debe a la naturaleza del comportamiento de este flujo, que es irregular, inestable, caótico y sufre variaciones aleatorias espaciotemporales. Al mismo tiempo, es el más estudiado no solo por ser el que se encuentra normalmente en la naturaleza, sino también por las ventajas que tiene sobre los demás, por ejemplo, la efectividad para transportar y mezclar

materia, cantidad de movimiento y energía (en forma de calor) de manera más efectiva y rápida que el del tipo laminar [4, 5].

Este tipo de flujo puede ser estudiado dependiendo de las características del flujo al interactuar o no con una superficie. Al interactúa con una superficie, el estudio hace énfasis en el efecto del esfuerzo cortante en la pared sobre la turbulencia (turbulencia de pared) [4]. Cuando no está confinado por paredes, no hay una superficie o esta se encuentran a una distancia donde no afectan el desarrollo del flujo, se llama turbulencia libre [4]. En la **Fig. 1**, se observa que el segundo caso se divide en tres tipos (chorros, estelas y capas de mezcla), de los que el de mayor relevancia para este trabajo es el de los chorros.

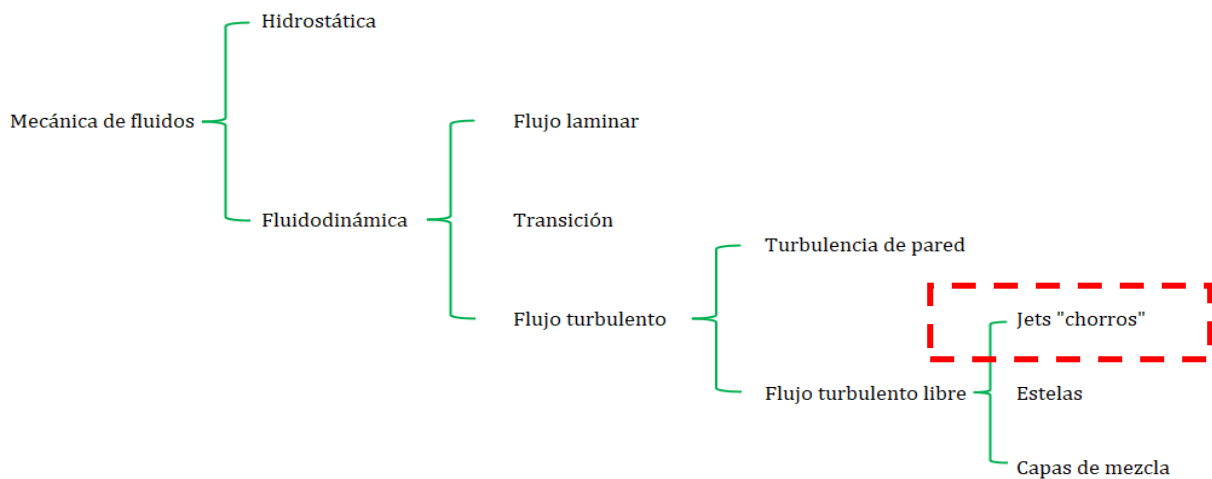


Figura 1. Ramas de la mecánica de fluidos y temas de estudio.

Pope (2000) [5] define a un chorro como un fluido newtoniano que continuamente fluye a través de una boquilla de diámetro d que produce un perfil de velocidad en forma de sombrero de copa. En la **Fig. 2a**, se muestra un ejemplo de este perfil, donde r/D representa la posición radial normalizada por el diámetro de inyección y u/U_c el valor normalizado de la velocidad longitudinal promedio (u) respecto a la velocidad central (U_c). El perfil de velocidad cambia en dirección longitudinal mientras que el ancho b aumenta en dirección lateral o radial, como se observa en la **Fig. 2b**. Otro aspecto importante es que en los límites del chorro existe un intercambio de masa, momento y energía con el fluido de los alrededores causando una mezcla parcial de estos [4].

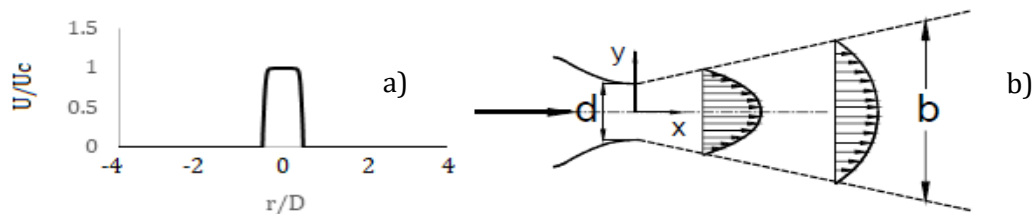


Figura 2. Ejemplo del perfil de velocidad del tipo sombrero de copa a) y del comportamiento de un chorro b).

En las últimas décadas se han realizado varios trabajos estudiando este tipo de turbulencia, analizando desde que tipo de efectos tiene el uso de diferentes tipos de boquillas (circular, cuadrada, triangular, etc.), las diferentes estructuras formadas desde la inyección del chorro hasta su rompimiento, su comportamiento dependiendo del estado de agregación (líquido o gas), entre otros. Actualmente se pueden encontrar un sinnúmero de aplicaciones en la ingeniería que van desde el fluido descargado de un orificio, el agua saliendo del difusor en una turbina, el gas caliente saliendo del escape de un motor o el combustible usado en los cohetes de propulsión [4], de ahí la importancia del entendimiento del chorro como flujo turbulento libre.

1.1 Chorros

El chorro, como flujo cortante libre, ha sido un tema de estudio importante en el último siglo (principalmente por su utilidad en ciertas áreas de la ingeniería) provocando un desarrollo no solo teórico, sino también experimental y computacional. Este apartado tiene como objetivo exponer el conocimiento adquirido sobre este fenómeno del flujo. El más simple o común es el chorro redondo sin algún tipo de efecto termo-físico o químico (p.ej. variación de la densidad), que es inyectado en un medio inactivo y sin modificaciones geométricas a la boquilla de inyección [6].

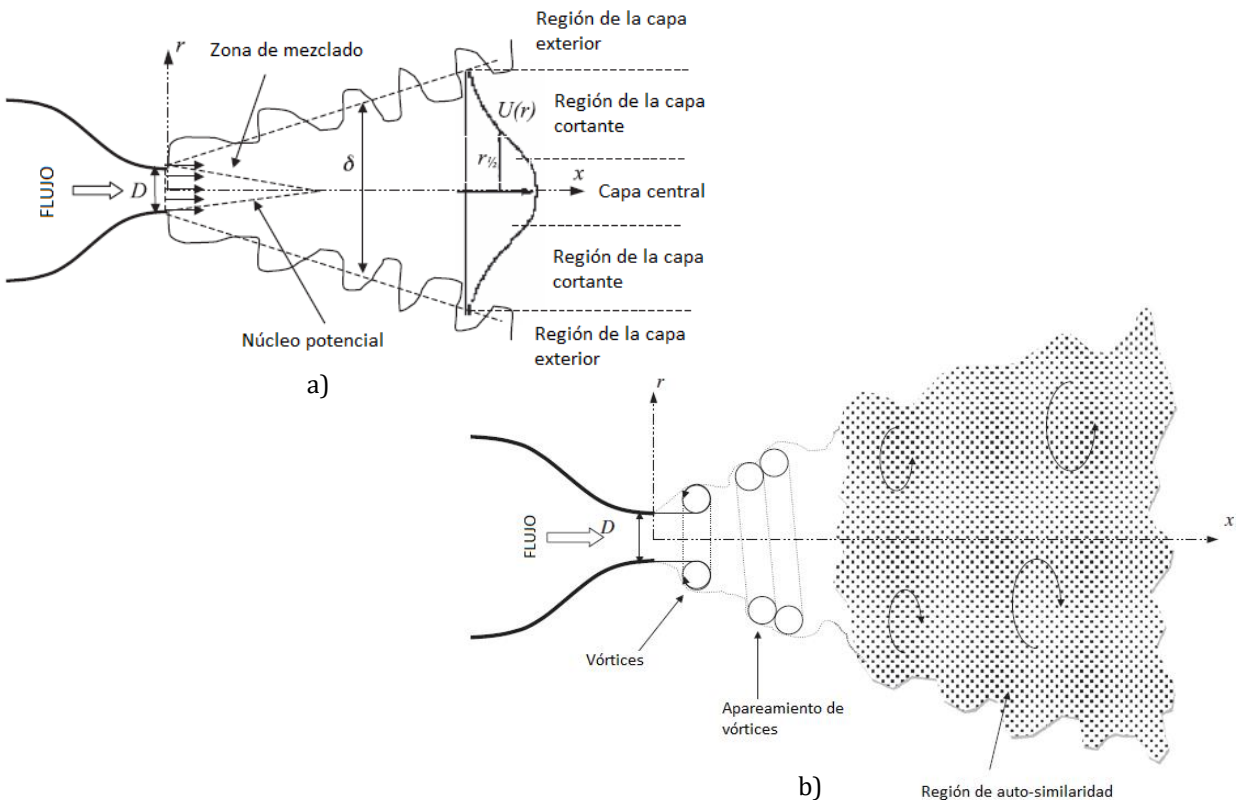


Figura 3. Localización de las diferentes zonas del chorro además de puntos importantes [6].

Ball et al. (2012) [6] menciona que el chorro tiene como origen la boquilla y arrastra el fluido del medio circundante hacia el cuerpo principal del chorro propagándose de forma gradual en dirección radial hasta antes de convertirse en un entorno inactivo. A pesar de que el desarrollo del chorro aguas abajo depende de las condiciones iniciales y de frontera, es posible desarrollar un sistema coordinado genérico que puede ser aplicado a la mayoría de los chorros con las características antes mencionadas. En la dirección radial se divide en tres partes importantes [6] las cuales son la capa de línea central, la capa cortante y la capa exterior. El borde intrincado entre el medio en reposo y el chorro de alta vorticidad representa la región de capa cortante, después de esta parte se encuentra la capa exterior.

En la dirección axial existen también tres regiones importantes: el campo cercano, el intermedio y el lejano, cada una de estas con sus propias características y estructuras. El campo cercano queda definido por el núcleo potencial que se observa en la **Fig. 3a**. En esta región el flujo se establece, se presenta el perfil de velocidad de sombrero de copa y se encuentra con la zona de mezclado. Es aquí donde se tiene el inicio de la inestabilidad llamada de Kelvin-Helmholtz, que dará lugar a la transición de la turbulencia. Cabe resaltar que en el núcleo potencial las condiciones iniciales de inyección como densidad (ρ_{in}), concentración (C_{in}), velocidad (U_{in}) y temperatura (T_{in}) se mantienen constantes [7]. En el caso de un chorro redondo simple se considera que el fluido inyectado y el ambiente receptor son de la misma especie química y presentan la misma temperatura. La región del núcleo potencial se puede encontrar usualmente en los primeros diámetros, $0 \leq x/D_{in} \leq 7$ donde D_{in} representa el diámetro de inyección y "x" la distancia axial desde la boquilla. Los vórtices creados gracias a la inestabilidad inicial en el origen del chorro se encuentran localizados en la capa cortante (o zona de mezcla) como se observa en la **Fig. 3b** y son llamados vórtices de anillos o anulares [7]. Algunas ocasiones, dichos vórtices pueden unirse o aparearse, pero depende de las condiciones iniciales (las cuales afectan a todo el flujo). El campo intermedio o región de transición se encuentra entre los $7 \leq x/D_{in} \leq 70$. Esta zona es de las más importantes debido a que aquí se desarrolla la mayor parte del proceso de mezclado, pero es de las menos estudiadas. El campo lejano se localiza en $x/D_{in} > 70$ y se conoce también como la región de auto-similaridad [7]. Esto se debe a que los perfiles de velocidad axial promedio, en dirección radial, son independientes de la posición axial a través de una adecuada adimensionalización. El flujo en este campo se autoconserva y se considera que esta en equilibrio.

1.2 Fronteras y medio circundante

Un aspecto importante que se debe tomar en cuenta en los chorros es la configuración o el tipo de interacción que tendrá con el medio circundante y sus fronteras físicas, ya que pueden afectar el desarrollo del chorro de manera importante. Dos de estas interacciones pueden ser el confinamiento o el coflujo.

Cuando se habla acerca del confinamiento, se refiere a la pared o paredes que se encuentran de forma lateral al inyector. Así, existen tres tipos de casos: el chorro libre, en este caso es inyectado en un medio sin paredes que limiten lateralmente; el semiconfinado, donde el chorro pasa a través de una superficie plana o pared (no confundir con chorro de pared); y, por último, el confinado, donde el medio se encuentra encerrado por superficies sólidas. En este caso, se puede considerar débil o fuerte dependiendo de la relación que se tenga de diámetros D/D_{in} . Donde D representa el diámetro exterior de la sección transversal de las paredes y D_{in} representa el diámetro del inyector. Para relaciones $D/D_{in} < 11$, se considera un confinamiento fuerte y para relaciones mayores se considera débil [7].

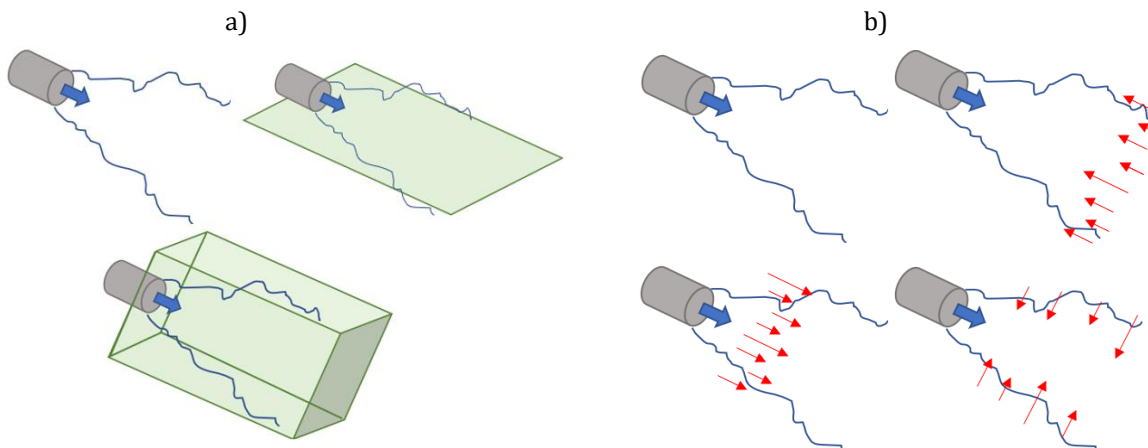


Figura 4. Diferentes configuraciones de confinamiento (a) y coflujo (b), las cuales pueden combinarse.

En cuanto al medio circundante existen dos posibilidades ya que este puede estar en reposo o en movimiento. A su vez, cuando se encuentra en movimiento puede clasificarse dependiendo de la dirección que tenga respecto a la dirección principal del chorro, la cual puede ser igual, contraria o cruzada. La velocidad de este coflujo puede ser mayor, menor o igual respecto a la velocidad promedio de inyección del chorro. La combinación de todas estas disposiciones da lugar a varias configuraciones de estudio.

1.3 Tipos de chorros

Después de la breve descripción de las zonas y aspectos importantes, cabe resaltar que existe una gran variedad de chorros. Esta variedad depende de la geometría de la boquilla con la que el fluido es inyectado, siendo el más usado el de forma circular, pero también puede ser triangular, cuadrado, etc. También, pueden variar las condiciones del fluido inyectado o hasta del medio en el que se inyecta el chorro. Estas opciones dan paso a chorros de diferentes características, como son especie química, temperatura o estado de agregación [7], entre otros. Cada uno de estos chorros presenta características, zonas, fenómenos o estructuras propias por lo que es importante el estudiarlos por separado. En este trabajo, el tipo de chorro en el que se enfocará es el llamado chorro de densidad variable por temperatura, es decir, el fluido inyectado y el fluido receptor son de la misma especie química, pero de diferente temperatura dando lugar a la diferencia de densidades. Además de esta particularidad anterior, las condiciones de presión y temperatura se encuentran por encima de la campana de saturación, por encima del punto crítico. Si bien el nombre propio del fenómeno es chorro de densidad variable por temperatura, este tipo de chorros, dada su ubicación en el diagrama de fase T-v se conoce como chorros en estado supercrítico.

1.4 Fluido supercrítico

Un fluido supercrítico se define como aquella sustancia donde sus valores de presión y temperatura se encuentran por encima de su presión y temperatura crítica [7, 8], estos valores varían dependiendo de cada sustancia, véase **Tab. 1**. A partir de estos valores se habla de presiones y temperaturas altas.

Tabla 1. Propiedades críticas

	Tc [K]	Pc [MPa]
Agua	647.4	22.12
Dióxido de azufre	430.7	7.88
Dióxido de carbono	304.2	7.39
Oxígeno	154.8	5.08
Nitrógeno	126.2	3.39
Hidrógeno	33.3	1.30
Helio	5.3	0.229

En la **Fig. 5** se puede observar que los tres estados de la materia (sólido, líquido y gaseoso) del nitrógeno. Cada región se encuentra separada por una curva continua. La fase líquida y gaseosa se encuentran divididas por la línea de coexistencia líquido-gas hasta que se llega al punto crítico, a

partir de ahí, se caracteriza por la inexistencia de una interfase líquido-gas dando paso a que las fases se hagan indistinguibles y se considere una sustancia monofásica [7, 8]. En esta región se presentan en la sustancia tanto propiedades de los líquidos (densidad, solubilidad), como de los gases (viscosidad, difusividad) [7]. En la cercanía de este punto crítico, el nitrógeno con pequeñas variaciones de la temperatura o presión presenta cambios significativos en distintas propiedades como lo son la capacidad térmica específica, difusividad, entre otras; en la Fig. 6 se observa que a las presiones de 3 y 4 [MPa] la capacidad térmica específica aumenta de manera considerable al momento de llegar a la temperatura crítica, esto causa que en este punto, se necesite una gran cantidad de energía para aumentar la temperatura del fluido en comparación con las otras presiones de 8 y 12 [MPa]. Conforme la presión y la temperatura aumentan y se alejan del punto crítico, estos cambios en las propiedades se hacen menos pronunciados como se observa en la Fig. 6.

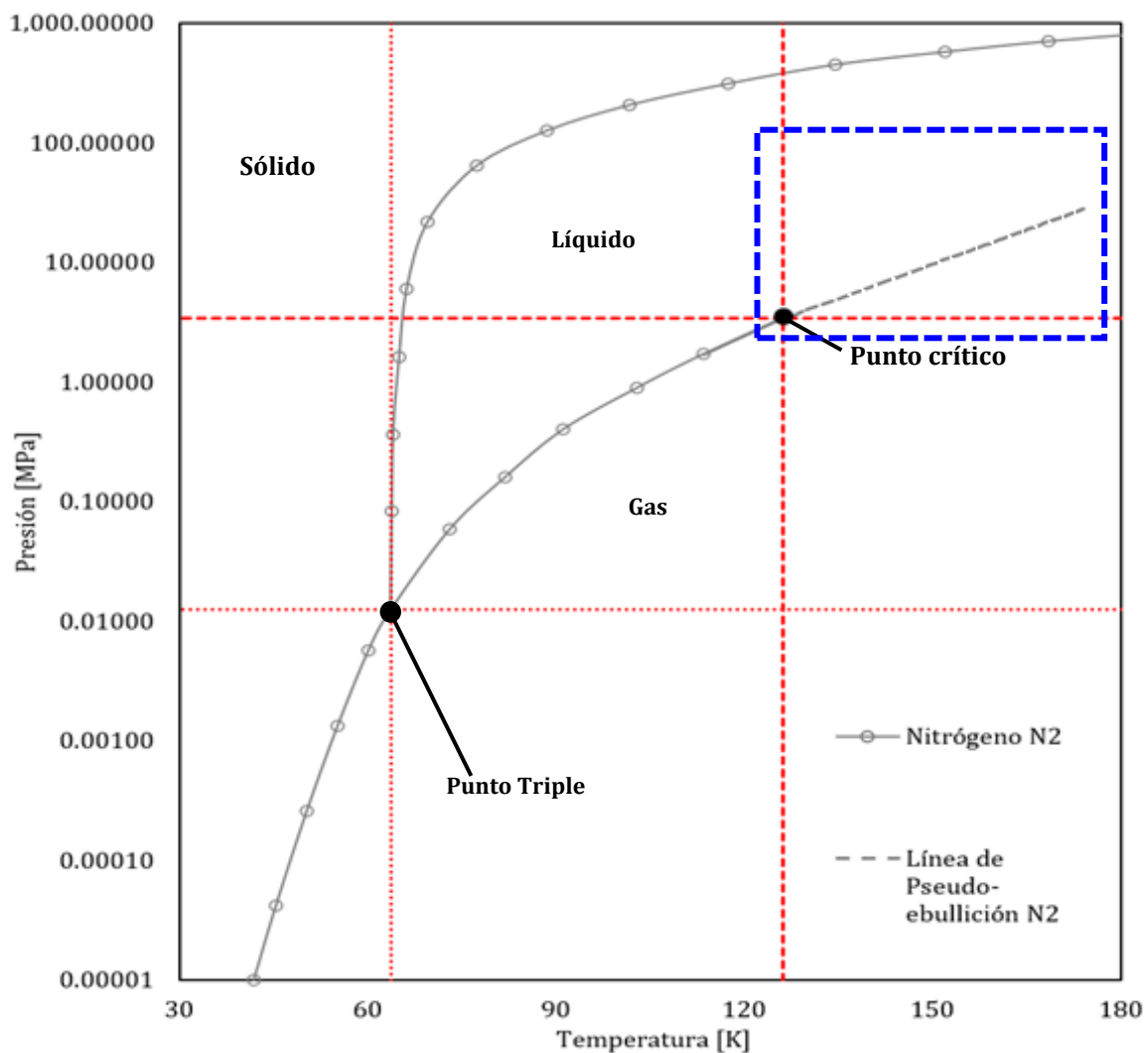


Figura 5. Diagrama de fase del nitrógeno (N₂) que muestra el punto triple (T=63.7 [K] Y P=0.0125 [MPa]), las fases y el punto crítico (T=126.2 [K] y P=3.3958 [MPa]). El recuadro, en su vértice superior izquierdo marca el inicio de la región supercrítica.

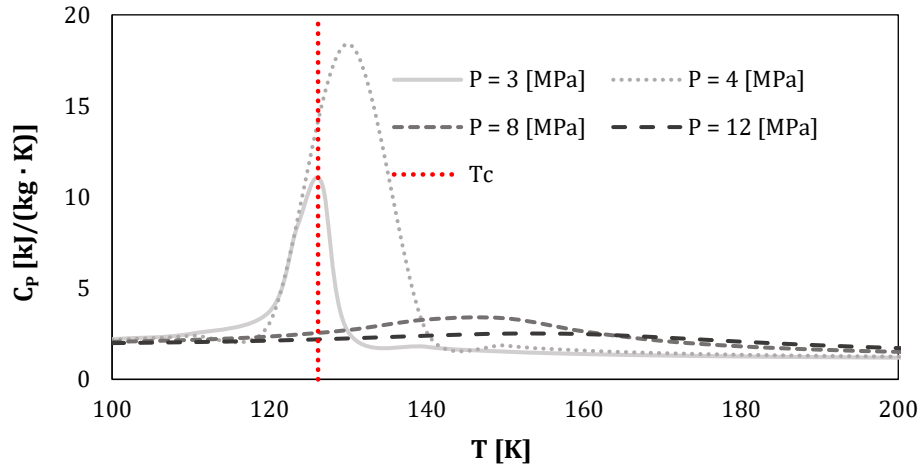


Figura 6. Curvas de capacidad térmica específica a presión constante vs temperatura del nitrógeno.

La existencia de este tipo de fluidos se reconoce desde hace más de cien años, a pesar de esto, la aplicación de este tipo de fluidos en diversas áreas lleva apenas unas cuantas décadas. La primera persona en revelar este estado, a través de la experimentación, fue el Barón Charles Cagniard de la Tour en el siglo XIX [7]. En los 50's se empezó a surgir la idea de emplear agua en condiciones supercríticas en la industria termo-energética. Esto con la finalidad de mejorar los procesos y así obtener un aumento de la eficiencia y potencia véase **Fig. 7**.

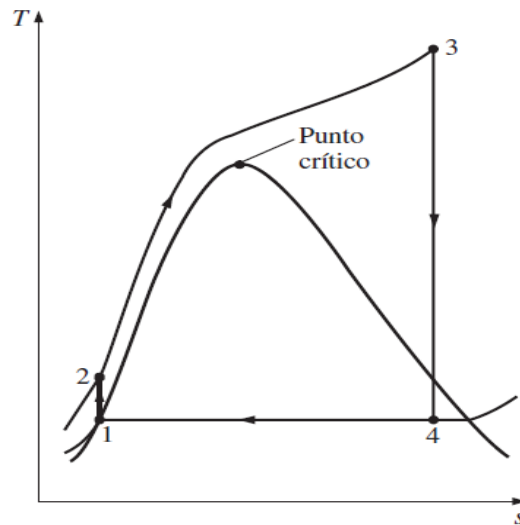


Figura 7. Diagrama T-s del ciclo Rankine. En este ciclo, el fluido de trabajo es llevado por encima de su temperatura crítica para mejorar eficiencias.

A finales de esta década comenzaron las investigaciones para su uso en plantas nucleares [8]. Otras aplicaciones de este tipo de fluidos se encuentran desde el procesado de metales, obtención de

cristales, entre otras. Actualmente una de las razones principales de tener un mejor entendimiento del comportamiento de los fluidos bajo condiciones supercríticas radica en el diseño y buen funcionamiento de las cámaras de combustión en los equipos como propulsores de combustible líquido, particularmente, de líquido criogénico. El comportamiento de los fluidos supercríticos trae consigo grandes retos para los estudios tanto experimentales como numéricos.

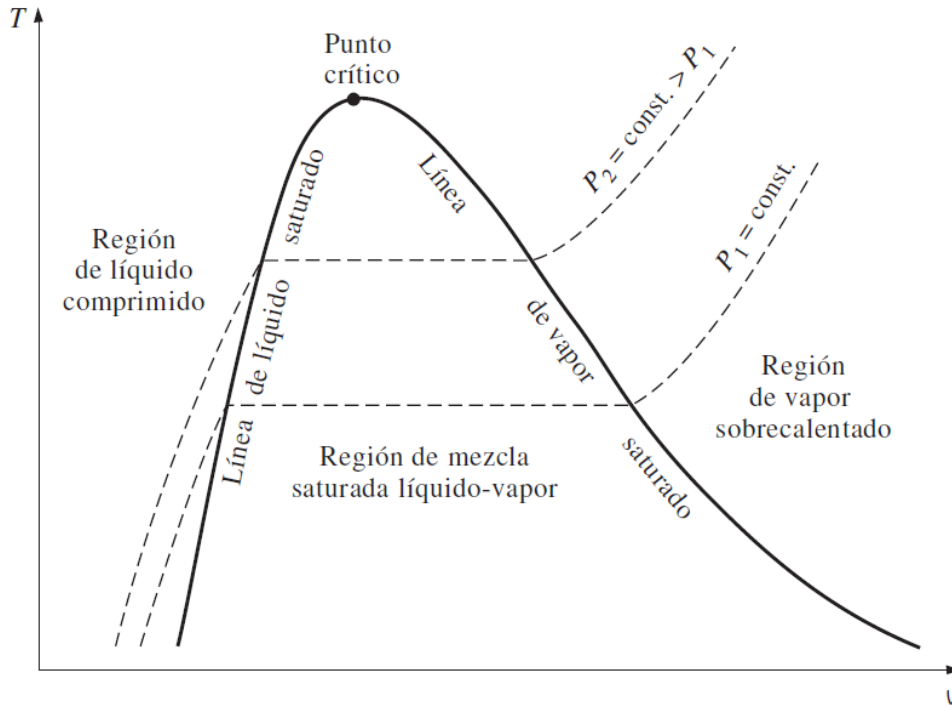


Figura 8. Diagrama T - v de una sustancia pura.

1.5 Chorro en estado supercrítico

El chorro de densidad variable por temperatura, también conocido como chorro supercrítico, debido a las características que presenta se puede considerar como un chorro de fluido pseudo-líquido o pseudo-gas. Para poder definir estos conceptos se hace uso del diagrama P-T y a la línea de pseudo-ebullición [7]. Como se mencionó en el apartado anterior, antes de llegar al punto crítico de cualquier sustancia, los estados líquido y gaseoso se encuentran en equilibrio divididos por la línea de coexistencia (campana de saturación Fig. 8), pero a partir del punto crítico se encuentra la línea de pseudo-ebullición como se observa en la Fig. 9. Esta línea se puede tomar como una extensión de la de coexistencia. En cada lado de esta línea se asemeja las propiedades de los estados de agregación a baja presión [7]. Del lado izquierdo a los líquidos, siendo esta región la de los pseudo-líquido mientras que del lado derecho a la del gas siendo la región de los pseudo-gases (Fig. 9). Considerando

esta línea que separa estas pseudo-fases, se presentan dos tipos de chorros de densidad variable por temperatura: el transcrito y supercrítico. En el caso del chorro transcrito, un fluido pseudo-líquido es inyectado en un ambiente pseudo-gas haciendo que eventualmente la inyección la línea de pseudo-ebullición sea cruzada. En el caso supercrítico tanto el fluido inyectado como el medio ambiente son considerados pseudo-gases [7].

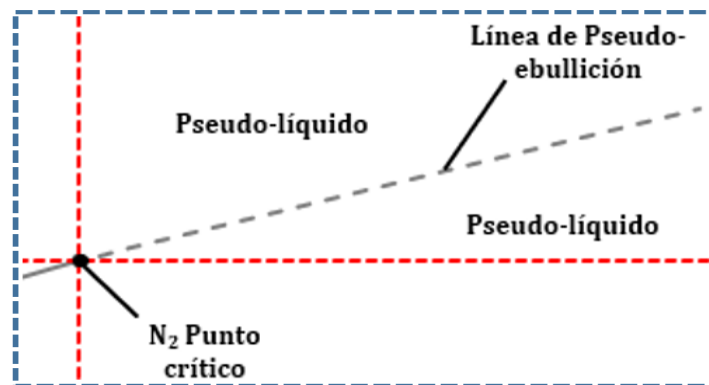


Figura 9. Acercamiento al diagrama de fase de la Fig. 5 mostrando las pseudo-fases.

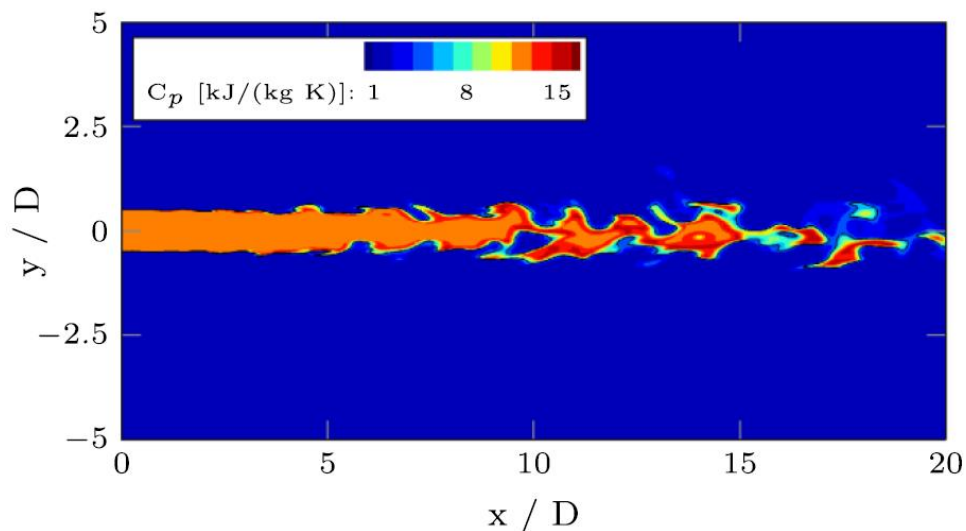


Figura 10. Contornos de la capacidad térmica específica a presión constante para el caso supercrítico. Una capa delgada de fluido, con una alta capacidad térmica específica, que actúa como un escudo térmico.

En el momento en que la presión y temperatura cruzan la línea de pseudo-ebullición, se presenta una capa superficial con una alta capacidad térmica específica a presión constante actuando como un escudo térmico como se muestra en la Fig. 10, esto debido al fenómeno ya explicado en el apartado anterior en la Fig. 6. Para el caso del supercrítico, su comportamiento tiende a presentar un aspecto

gaseoso similar al chorro de densidad variable [7]. Es importante recordar que al igual que los fluidos supercríticos, si estos chorros sufren ligeras variaciones de temperatura y/o presión, las propiedades de este cambian drásticamente y más en las cercanías del punto crítico.

1.6 Objetivos

Los chorros supercríticos o de densidad variable por temperatura a condiciones criogénicas son de los menos investigados en comparación con los chorros líquidos, gaseosos, de densidad constante o variable, además de que, en los trabajos realizados, la mayoría se enfoca principalmente en estudiar y analizar la zona del núcleo potencial. Con esto en mente, la finalidad de este trabajo es el presentar un análisis del chorro en estado supercrítico enfocándose en la región inicial y de autosimilaridad, y de esta manera, mediante los análisis correspondientes, poder determinar la diferencia entre el núcleo potencial y denso, características de la turbulencia en la región cortante y la existencia de turbulencia isotrópica en la región analizada.

CAPÍTULO 2. ECUACIONES DE GOBIERNO Y MÉTODOS NUMÉRICOS

Las ecuaciones de gobierno rigen el comportamiento de todos los flujos que existen, desde los laminares hasta los turbulentos; pero como se sabe, actualmente no existe una manera directa de resolverlas. Este capítulo muestra estas ecuaciones y brinda una explicación generalizada de la metodología que se empleó para dar solución a estas, además de una introducción al procedimiento de los métodos empleados para el análisis de los resultados obtenidos de la simulación.

Debido a que los fluidos supercríticos presentan un comportamiento no ideal, ha habido un gran progreso en cuanto a conceptos, modelos y métodos para su tratamiento numérico. Aquí radica la importancia de la implementación de modelos de turbulencia, propiedades térmicas y de transporte, así como condiciones iniciales y de frontera adecuados para una buena predicción del comportamiento y propiedades de los flujos en condiciones supercríticas [7].

Las ecuaciones de conservación de materia, cantidad de movimiento y conservación de energía para un fluido incompresible, en coordenadas cartesianas pueden estar escritas en forma condensada:

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}_i}{\partial x_i} = \mathbf{S}_F$$
$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}_1}{\partial x_1} + \frac{\partial \mathbf{F}_2}{\partial x_2} + \frac{\partial \mathbf{F}_3}{\partial x_3} = \mathbf{S}_F$$

\mathbf{U} y \mathbf{S} es un vector de cinco componentes

$$\mathbf{U} = (\rho, \rho u_1, \rho u_2, \rho u_3, \rho e_t)^T$$
$$\mathbf{S} = (0, 0, 0, 0, 0)^T$$

$\mathbf{u} = (u_1, u_2, u_3)$ es el vector velocidad donde cada uno de sus componentes también se pueden expresar como u, v, w ; respectivamente, ρ es la densidad, \mathbf{S} es un vector nulo ya que no se consideran fuerzas de cuerpo y ρe_t es la energía total que se divide en dos términos

$$\rho e_t = \rho [e_0 + e_{DP}] + \frac{1}{2} \rho (u_1^2 + u_2^2 + u_3^2)$$

e_0 es la energía interna de gas ideal y e_{DP} es la función de desvío. Dicha función se muestra en el capítulo 3. El segundo término ρu_i^2 es la energía cinética. La función \mathbf{F}_i representa los flujos que corresponden para cada componente de $x_i, \forall i \in \{1, 2, 3\}$, y para fluidos Newtonianos están dador por:

$$F_i = \begin{pmatrix} \rho u_i \\ \rho u_i u_1 + P \delta_{i1} - \mu S_{i1} \\ \rho u_i u_2 + P \delta_{i2} - \mu S_{i2} \\ \rho u_i u_3 + P \delta_{i3} - \mu S_{i3} \\ (\rho e + P)u_i + \mu S_{ij} u_i - \lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} \end{pmatrix}$$

Donde μ y λ representan la viscosidad dinámica y la conductividad térmica respectivamente. S_{ij} es la componente deviatorica del tensor de deformación que se define como:

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

2.1 Métodos de cálculo para la simulación

Como ya se mencionó antes, no existe actualmente una solución exacta y directa para las ecuaciones de gobierno (conservación de materia, Navier-Stokes y energía) salvo para casos muy particulares y simples. Es aquí donde el avance en el poder de cómputo y en métodos numéricos toma relevancia, dando origen a una rama de la mecánica de fluido que se conoce como la dinámica de fluidos computacional o CFD (por sus siglas en inglés, Computational Fluid Dynamics) por sus siglas en inglés; esta rama brinda opciones para resolver y analizar dichas ecuaciones. Las alternativas que nos brinda CFD se dividen básicamente en tres categorías:

- Simulación directa, DNS (por sus siglas en inglés, Direct Numerical Simulation).
- Simulación de grandes escalas, LES (por sus siglas en inglés, Large Eddy Simulation).
- Promediado de Reynolds, RANS (por sus siglas en inglés, Reynolds Averaged Navier-Stokes).

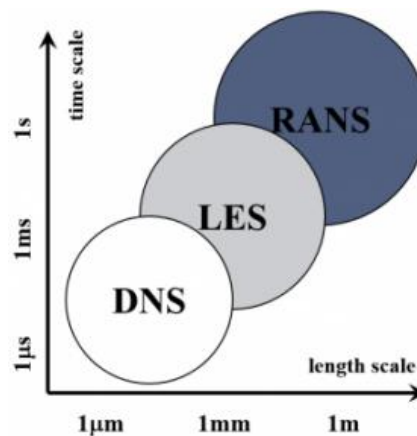


Figura 11. Escalas de espaciotemporales abordadas en cada categoría.

La DNS refiere a la solución completa de las ecuaciones, es decir, se resuelven todas las escalas espaciales y temporales del flujo turbulento sin promediados o aproximaciones. Para hacer esto es necesaria una malla espacial con dimensiones menores a la escala de Kolmogorov, obteniéndose así una cantidad de puntos proporcional de Re^3 [9]. Una de las desventajas es que el costo computacional es alto y su aplicación queda restringida a geometrías sencillas y números de Reynolds bajos. Para el segundo caso se sabe que los flujos turbulentos tienen un amplio rango de escalas espaciales y temporales, donde normalmente las grandes escalas son más energéticas que las pequeñas. De modo que LES da mayor importancia, precisión y calcula de manera directa los remolinos de gran escala (large eddies) ya que son los afectados directamente por las condiciones de frontera y por ende poseen más información, mientras que las pequeñas escalas gracias a su mayor universalidad, homogeneidad e isotropía se pueden modelar [9]. En cuanto a la alternativa RANS consiste en descomponer las variables de interés (que pueden ser presión, densidad, etc.) en un valor medio y uno fluctuante. Al hacer esto se procede a reformular las ecuaciones originales de gobierno en función de las variables promedio y se obtiene un nuevo grupo de ecuaciones (ecuaciones promediadas de Reynolds) [9].

Cada alternativa tiene sus ventajas y desventajas, pero estas dependen de la finalidad del estudio o trabajo que se realice. Para esta simulación se seleccionó LES; esto se debe a que las demás alternativas como DNS y RANS resultan inadecuadas dado que los números de Reynolds asociados a los experimentos son altos (10^5), que las escalas espaciales de las estructuras de interés se encontraban por encima de las de Kolmogorov y a que las estructuras tienen un tiempo de vida, un promedio del tiempo resulta inviable [7].

2.2 Simulación numérica de grandes escalas (LES)

Esta alternativa separa las grandes y pequeñas escalas de la turbulencia (se define como pequeñas escalas a todas aquellas menores a la malla computacional). Esto se logra mediante un filtrado espacial definido por la función G_Δ escogido apropiadamente que elimina las fluctuaciones de la sub-malla [10]. Este filtrado espacial se aplica a las ecuaciones de gobierno generando nuevos términos asociados a la escala de la sub-malla [7]. Para la resolución de esta sub-malla se hace uso del Modelo de Función-Espectral Selectiva (Selective Spectral-Function, SSF).

2.3 Métodos numéricos

Las ecuaciones de estado son resueltas en su forma curvilínea generalizadas (esto se logra a través de una matriz jacobiana J) [7], mientras son discretizadas espacialmente utilizando esquemas

compactos de 6° orden como se presentó en el trabajo de S. K. Lele (1992) [11]. La integración temporal se realiza de forma explícita mediante el método de Runge-Kutta de 3° orden. En el trabajo de Visual y Gaitonde (2002) [12], se menciona que el método de esquemas compactos de alto orden puede presentar una gran inestabilidad numérica, por tanto, es aplicado un filtro matemático de 10° orden a las variables conservativas después de la etapa final en la integración de la solución numérica [7]. La aproximación de diferencias finitas es empleada en este caso para la resolución del punto que se está estudiando, mientras que el de esquemas compactos se emplea para obtener información en comparación de los demás puntos de sus alrededores.

2.4 Mapas de Anisotropía Invariante (AIM)

Uno de los análisis que se realizará a los resultados obtenidos de la simulación numérica es el de Mapas de Anisotropía Invariante (AIM por sus siglas en inglés). Los primeros ejemplos de la teoría de la anisotropía invariante fueron desarrollados en el trabajo hecho por Lumley y Newman en los años 70's [13]. Tomando en cuenta la anisotropía de un flujo turbulento se pueden distinguir diferentes estados de la turbulencia, así como el obtener información adicional acerca de esta que de otra manera no se podría y mediante el entendimiento de los mecanismos de turbulencia es el primer paso para controlarlos [13].

Lumley y Newman encontraron que el estado de la turbulencia se puede caracterizar mediante la cantidad de anisotropía que queda en el flujo [13]. Esta se puede derivar de los esfuerzos de Reynolds

$$\tau_{ij} = -\rho \overline{u_i u_j}$$

sustrayendo la parte isotrópica de τ_{ij} y normalizando respecto a

$$\tau_{ss} = -\rho \overline{u_s u_s}$$

guía al tensor de anisotropía no dimensional

$$a_{ij} = \frac{\overline{u_i u_j}}{2k} - \frac{1}{3} \delta_{ij}$$

con la energía cinética como $k = \frac{1}{2} \overline{u_s u_s}$ y la delta de Kronecker (δ_{ij}). El tensor a_{ij} tiene tres invariantes escalares

$$a_{ii} = 0 \quad II_a = a_{ij} a_{ji} \quad III_a = a_{ij} a_{jk} a_{ki}$$

Al realizar la gráfica con II_a y III_a se obtiene el estado de la turbulencia de un flujo con respecto a su anisotropía. Para el caso donde la turbulencia es de dos componentes (uno de los componentes es considerablemente pequeño comparado con los otros dos), los valores de las invariantes son:

$$\Pi_a = \frac{2}{9} + 2III_a$$

En el caso de la turbulencia axisimétrica (dos componentes son de la misma magnitud)

$$\Pi_a = \frac{3}{2} \left(\frac{4}{3} |III_a| \right)^{2/3}$$

Si estos dos valores se ubican en una gráfica, definen una región estrecha que se llama mapa de anisotropía invariante (anisotropy-invariant map AIM) como se observa en la **Fig. 12**. Toda turbulencia que puede existir físicamente se puede encontrar en esta región, ya que los diferentes estados de turbulencia se representan en diferentes zonas del mapa [13]. La **Fig. 12** muestra las zonas del mapa y los estados de turbulencia que representa. La turbulencia isotrópica se muestra en la parte baja del mapa en el círculo rojo, aquí $\Pi_a = III_a$ por lo que la anisotropía es cero. A continuación, se muestra la turbulencia axisimétrica del lado izquierdo y derecho representada por la línea con puntos. Del lado izquierdo donde $I3 = III_a < 0$ se describe el caso en el que un componente de las fluctuaciones es más pequeño que los otros dos, a este tipo de turbulencia se le conoce como la turbulencia de tipo “panqueque”. Del lado derecho donde $I3 = III_a > 0$ se caracteriza porque un componente es mayor a los otros dos, este caso se conoce como turbulencia de tipo “cigarro”. El cuadrado representa el punto donde dos componentes fluctuantes de mismo valor toman lugar, mientras que la línea continua es el caso de una turbulencia de dos componentes. Por último, el triángulo indica la zona del mapa que describe a la turbulencia de solo un componente.

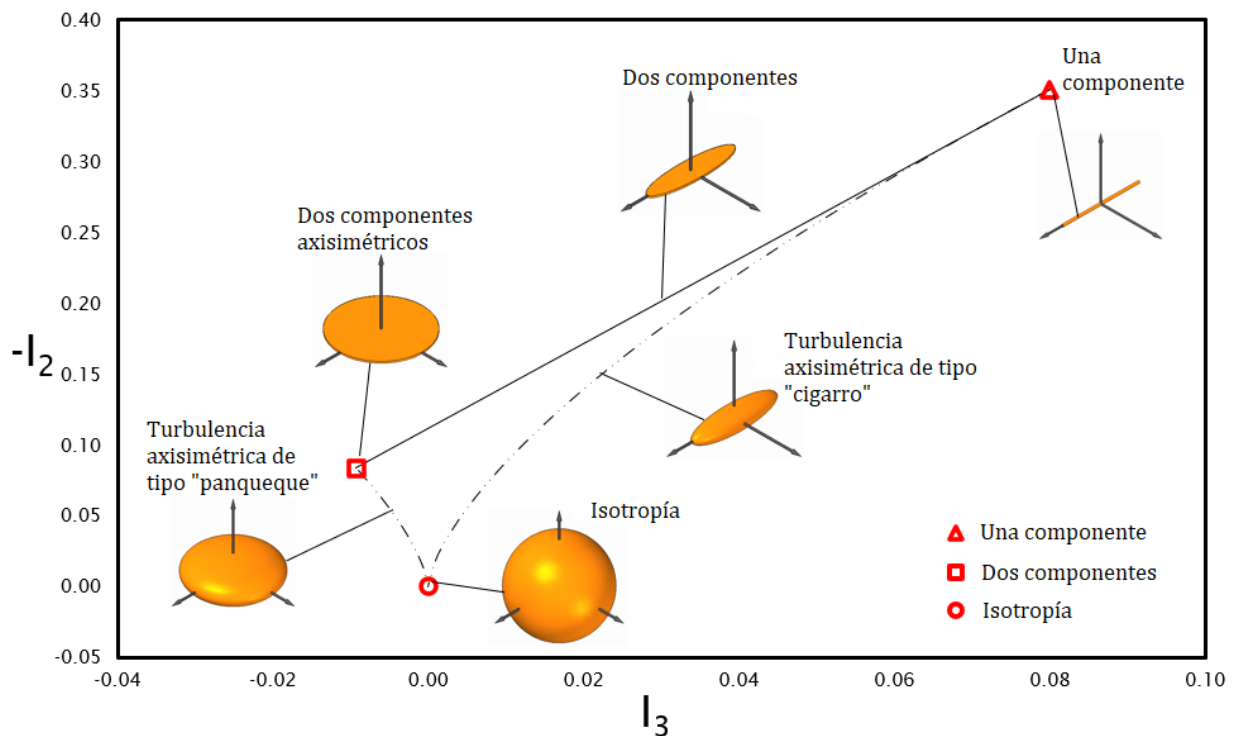


Figura 12. Mapa de anisotropía invariante.

CAPÍTULO 3. PROPIEDADES TÉRMICAS Y DE TRANSPORTE

Las propiedades de las sustancias se pueden clasificar como intensivas o extensivas dependiendo de la cantidad de masa, de la misma forma, se puede hacer otra diferenciación: propiedades térmicas (termodinámicas) y las de transporte.

La principal distinción entre estas radica en el transporte de alguna propiedad a través de un área dada en una cantidad de tiempo (es decir una de las propiedades se desplaza del equilibrio). Este transporte toma lugar en el momento que existe un gradiente de una propiedad del sistema y ocurre en el sentido opuesto a este gradiente [17]. En la **Fig. 13** se muestra las propiedades que se transportan en cada caso, además de que muestra la ley con la que se calculan.

Propiedades de transporte		Propiedad transportada		Ley
Conductividad térmica	↔	Energía	↔	Fourier
Difusión	↔	Materia	↔	Fick
Viscosidad	↔	Cantidad de movimiento	↔	Newton
Conductividad eléctrica	↔	Carga	↔	Ohm

Figura 13. Propiedades de transporte

La exactitud que pueda llegar a tener una simulación numérica depende de gran manera de la forma en que se modela el comportamiento ρ - P - T (densidad, presión y temperatura) y en los modelos escogidos para predecir las propiedades térmicas (energía interna, capacidad térmica específica, entre otros) y de transporte (viscosidad, conductividad térmica y difusividad másica). Por lo que el seleccionar de manera adecuada estos modelos resulta primordial para poder realizar una buena descripción del flujo.

Es importante el recordar que en este trabajo el fluido utilizado se encuentra a altas presiones, ya que, a bajas presiones el efecto de la presión sobre la variación de las propiedades de un fluido es casi nulo y por lo tanto se desprecia [18]. En cambio, a presiones moderadas o altas, está ya tiene efectos considerables sobre las propiedades térmicas del fluido (**Fig. 6**).

3.1 Ecuación de estado

Cualquier ecuación que relacione el comportamiento ρ - P - T de una sustancia se puede denominar ecuación de estado [19], la correcta elección del modelo de la ecuación de estado depende directamente de las características que tendrá el fenómeno de interés. Para modelos de baja presión existen métodos de referencia para obtener estas propiedades; estas a su vez se han ido desarrollando para poder evaluar estas mismas propiedades, pero en condiciones de presiones altas. Fue así como se dieron cuenta que, al combinar ambos casos, se obtenían modelos con los que se pueden evaluar estas propiedades cuando varias especies químicas están presentes ya sea en una mezcla gaseosa o líquida [7].

Un modelo de la ecuación de estado para condiciones de baja presión y altas temperaturas utilizado comúnmente es la de gas ideal. Debido a que, en este trabajo, el fluido que se inyecta se encuentra en condiciones supercríticas (presión y temperatura altas), este modelo no puede ser empleado y aquí es donde entran las correcciones de alta presión.

Existen tres tipos de ecuaciones de estado: en serie, algebraicas y empíricas [20]. El tipo que se usa en este trabajo es el de las algebraicas, esto se debe a que, aunque las empíricas presentan mejores resultados, las algebraicas son más fáciles de implementar y resolver, por ende, el tiempo de cálculo es menor.

Para determinar la ecuación (algebraica) que brindará los mejores resultados, se procedió a evaluar tres ecuaciones corregidas y la del gas ideal. Estas se pueden representar a través de la ecuación de estado cúbica generalizada, la cual se puede dar en términos de volumen específico (v) o densidad (ρ) como se muestra a continuación:

$$P = \frac{R_g T}{v - b} - \frac{a\alpha(T)}{v^2 + d_1 b v + d_2 b^2} = \frac{\rho R_g T}{1 - b\rho} - \frac{a\alpha(T)\rho^2}{1 + d_1 b\rho + d_2 b^2\rho^2}$$

Dependiendo de los valores que tomen los parámetros a , α , b , d_1 y d_2 será la ecuación que se esté empleando. A continuación, se muestran las ecuaciones que se evaluaron en este trabajo.

- Parámetros de la ecuación de estado de gas ideal (GI):

d_1	d_2	b	a	α
0	0	0	0	0

- Parámetros de la ecuación de estado Van der Waals (VW) [18]:

d_1	d_2	b	a	α
0	0	$\frac{R_g T_c}{8P_c}$	$\frac{27 R_g^2 T_c^2}{64 P_c}$	1

- Parámetros de la ecuación de estado Peng-Robinson (PR) [18]:

d_1	d_2	b	a	α
2	-1	$\frac{0.0778 R_g T_c}{P_c}$	$\frac{0.42748 R_g^2 T_c^2}{P_c}$	$[1 + f(w)(1 - T_r^{0.5})]^2$

Donde:

$$f(w) = 0.37464 + 1.5423w - 0.26922w^2$$

- Parámetros de la ecuación de estado Soave Redlich-Kwong (SRK) [18]:

d_1	d_2	b	a	α
1	0	$\frac{0.08664 R_g T_c}{P_c}$	$\frac{0.42748 R_g^2 T_c^2}{P_c}$	$[1 + f(w)(1 - T_r^{0.5})]^2$

Donde:

$$f(w) = 0.48 + 1.574w - 0.176w^2$$

Donde:

- a y b representan los efectos moleculares de las fuerzas de repulsión y atracción entre ellas respectivamente.
- $\alpha(T)$ es un factor que depende de la temperatura.
- T_c [K] y P_c [Pa] son la temperatura y presión crítica respectivamente.
- T_r es la temperatura reducida, T/T_c .
- w es el factor acéntrico y cuantifica la no esfericidad de la molécula.
- R_g [Pa · m³/kg · K] representa la constante aparente del gas.
- d_1 y d_2 son dos constantes que cambian de valor dependiendo de la ecuación.

Para evaluar las ecuaciones y así poder calcular el volumen específico (o la densidad), se requirió el uso de la ecuación generalizada en su forma polinomial. Partiendo de la ecuación de estado generalizada y trabajando con el volumen específico, se muestran a continuación los pasos requeridos para llegar a dicha forma. Por practicidad, el término $\alpha(T)$ pasará a expresarse únicamente como α , así como R_g será representada como R .

$$P = \frac{RT}{v - b} - \frac{a\alpha}{v^2 + d_1bv + d_2b^2}$$

Desarrollando ambas partes de la igualdad:

$$P(v - b)(v^2 + d_1bv + d_2b^2) = RT(v^2 + d_1bv + d_2b^2) - a\alpha(v - b)$$

$$P(v^3 + d_1bv^2 + d_2b^2v - bv^2 - d_1b^2v - d_2b^3) = RTv^2 + RTd_1bv + RTd_2b^2 - a\alpha v + a\alpha b$$

$$Pv^3 + Pd_1bv^2 + Pd_2b^2v - Pbv^2 - Pd_1b^2v - Pd_2b^3 = RTv^2 + RTd_1bv + RTd_2b^2 - a\alpha v + a\alpha b$$

Agrupando los términos:

$$Pv^3 + (Pd_1b - Pb)v^2 + (Pd_2b^2 - Pd_1b^2)v - Pd_2b^3 = RTv^2 + (RTd_1b - a\alpha)v + RTd_2b^2 + a\alpha b$$

Igualando a cero la ecuación:

$$Pv^3 + (Pd_1b - Pb - RT)v^2 + (Pd_2b^2 - Pd_1b^2 - RTd_1b + a\alpha)v + (-a\alpha b - Pd_2b^3 - RTd_2b^2) = 0$$

Normalizando los coeficientes (dividiendo entre la presión P) da como resultado la ecuación generalizada en su forma cúbica:

$$v^3 + (d_1b - b - \frac{RT}{P})v^2 + (d_2b^2 - d_1b^2 - \frac{RTd_1b}{P} + \frac{a\alpha}{P})v + (-\frac{a\alpha b}{P} - d_2b^3 - \frac{RTd_2b^2}{P}) = 0$$

Y los coeficientes quedan expresados como:

$$a_3 = 1$$

$$a_2 = d_1b - b - \frac{RT}{P}$$

$$a_1 = d_2b^2 - d_1b^2 - \frac{RT}{P}d_1b + \frac{a\alpha}{P}$$

$$a_0 = -\frac{a\alpha b}{P} - d_2b^3 - \frac{RT}{P}d_2b^2$$

Una vez obtenida la forma cúbica se procede a calcular el volumen específico y/o densidad. Existen diferentes métodos numéricos que se pueden utilizar para su cálculo, pero en este trabajo se hizo uso del método de Cardano.

3.2 Método de Cardano²¹

El método de Cardano permite resolver de forma analítica cualquier ecuación cúbica, evitando procesos iterativos. Esto se logra mediante la normalización de la ecuación y el cálculo de tres parámetros.

Si consideramos la forma general de una ecuación de tercer grado se tiene:

$$a_3v^3 + a_2v^2 + a_1v + a_0 = 0$$

Normalizando:

$$v^3 + \frac{a_2}{a_3}v^2 + \frac{a_1}{a_3}v + \frac{a_0}{a_3} = 0$$

$$v^3 + b_2v^2 + b_1v + b_0 = 0$$

Llegando a esta forma se calculan los tres parámetros antes mencionados que son:

$$pr = b_1 - \frac{b_2^2}{3}$$

$$qr = \frac{2b_2^3 - 9b_2b_1 + 27b_0}{27}$$

$$\Delta = \left(\frac{qr}{2}\right)^2 + \left(\frac{pr}{3}\right)^3$$

Dependiendo del valor de Δ se determina el tipo de solución para obtener las raíces del polinomio:

- Si $\Delta=0$, todas las raíces son reales y al menos dos de ellas son iguales.
- Si $\Delta>0$, tiene una raíz real.
- Si $\Delta<0$, tiene tres raíces reales diferentes.

Para $\Delta=0$, tres raíces reales donde $pr = qr = 0$:

$$v_i = -\frac{b_2}{3} \quad i = 1,2,3$$

En el caso con tres raíces reales y dos iguales:

$$v_1 = -2\left(\frac{qr}{2}\right)^{1/3} - \frac{b_2}{3}$$

$$v_i = \left(\frac{qr}{2}\right)^{1/3} - \frac{b_2}{3} \quad i = 2,3$$

Para $\Delta>0$, una raíz real y dos imaginarias:

$$v_1 = \left(-\frac{qr}{2} + \sqrt{\Delta}\right)^{1/3} + \left(-\frac{qr}{2} - \sqrt{\Delta}\right)^{1/3} - \frac{b_2}{3}$$

Para $\Delta<0$, tres raíces reales diferentes:

$$v_i = 2 \left[\sqrt{-\frac{pr}{3}} \cos\left(\frac{\theta + 2k\pi}{3}\right) \right] - \frac{b_2}{3} \quad i = 1,2,3$$

$$\cos\theta = \frac{-qr/2}{\sqrt{-(pr/3)^3}}$$

Una vez obtenidas las raíces del polinomio se puede conocer la magnitud de la densidad. Entonces, los resultados de las cuatro ecuaciones de estado consideradas en el trabajo se compararon con valores experimentales del NIST (National Institute of Standards and Technology), esto se observa en la **Fig. 14a y 14b**.

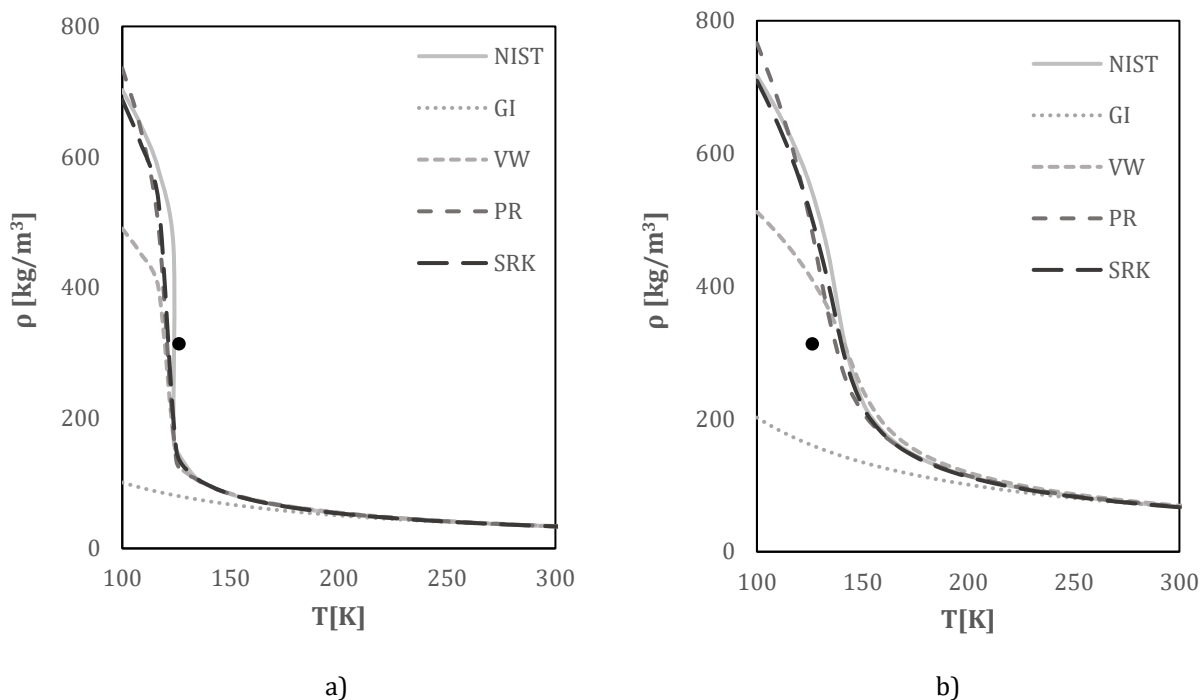


Figura 14. Valores obtenidos de la densidad con Nitrógeno como fluido de trabajo a 3 [MPa] (a) y a 6 [MPa] (b). El punto negro representa el punto crítico del nitrógeno, $T_c = 126.192$ [K], $P = 3.39$ [MPa] y $\rho = 313.3$ [kg/m³].

De la **Fig. 14** y **Fig. 15** se comprueba que el uso de la ecuación de estado de gas ideal no es adecuado para temperaturas menores a 220 [K] (aproximadamente 100 grados por encima de la temperatura crítica). Cabe mencionar que los errores que presenta este modelo aumentan conforme se acerca a las condiciones críticas. Los valores de la densidad se acercan al punto crítico (**Fig. 14a**) estos aumentan considerablemente, un fenómeno similar ocurre con los errores (**Fig. 15**), donde el mayor porcentaje de error se encuentra en la presión de 3 [MPa] (**Fig. 15a**) y cerca de la temperatura crítica, esto se debe a que esta presión es más cercana a la crítica que en el caso de 6 [MPa]. En cuanto a los demás modelos, se observa que el que presenta un mejor comportamiento comparado con el NIST y por ende un menor error, es el de Soave Redlich-Kwong, por lo que este es el modelo que se usa para el cálculo de las demás propiedades. También, a partir de estos resultados se corrobora que para estas condiciones de presión y temperatura el modelo de gas ideal ya no es adecuado para

representar el comportamiento termodinámico, ni de las propiedades de transporte. Los errores en las predicciones de los modelos se muestran a la **Fig. 15a y 15b**. Los errores en los modelos son relativamente esperados ya que algunos de (modelos) fueron desarrollados para usos específicos, es decir, originalmente la ecuación de Peng-Robinson fue desarrollado en para gas metano en la Universidad de Alberta en Canadá. Esto promueve que al usar dicha ecuación para otros gases se obtengan leves variaciones respecto del valor real.

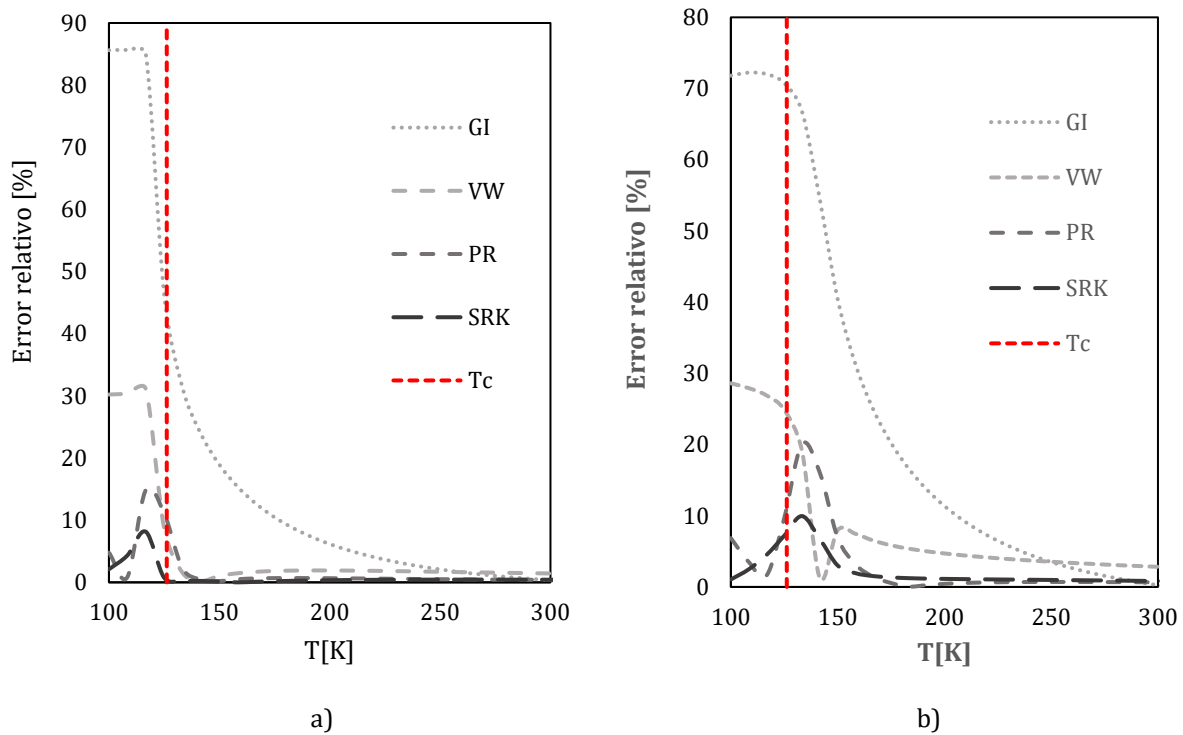


Figura 15. Error en porcentaje de los modelos estudiados a 3 [MPa] (a) y 6 [MPa] (b). La línea roja punteada representa la temperatura crítica.

3.3 Propiedades termodinámicas

En la sección de ecuación de estado se mencionó que el uso de las ecuaciones tradicionales no es suficiente cuando nos referimos a gases reales, por lo que para la obtención de las demás propiedades termodinámicas (energía interna, capacidad térmica específica a volumen y presión constante y la velocidad del sonido) también es necesario obtener expresiones corregidas. Estas expresiones se obtienen a partir de la misma ecuación de estado (de SRK) y una función de desvío. Así, la expresión con la que se calcula la energía interna (e) para gas real, se define de la siguiente manera [19]:

$$e = e_0 + e_{DP}$$

$$e_{DP} = \int \left(\frac{P}{\rho^2} - \frac{T}{\rho^2} \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_\rho \right) dp$$

Donde e representa la energía interna real, e_0 es la energía interna para gas ideal y e_{DP} representa la corrección de modelos ideales con los que se predicen las propiedades térmicas reales. A su vez, se usa la energía interna para un gas real para la obtención de la capacidad térmica específica a volumen constante para gas real:

$$c_v = \frac{de}{dT}$$

Dando como resultado que la energía interna y la capacidad térmica específica a volumen constante sean:

$$e = e_0 + \left(T \frac{d\alpha\alpha}{dT} - \alpha\alpha \right) \left[\frac{1}{(\delta_1 - \delta_2)b} \left(\ln \left(\frac{1 + \delta_1 b \rho}{1 + \delta_2 b \rho} \right) \right) \right]$$

$$c_v = c_{v,0} + \left[\frac{T}{(\delta_1 - \delta_2)b} \left(\frac{d^2\alpha\alpha}{dT^2} \right) \left(\ln \left(\frac{1 + \delta_1 b \rho}{1 + \delta_2 b \rho} \right) \right) \right]$$

El termino $c_{v,0}$ representa la capacidad térmica específica a volumen constante de gas ideal. Ya teniendo c_v y con la ecuación de estado se obtiene la capacidad térmica específica isobárica (c_p) y la velocidad del sonido (c).

$$c_p = c_v + \frac{T}{\rho^2} \left[\left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_\rho^2 / \left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_T \right]$$

$$c^2 = \frac{c_p}{c_v} \left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_T$$

Con el uso de estas ecuaciones, en conjunto con la ecuación de estado y las propiedades críticas del fluido de trabajo, es posible conocer el comportamiento termodinámico de gas real en un fluido supercrítico. La obtención completa y la explicación de estas propiedades se localizan en el Apéndice.

En la **Fig. 16** se observa que los resultados numéricos muestran un buen comportamiento (es decir una buena semejanza) con los resultados experimentales del NIST. Así mismo, cerca de las condiciones críticas ($T_c = 126.192$ [K] y $P_c = 3.395$ [MPa]) se ve un incremento o cambio significativo en la energía interna y sobre todo en la capacidad térmica específica, situación que disminuye de forma importante a los 12 [MPa]. Lo anterior es de esperarse dado la lejanía de las condiciones críticas.

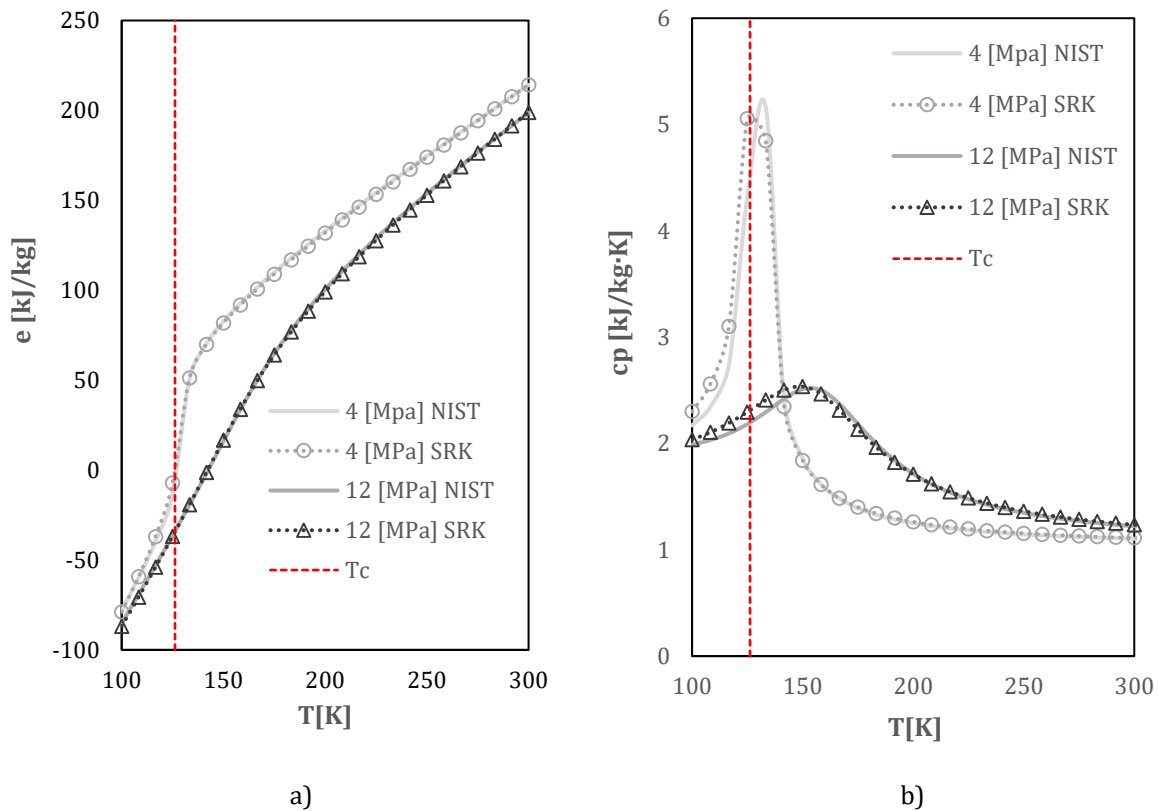


Figura 16. Energía interna (a) y capacidad térmica isobárica (b) del Nitrógeno a 4 [MPa] y 12 [MPa] calculadas a partir del modelo de SRK.

3.4 Propiedades conservativas a primitivas (P, T)^{7, 22}

En el trabajo doctoral de Ruiz (2012) [22] se menciona que generalmente la obtención de una solución inicial de las ecuaciones de conservación se realiza de una manera sencilla empleando variables primitivas (T, P, u_i), mientras que las variables conservativas ($\rho, \rho u_i, \rho e_t$) se usan para el cálculo. Entonces, la densidad y la energía total son calculadas a partir de estas variables primitivas empleando la ecuación de estado.

Debe tomarse en cuenta que las ecuaciones de conservación se manejan de forma conservativa, por lo tanto, se debe definir como pasar de unas a otras (conservativas a primitivas o viceversa) cuando se presentan los resultados. De esta manera se puede trabajar con las variables más sencillas: presión y temperatura. El problema radica en que, a diferencia de la presión, la temperatura no cuenta con una ecuación explícita para su obtención, por lo que el uso de un método numérico es necesario. El método empleado es el iterativo de Newton. Si el error se estima como:

$$f(T_a) = e(T_a, \rho) - e(T, \rho)$$

Aquí, T_a es la aproximación de la temperatura exacta (T). La energía interna que pertenece a la solución de $e(T, \rho)$ es llamada energía interna objetivo (e_{ob}), así el error es:

$$f(T_a) = e(T_a, \rho) - e_{ob}$$

Tomando en cuenta que la derivada de f respecto a la temperatura está relacionada con la capacidad térmica a volumen constante o isocórica (c_v):

$$\left. \frac{\partial e}{\partial T} \right|_{\rho} = c_v$$

El algoritmo iterativo de Newton se aplica de la siguiente forma:

$$T_a^{m+1} = T_a^m - \frac{f(T_a^m)}{c_{v,a}^m}$$

Donde $c_{v,a}^m$ y T_a^m son la capacidad térmica isocórica y las temperaturas aproximadas obtenidas después de m pasos realizados. El proceso se detiene después de n pasos una vez que el criterio que se presenta a continuación se satisface:

$$\frac{|f(T_a^m)|}{|e_{ob}| + 1} = \frac{|e(T_a^n, \rho) - e_{ob}|}{|e_{ob}| + 1} \leq \epsilon_T$$

El valor de ϵ_T se fija en 10^{-12} y normalmente n es menor a 5. Como el valor de e_{ob} puede ser cero, se le agrega una unidad para evitar una división indeterminada. Para la mayoría de las temperaturas calculadas, e_{ob} es un número grande y por lo tanto $|e_{ob}|$ es mucho mayor a la unidad, por lo que $|e_{ob}| + 1 \approx |e_{ob}|$. Una vez calculada la temperatura se procede a calcular la presión empleando la ecuación de estado.

3.5 Propiedades de transporte

Existen varios modelos que nos permiten obtener el valor de estas propiedades (ecuación de primer orden de Chapman-Enskog, método de Chung, et al., entre otros), sin embargo, muchos de ellos son para usados a bajas presiones. Por tanto, se requiere el uso de modelos corregidos para poder obtener las propiedades de transporte de gas real a altas presiones. Para estas dos propiedades, viscosidad dinámica (μ) y conductividad térmica (λ) se hace uso de los métodos empíricos de Chung, et al. [20].

3.6 Viscosidad dinámica (μ)

La viscosidad se puede definir como la medida interna de la fricción de un fluido que tiende a oponerse a cualquier cambio dinámico que sufra el movimiento del fluido [20]. Al igual que la densidad, la viscosidad refleja los efectos de las interacciones y movimiento molecular, además, en la región (temperatura-presión) donde la viscosidad cambia rápidamente con la presión, es la misma donde la densidad cambia de igual manera también por la presión [20]. Esto hace que ambas propiedades sean funciones del estado termodinámico de un fluido y pueden usarse para definir el estado de un material, así mismo, que la densidad sea importante (en este modelo) para el cálculo del comportamiento de la viscosidad a altas presiones [20]. El modelo de Chung se define como:

$$\mu = \mu^* \frac{36.344(MT_c)^{1/2}}{V_c^{2/3}}$$

Donde:

- μ = viscosidad, μP
- M = el peso molecular, g/mol
- T_c = temperatura crítica, K
- V_c = volumen crítico, cm^3/mol
- μ^* = es un factor empírico de corrección

Para obtener la viscosidad el modelo hace uso de la temperatura y la densidad, además de algunas correcciones de factores empíricos para modificar el modelo usado en baja presión. Por esta razón, es conveniente el uso de este método ya que no es necesario una estimación especial a baja presión ya que se encuentra incluida en este, además de que, gracias a comparaciones hechas con resultados experimentales, se observó que los errores suelen estar debajo del 5% [20]. Este error depende no solo del propio modelo, sino también, de los valores de la densidad usada, por lo que se vuelve a confirmar la necesidad de escoger correctamente un modelo de ecuación de estado.

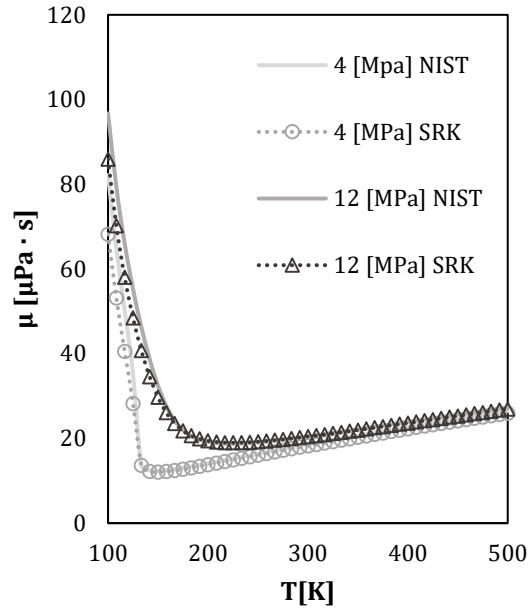


Figura 17. Viscosidad dinámica contra temperatura a 4 y 12 [MPa].

3.7 Conductividad térmica (λ)

La conductividad térmica es la habilidad intrínseca que tiene un material de transferir o conducir energía en forma de calor [23]. En el caso de los gases, esta propiedad incrementa conforme aumenta la presión, aunque el efecto es relativamente bajo en bajas presiones y en esta zona (de baja presión) conforme aumenta la temperatura, aumenta también la conductividad. En la zona de altas presiones se puede observar lo contrario, mientras que la temperatura aumenta, hay una disminución en el valor de la conductividad [20]. Por esta misma razón (y de manera similar al caso de la viscosidad) se tienen que realizar correcciones al modelo de Chung empleado para bajas presiones y así poder tratar materiales altas presiones (y/o densidades). Dando como resultado lo siguiente:

$$\lambda = \frac{31.2\eta^{\circ}\Psi}{M'}(G_2^{-1} + B_6y) + (qB_7y^2Tr^{1/2}G_2)$$

Donde:

- λ = conductividad térmica, $W/(m \cdot K)$
- η° = viscosidad del gas a baja presión, $N \cdot s/m^2$
- M' = peso molecular, kg/mol
- G_i y B_i ($i=1-7$), y , Ψ y q están en función de la densidad, temperatura crítica, presión crítica, factor acéntrico y del momento dipolar del fluido.

Este modelo se probó con una gran cantidad de datos de diferentes tipos de hidrocarburos, así como de gases simples y se concluyó que el error que se tenía era menor del 8% [20].

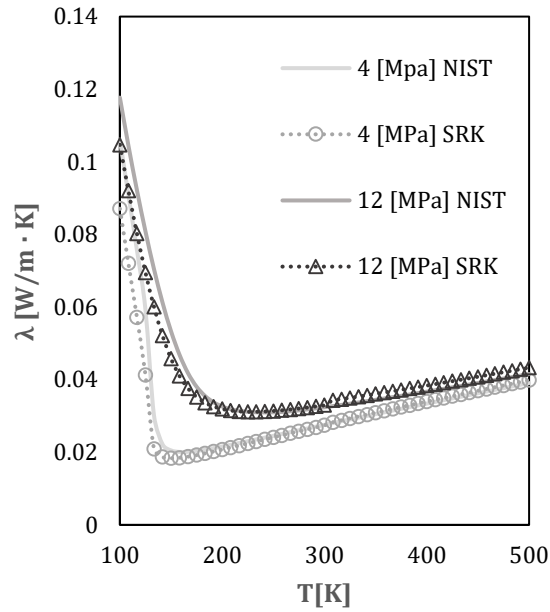


Figura 18. Conductividad térmica contra temperatura a 4 y 12 [MPa].

Una vez escogidos los modelos adecuados para el cálculo de las propiedades térmicas y de transporte, se procede a establecer las condiciones en las que el chorro tomará lugar, es decir, la configuración, condiciones iniciales y de frontera con las que se realizará el código numérico.

CAPÍTULO 4. CONFIGURACIÓN, CONDICIONES INICIALES Y DE FRONTERA

El código numérico utilizado en este trabajo fue desarrollado en el Instituto de Ingeniería de la UNAM, por la Coordinación de Ingeniería de Proceso Industriales y Ambientales. Los datos experimentales se basan en uno de los trabajos más referenciados en el tema de chorros en estado supercrítico, Mayer et al. (2003) [24]. Dicho trabajo es frecuentemente reproducido de manera experimental y numérica. Para realizar la simulación, se tomó en cuenta particularmente los casos 3 y 4 del trabajo de Mayer, es decir, casos transcrito (TC) y supercrítico (SC), respectivamente.

4.1 Experimento de Mayer

En el trabajo original de Mayer, el experimento consta de once casos de los cuales como ya se mencionó solo dos son considerados: el caso 3 y 4. El arreglo del experimento consta de una cámara de mezclado de acero inoxidable, en la parte superior de la cámara (**Fig. 19**) se encuentra el inyector con un diámetro de 2.2 [mm] y una longitud de 90 [mm]. Del inyector sale nitrógeno a diferentes presiones y temperaturas. El fluido ambiente también fue nitrógeno y se encuentra estático. La presión y temperatura ambiente (T_{amb} y P_{amb}) que fueron las mismas para todos los experimentos, fueron de 298 [K] y 3.9 [MPa] respectivamente. En la **Tab. 2** se muestran algunos de los parámetros dimensionales de velocidad y temperatura de inyección (U_{in} y T_{in}), no dimensionales como la relación de densidad entre el fluido inyectado y el fluido receptor (ρ_{in}/ρ_{amb}).

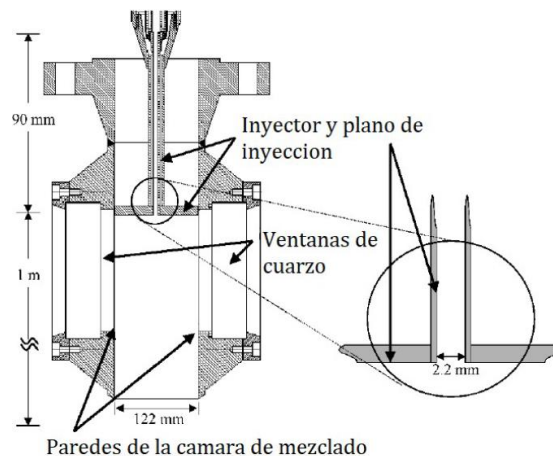


Figura 19. Cámara de mezclado utilizada en el experimento de Mayer (2003).

Tabla 2. Condiciones iniciales del experimento de Mayer

Caso	U_{in} [m/s]	T_{in} [K]	ρ_{in} / ρ_{amb}
3 - TC	4.9	126.9	9.6
4 - SC	5.4	137.0	3.6

4.2 Configuración numérica

El dominio computacional es tridimensional con un marco de referencia ortogonal cartesiano y se realiza a través de una malla estructurada con longitudes $L_x \times L_y \times L_z$, siendo sus valores adimensionales de $24D_{in} \times 8D_{in} \times 8D_{in}$, como se observa en el **Fig. 20**. La dirección principal del flujo es paralela al eje "x" del dominio. La única región modelada es la región cerca del inyector, esto se debe a simplicidad y ahorro de recurso computacional [7]. Otro aspecto relevante es que consideraron tres tipos de malla: burda (3.3×10^6 nodos), intermedia (4.5×10^6 nodos) y fina (5.6×10^6 nodos).

En cuanto a los límites del dominio se consideran paredes deslizantes e isotérmicas. El plano donde se inyecta el fluido se considera una pared adiabática y no deslizante. Por último, al final del dominio se considera un flujo de salida semireflectante con una presión de salida impuesta con un valor de 3.9 [MPa].

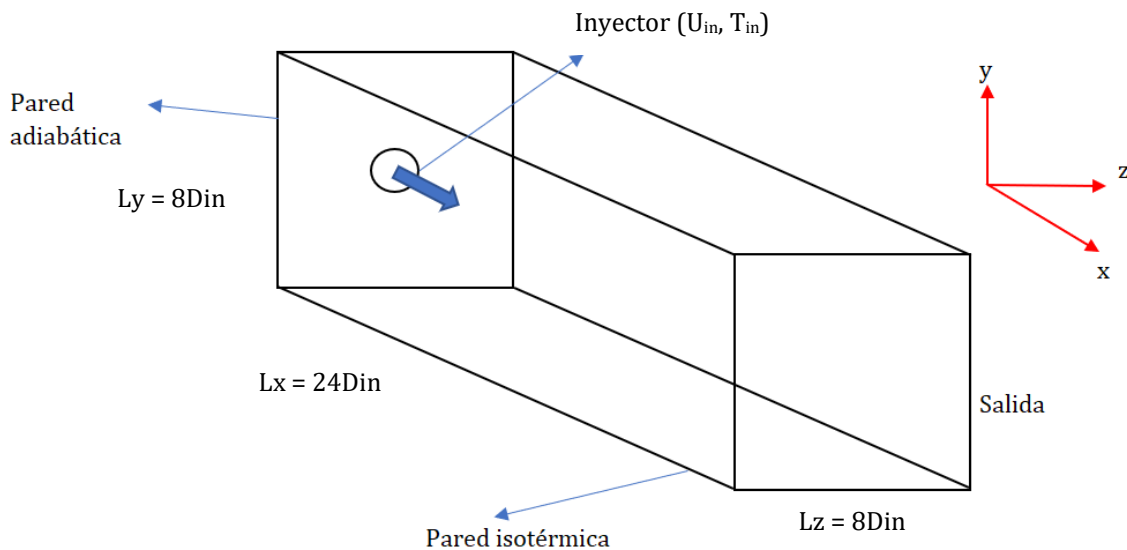


Figura 20. Configuración del dominio computacional. Los perfiles de velocidad y temperatura de inyección (U_{in} y T_{in}) se definen en el plano de entrada mediante un perfil Gaussiano.

4.3 Condiciones de frontera²⁵

Uno de los factores principales para poder obtener una adecuada solución a las ecuaciones de gobierno es una buena elección de las condiciones de fronteras, las cuales nos permiten ajustar las condiciones físicas del problema a condiciones específicas en forma matemática. Existen dos tipos de condiciones de frontera: las físicas y las suaves o numéricas. La primera se trata cuando se especifica el comportamiento físico conocido de una o más variables dependientes en las fronteras, por ejemplo, la velocidad longitudinal de entrada. Mientras que el segundo aparece cuando el número de condiciones físicas es menor al número de variables primitivas (este siempre es el caso en las salidas) y es necesario el implementar estas condiciones a pesar de no ser dadas explícitamente por el comportamiento físico del problema. Para obtener las condiciones de frontera suaves existen dos opciones: se agregan condiciones arbitrarias a las condiciones de frontera físicas, por ejemplo, la extrapolación; la otra opción es usar las ecuaciones de conservación en la frontera para completar el conjunto de condiciones de frontera físicas.

Existen diversos métodos para el manejo de las condiciones de frontera que se nos presentan en la literatura, pero para esta simulación se hizo uso del método NSCBC (Navier-Stokes Characteristic Boundary Conditions) debido a la precisión que presenta comparado con otros. Este método consiste principalmente en resolver las ecuaciones que se encuentran cerca de las fronteras de una manera distinta al resto del dominio, haciendo uso de la propagación acústica en forma de ondas de las variables. Estas ondas corresponden en número a la cantidad de variables resueltas y poseen ciertas velocidades características asociadas a las amplitudes de onda. Las velocidades características son en total cinco y están dadas por $u + c$, $u - c$ y tres de ellas solo como u , donde c corresponde a la velocidad del sonido y u a la velocidad local del flujo. En la **Fig. 21** se aprecian estas velocidades, así como su comportamiento en el dominio computacional siendo \mathcal{E}_i 's las variaciones de amplitud de onda características asociadas con las velocidades características.

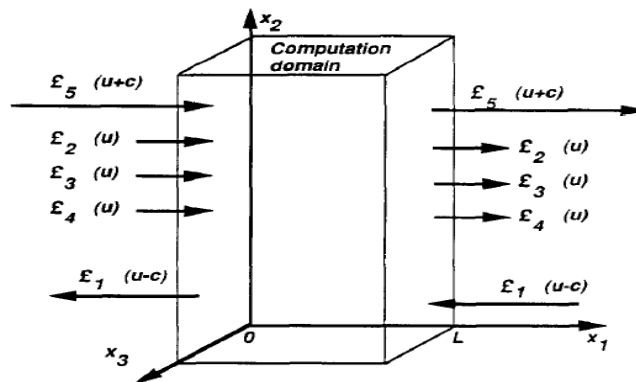


Figura 21. Ondas entrando y saliendo del dominio computacional a través de un plano de entrada ($x_1 = 0$) y salida ($x_1 = L$) para un flujo subsónico. Imagen obtenida de Poinot y Lele [25].

Se observa también en la **Fig. 21** que hay amplitudes de onda saliendo del dominio, así como entrando. Esto es relevante ya que el cálculo de las amplitudes de onda salientes es sencillo comparado con el de las entrantes. Una forma de obtener las aproximaciones de variaciones de las amplitudes de onda entrantes es expresándolas en términos de las amplitudes de ondas salientes. El método se basa en un conjunto de ecuaciones que permiten inferir los valores de las variaciones de la amplitud de onda gracias a que el flujo se considera localmente no viscoso y unidimensional, de ahí que este conjunto de ecuaciones (relaciones) reciban el nombre de LODI (Local One-Dimensional Inviscid). Estas relaciones no son en sí condiciones físicas, pero se pueden tomar como las relaciones entre las condiciones de frontera físicas y las amplitudes de onda que cruzan las fronteras, cabe resaltar que las relaciones LODI solo son usadas para estimar las variaciones de amplitud de onda entrantes. Una vez teniendo las relaciones LODI se procede a realizar tres pasos para el método NSCBC. Primero, se deben emplear las ecuaciones de Euler (no toman en consideración la viscosidad) para realizar estos pasos. El primer paso es eliminar las ecuaciones de conservación correspondientes a las condiciones de frontera físicas no viscosas puestas en la frontera seleccionada. La **Tab. 3** obtenida de Poinsoy y Lele (1992) [25] nos muestra ejemplos de cómo se puede realizar este paso dependiendo de cada caso.

Tabla 3. Ejemplos de ecuaciones a eliminar para una condición de frontera no viscosa dada

Condición no viscosa	Ecuación a eliminar
Velocidad u_1	De momento x_1
Velocidad u_2	De momento x_2
Velocidad u_3	De momento x_3
Flujo m_1	De momento x_1
Presión	Energía
Densidad	Continuidad
Entalpía	Energía
Entropía	Energía

Para el paso dos, para cada condición de frontera no viscosa se hace uso de las relaciones LODI para expresar cada \mathcal{E}_i 's desconocidas (correspondientes a las ondas entrantes) como una función de las \mathcal{E}_i 's conocidas (correspondientes a las ondas salientes). El paso tres es en el que usando las ecuaciones de conservación restantes y combinándolos con los valores obtenidos de las \mathcal{E}_i 's del paso dos se calculan todas las variables que no fueron dadas por las condiciones de fronteras físicas no viscosas. Estos pasos son los realizados para las ecuaciones de Euler, pero para el caso de las de Navier-Stokes, los dos primeros pasos se mantienen iguales siendo el tercero el único que cambia ya que se tienen que suplementar con condiciones viscosas adicionales [25].

4.4 Condiciones empleadas y consideraciones especiales en la simulación

Para la simulación numérica de Lagarza (2019) [7] se emplearon condiciones de frontera para una entrada y salida subsónica, así como de muros deslizantes. Una de las formas de lograr la entrada subsónica es fijando u_i y la temperatura en esta zona. Así, en este caso las amplitudes de las ondas de entrada son cero y la energía interna se actualiza de acuerdo con la variación de la longitud de onda (\mathcal{E}_1 o \mathcal{E}_5) determinada por puntos interiores [7]. Para la salida subsónica, una condición de frontera no reflexiva se puede aplicar si se establece que la amplitud de las ondas entrantes es cero, es decir, $\mathcal{E}_1=0$; las demás variaciones de amplitud de onda se determinan a partir de los puntos interiores. Por su parte en el caso de las paredes deslizantes, la velocidad normal es cero ($u_n=0$) y eso resulta en que de las relaciones LODI que $\mathcal{E}_1=\mathcal{E}_5$ y el resto de las variaciones de amplitud de onda restantes también se determinan de puntos interiores.

Una de las consideraciones usadas en la simulación fue la implementación de una señal de ruido blanco sobre el perfil de velocidad, esto con la finalidad de lograr una buena transición a la turbulencia. El ruido blanco es aplicado en la región cortante del chorro agregando valores aleatorios a las tres componentes de velocidad. Es a través del ruido blanco que se generan inestabilidades en las pequeñas escalas que promueven que la frecuencia fundamental emerja de forma natural [7]. La otra consideración es la implementación de una capa de esponja (disipador artificial) unos nodos antes de la condición de frontera de salida. Esto debido a que se debe aplicar una condición límite que permita a las ondas acústicas o fluctuaciones turbulentas se propaguen o salgan del dominio computacional. La capa logra que los campos instantáneos del flujo sean llevados a un estado homogéneo en la parte final del dominio, además, las variables en la capa de esponja se llevan a valores promedio en una capa anterior. Un punto importante es que esta capa se encuentra dentro del dominio computacional y no es una extensión de este ni una condición de frontera, pero si una condición límite abierta en contacto con la frontera de salida.

CAPÍTULO 5. RESULTADOS

En el capítulo anterior se establece que las simulaciones se basan en las condiciones del trabajo del experimento de Mayer et al. (2003) y con base en los datos obtenidos ahí, se realiza la validación de la simulación numérica empleada en este trabajo. Primero se compara el valor de la densidad a lo largo de la línea central del dominio. La comparación de los casos transcrito y supercrítico, se presentan en las **Figs. 22a y 22b**, respectivamente. En el Caso 3 o TC, los valores de la densidad obtenidos en la línea central presentan dimensiones, mientras que en el Caso 4 o SC se usa la expresión $\rho^+ = (\rho - \rho_{amb}) / (\rho_{in} - \rho_{amb})$ para presentar los valores no dimensionados. Sin importar la forma de compararlos (con o sin dimensiones), se puede observar que el comportamiento de la densidad en la simulación asemeja de buena manera a los resultados obtenidos en los trabajos experimentales de Mayer.

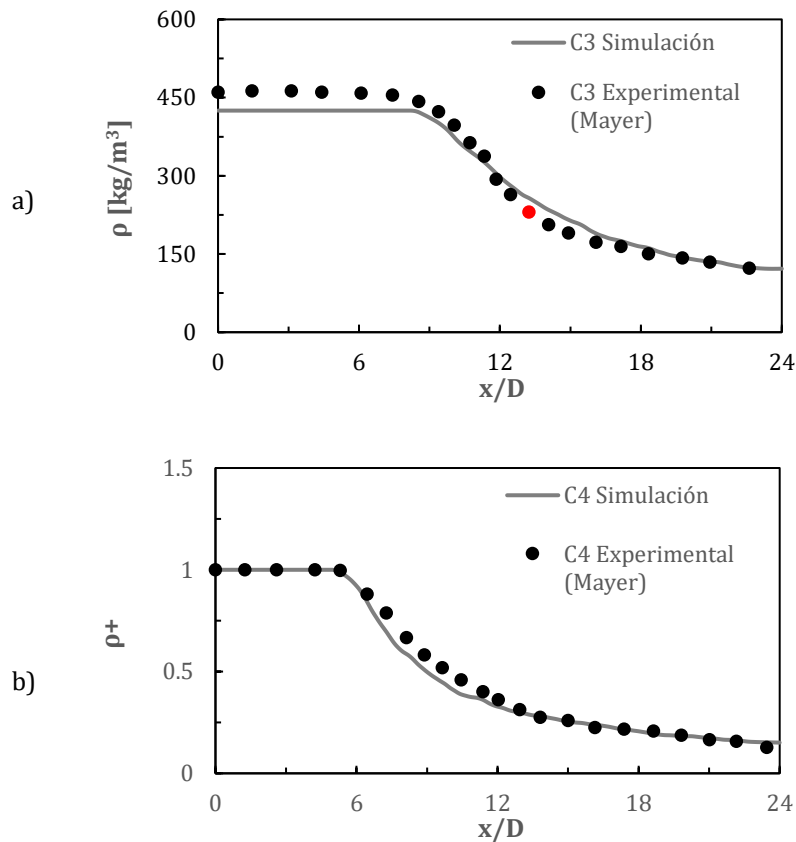


Figura 22. Comportamiento de la densidad en los casos experimentalmente por Mayer et al. (2003) y en la simulación numérica.

En ambos casos se observa el valor de la densidad permanece constante durante algunos diámetros dado el proceso de inyección, pero eventualmente (aguas abajo) esta descende súbitamente y de forma importante. En el caso transcrito se observa un cambio en la pendiente en el decaimiento de

la densidad, aproximadamente a los $13D$ (punto rojo) y es de esperarse por el elevado gradiente de densidad en regiones espaciales muy pequeñas. Este fenómeno no es perceptible en el caso supercrítico, a partir del término del valor constante de densidad el decremento del valor de la densidad es mucho más suave. Actualmente se cuenta con muy poca información experimental para la validación numérica, por lo que los perfiles axiales de densidad (incluso el ángulo de dispersión del chorro) son aún válidos para determinar la validez de un trabajo desarrollado a través de la CFD.

Además de demostrada la validez de la simulación, Salinas (2010) [26] menciona que para garantizar que un flujo turbulento se encuentre estadísticamente desarrollado se debe monitorear el valor de la vorticidad global. La finalidad alcanzar un estado de turbulencia estadísticamente desarrollada para poder dar lugar al análisis estadístico [26]. En la Fig. 23 se observa que para los resultados obtenidos en ambos casos ya se alcanzó un estado estacionario y, por lo tanto, el análisis estadístico puede comenzar.

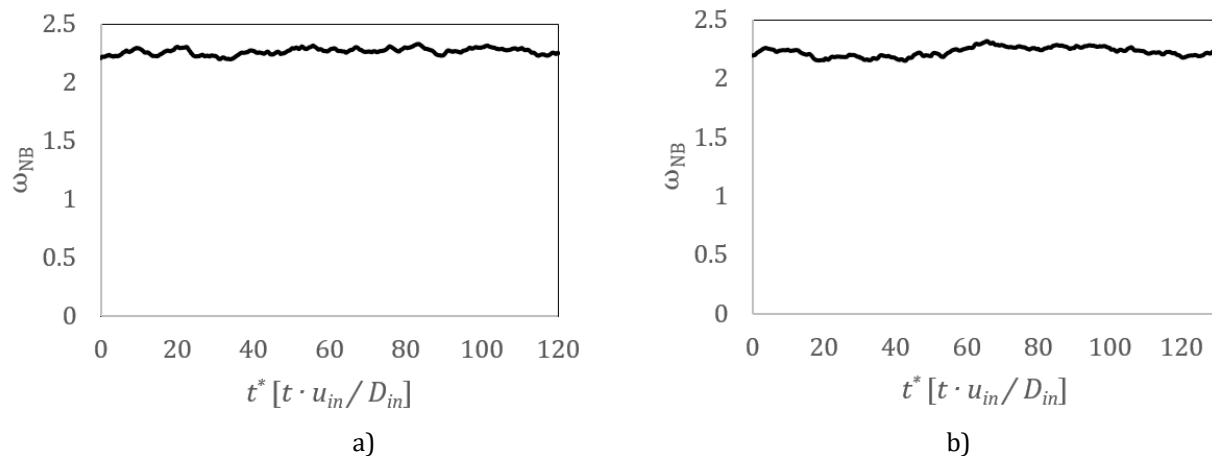
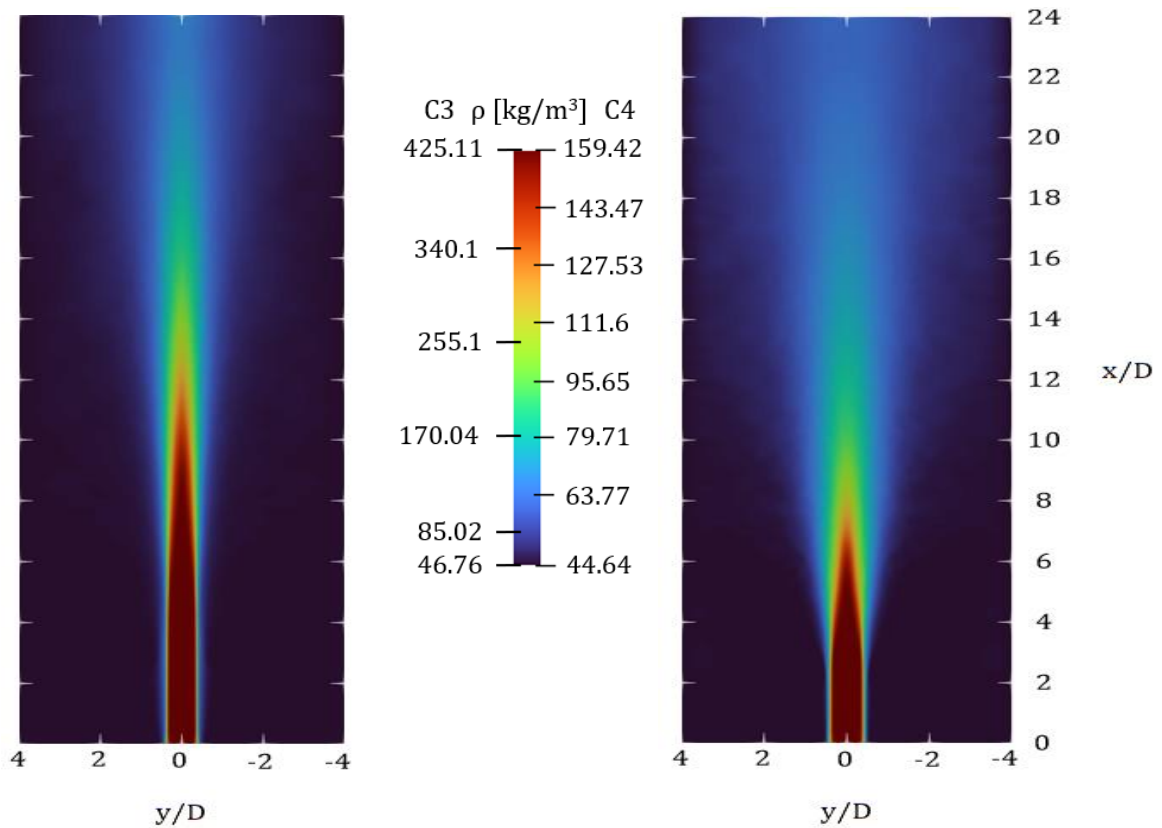


Figura 23. Valor global de la vorticidad para los casos C3 y C4 incisos a) y b) respectivamente.

5.1 Núcleo potencial y denso

En el capítulo 1 se menciona que el campo cercano se encuentra definido por el núcleo potencial y en este apartado se procede a describir el comportamiento de esta zona mediante el uso de los datos obtenidos de la simulación. Banuti [27] menciona que hay una zona justo al inicio de la inyección del chorro que presenta un gradiente muy delgado de temperatura (justo entre el fluido inyectado y el fluido ambiente) cuyo comportamiento es muy similar al de la capa cortante de velocidad formada inicialmente en el nacimiento del chorro. Esta capa térmica incrementa su espesor hasta llegar a la línea central del chorro, creando una región prácticamente idéntica a la de un núcleo potencial. Esta

zona o región la llama “central steam core”, pero comúnmente se conoce como núcleo oscuro o núcleo denso. En el caso de los chorros transcrito y supercríticos, a diferencia de los chorros isotérmicos donde solo es relevante una inestabilidad mecánica (Kelvin-Helmholtz) que da lugar al núcleo potencial, la capa térmica formada también entre el fluido inyectado y el ambiente receptor comienza a tener relevancia dando lugar a una llamada inestabilidad térmica. Es importante mencionar que los núcleos denso y potencial, generados partir de inestabilidades con diferentes orígenes (velocidad y temperatura) no deben romper o terminar necesariamente al mismo tiempo, esto dependerá principalmente de las condiciones de inyección. La longitud de dichos núcleos se define a partir de valores promedio y en este trabajo se utilizan dos métodos, el primer método consistió en hacer un análisis visual a partir de contornos, desde luego es más difícil de determinar dichas regiones, pero da una noción rápida de las diferencias en las longitudes de los núcleos potencial y denso de los casos bajo estudio. El segundo es gráfico y se analiza la magnitud de la componente axial de velocidad y la densidad. Ambas propiedades se analizan a lo largo de la línea central del chorro. La longitud de cada núcleo se determina ubicando el punto donde se pierde el 1% del valor inicial de la propiedad de interés [28], similar a lo que sucede con la capa límite. Estos métodos utilizados para la caracterización de los núcleos se pueden ver en las **Figs. 24 y 25**.



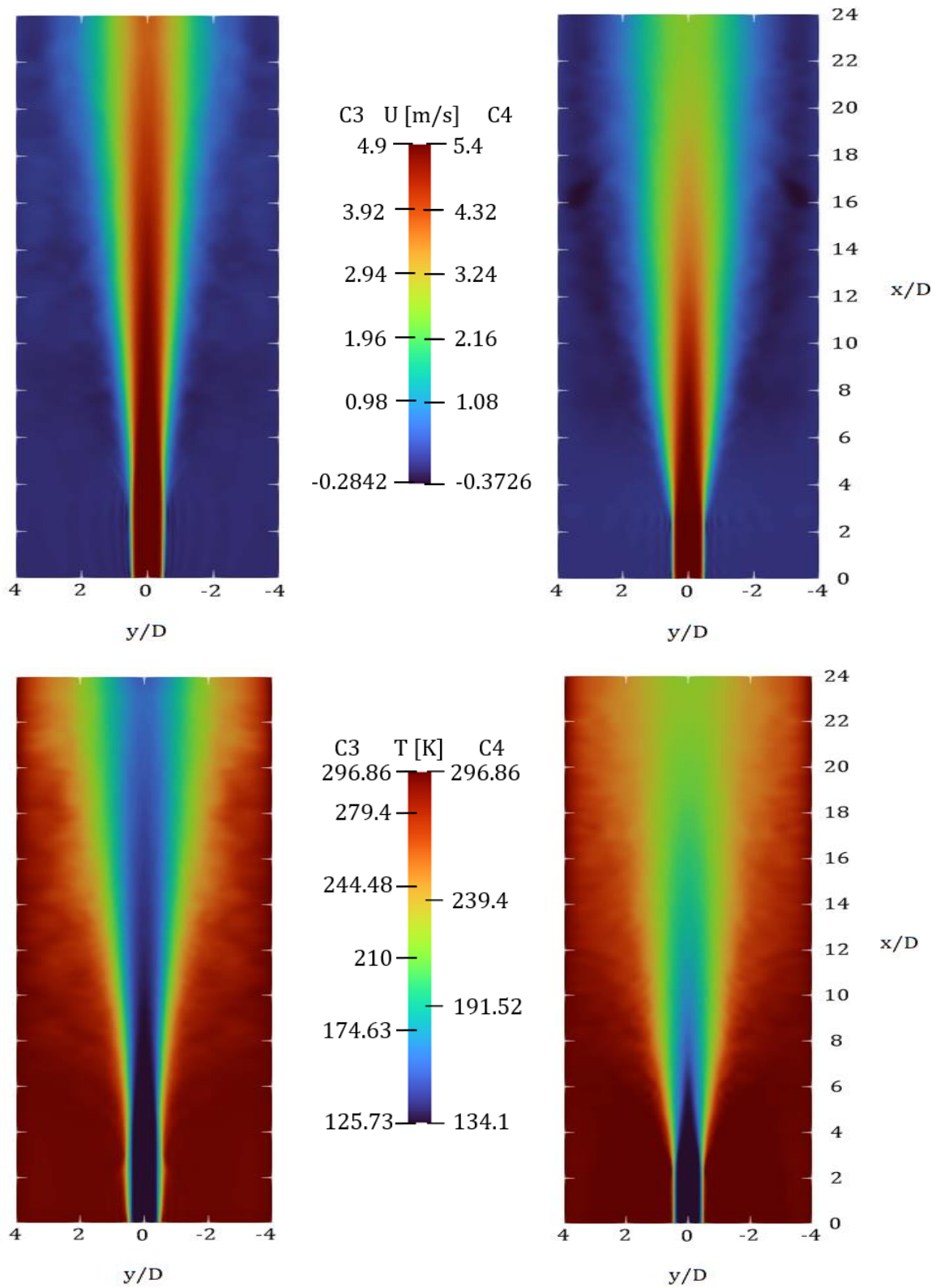


Figura 24. Se muestra el comportamiento del chorro respecto a la densidad, velocidad axial y temperatura a lo largo del dominio por los casos transcrito (izquierda) y supercrítico (derecha).

En la **Fig. 24** se muestran contornos de distintas propiedades considerando un corte longitudinal en la sección media de los chorros. Cuando se comparan estos resultados con la imagen obtenida a través de los valores promedio, se observa que a pesar de que, si existe cierta variación, las zonas del núcleo denso y potencial si se encuentran cerca de la zona que se obtuvo con el procedimiento de Cao (2009) [28]. También se puede distinguir que el caso transcrito tiene un mayor núcleo denso y potencial en comparación con los núcleos supercríticos. Desde el punto de vista morfológico los contornos de temperatura y velocidad son muy similares. Por otro lado, es prácticamente imposible determinar la longitud del núcleo denso a partir del contorno de temperatura.

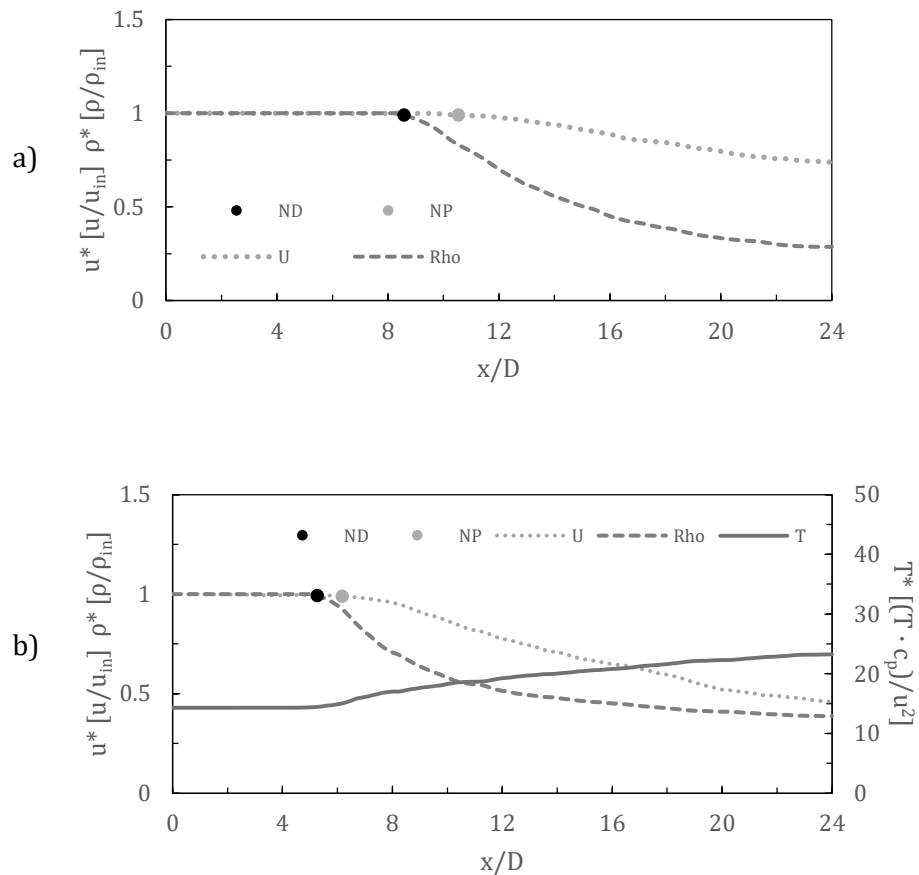


Figura 25. Densidad (R), temperatura (T) y velocidad (U) a lo largo de la línea central para los casos C3 a) y C4 b).

Las curvas densidad, velocidad y temperatura se muestran en la **Fig. 25**. A través de este método es mucho más sencillo identificar los núcleos. Ahí, se colocaron puntos de diferentes colores para indicar el fin del núcleo denso (punto negro) y núcleo potencial (punto negro). Así como en los contornos la temperatura y la velocidad de inyección tiene comportamientos muy regulares con tendencias lineales algunos diámetros aguas abajo del fin del núcleo denso y lo mismo sucede con la velocidad. Esto es de esperarse ya que los contornos también son muy semejantes. En ambos casos,

transcrítico y supercrítico, la capa térmica incrementa su espesor mucho más rápido que la capa dinámica o de velocidad, por lo que el núcleo denso rompe en una distancia más corta. Al reducir la relación de densidad entre el fluido inyectado y el ambiente la diferencia entre las longitudes de los núcleos denso y potencial, también se reduce. En la **Fig. 26**, se muestran las longitudes de los núcleos densos obtenidos a partir de las simulaciones se comparan con la correlación de Branam y Mayer, determinada numéricamente mediante el efecto Raman. También se muestra la relación obtenida por Chehroudi, pero difiere de forma importante de la correlación, lo cual se debe a que Chehroudi usa la técnica Shadowgraph. En esta técnica se generan regiones claras y oscuras, asociadas a regiones densas y ligeras. Entonces, como vimos en los contornos de temperatura o densidad obtener un valor numérico a partir de una imagen puede ser algo complicado, por lo que podría ser viable meramente como algo cualitativo.

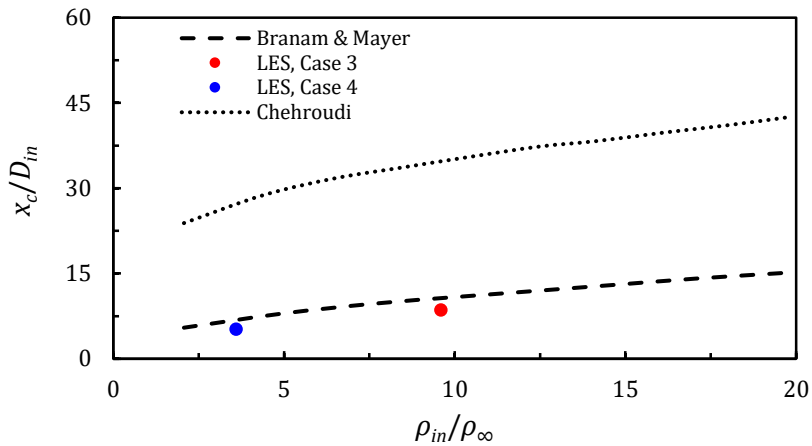


Figura 26. Longitudes del núcleo denso obtenidos con las simulaciones en comparación con el modelo de Branam y Mayer, así como el modelo de Chehroudi.

Cabe mencionar que la longitud de un núcleo denso está relacionada directamente con el tiempo de mezclado entre el fluido inyectado y el medio circundante. El núcleo denso supercrítico es más de la mitad que el del caso transcrítico, pero la relación de densidades casi una tercera parte del transcrítico. La mayor longitud del núcleo denso transcrítico se debe a dos cosas, primero al tener una mayor relación de densidad, y segundo por presentar el llamado “escudo térmico” promoviendo que la relación de densidad se mantenga aguas abajo logrando una mayor penetración.

En ambos casos, las fluctuaciones de temperatura y velocidad en la región del cortante, previo a la desaparición del núcleo denso y potencial, están fuertemente relacionadas con los vórtices de gran escala originados en dicha zona. Para demostrarlo, en este trabajo se monitoreo temporalmente la temperatura y la componente transversal de velocidad (w) en el plano xz , aproximadamente $5D$ aguas abajo del punto de inyección. La **Fig. 27** muestra el comportamiento de los parámetros de interés en un intervalo de tiempo adimensional de hasta 60 tiempos adimensionales. El tiempo se

adimensionalizó de la siguiente forma $t^* = t U_{in}/D_{in}$. Las fluctuaciones de temperatura, y por consiguiente de densidad, se sincronizan con las fluctuaciones de la componente transversal de la velocidad en el tiempo. Esto sucede justo en la región del cortante (**Fig. 28b**), aguas arriba y abajo del rompimiento del núcleo potencial, donde los valores de energía cinética turbulenta son los más altos de todo el dominio de flujo, ver **Fig. 28b**. Los contornos con altos valores de energía cinética turbulenta y la visible sincronización de las fluctuaciones en la región mencionada muestran el rol predominante de las estructuras turbulentas de gran escala región del de capa cortante y la capa térmica, afectando fuertemente la transferencia de calor del fluido caliente al fluido frío. Esto mismo sucede con el caso supercrítico y es de esperarse ya que la diferencia entre los rompimientos de núcleo denso y potencial de los casos es relativamente bajas.

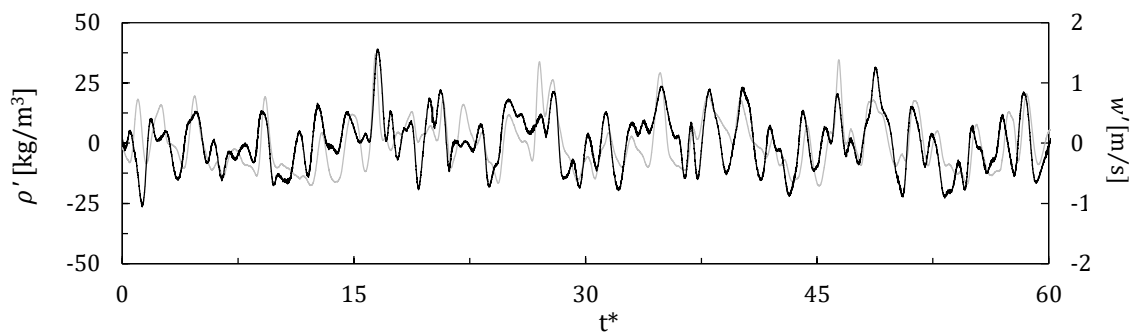


Figura 27. Señales temporales de las fluctuaciones de densidad de la componente de la velocidad transversal.

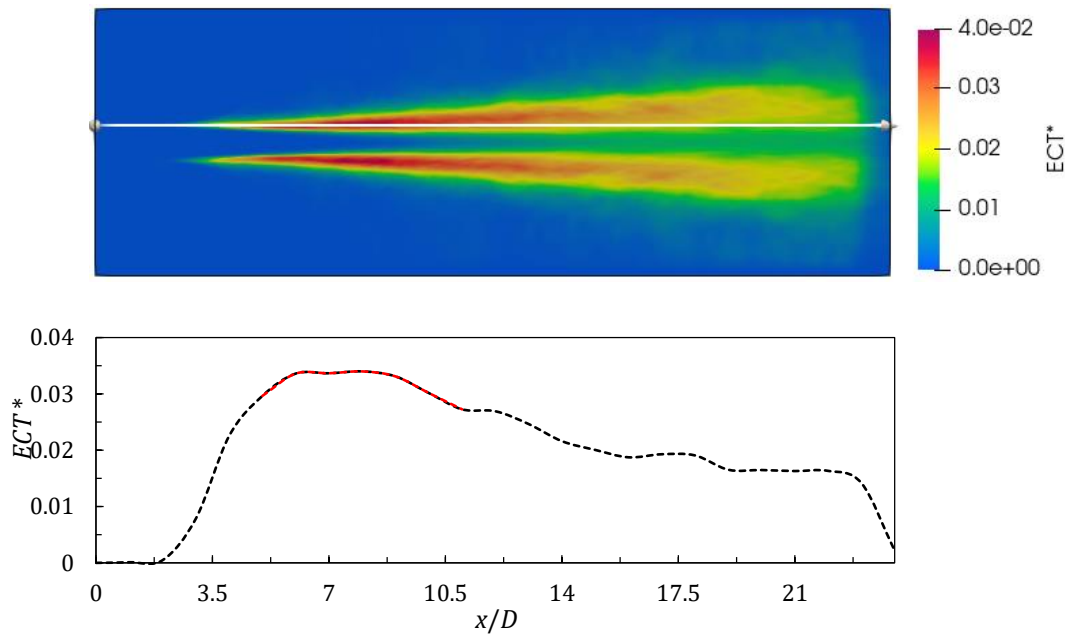


Figura 28. Curvas de energía cinética turbulenta a lo largo de la región del cortante (a). Contornos de energía cinética turbulenta del caso transcrito (b).

5.2 Pseudosimilaridad

La siguiente zona de interés que se abordara en este trabajo es la de autosimilaridad. Esta región se puede encontrar en muchos flujos turbulentos, pero en el caso de los chorros de densidad variable no existe como tal, en cambio existe un aproximado de esta región; Wang (2008) [29] se refiere a esta zona como la de pseudosimilaridad. Para corroborar que en nuestra simulación ya se alcanzó esta región, se obtuvieron perfiles radiales de la velocidad promedio en el sentido de la corriente, normalizada por la velocidad promedio en el eje central del chorro en cada para cada posición axial. Como se puede observar en la **Fig. 29**, para ambos casos las curvas comienzan a tener un comportamiento que puede ser representado de buena manera a través de una función Gaussiana. Sin embargo, se puede observar que existen ciertas variaciones entre ambos casos. Estas variaciones pueden ser debidas a que el confinamiento empieza a tener efectos sobre el chorro [29] y/o a que el dominio no es lo suficientemente grande (transversalmente) como para que el chorro se desarrolle libremente.

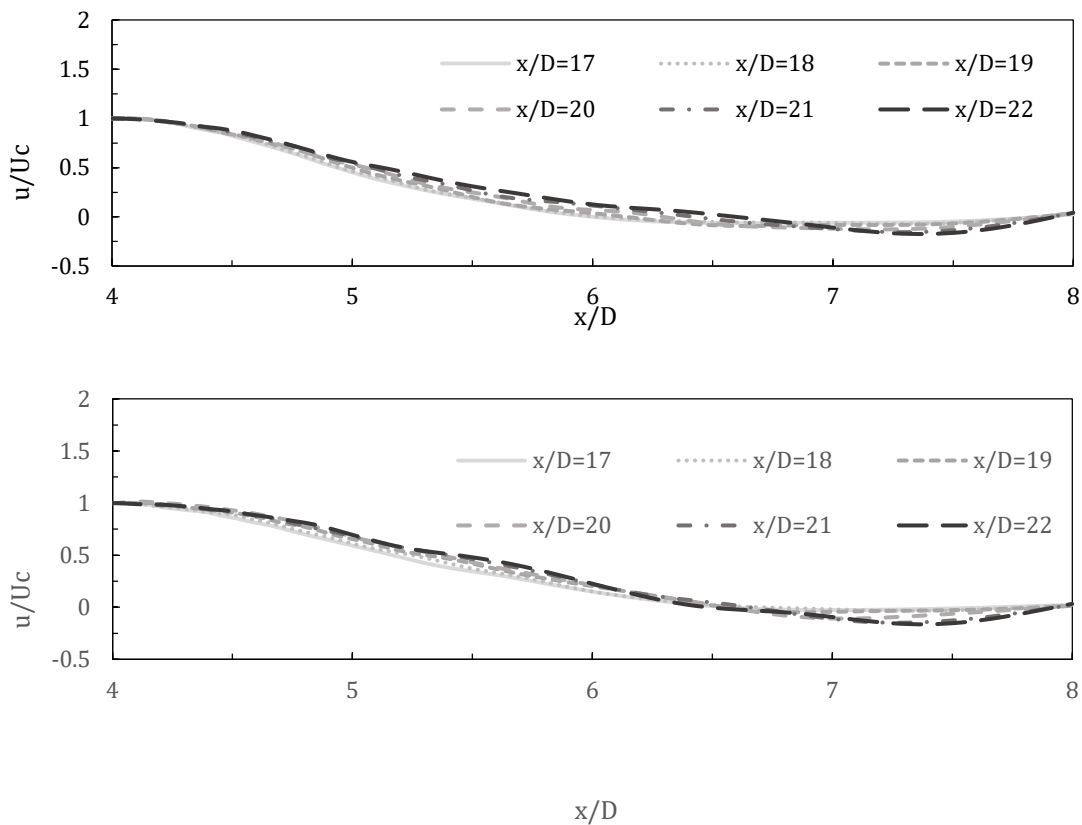


Figura 29. Perfiles de la velocidad promedio en sentido de la corriente para la demostración de la pseudosimilaridad en los casos transcrito (arriba) y supercrítico (abajo).

5.3 Mapas de anisotropía invariante

Para este análisis se obtuvo información en diferentes regiones del dominio computacional (D, F) para observar el chorro aguas arriba y aguas abajo. Asimismo, se obtuvieron datos a lo largo de la línea del cortante.

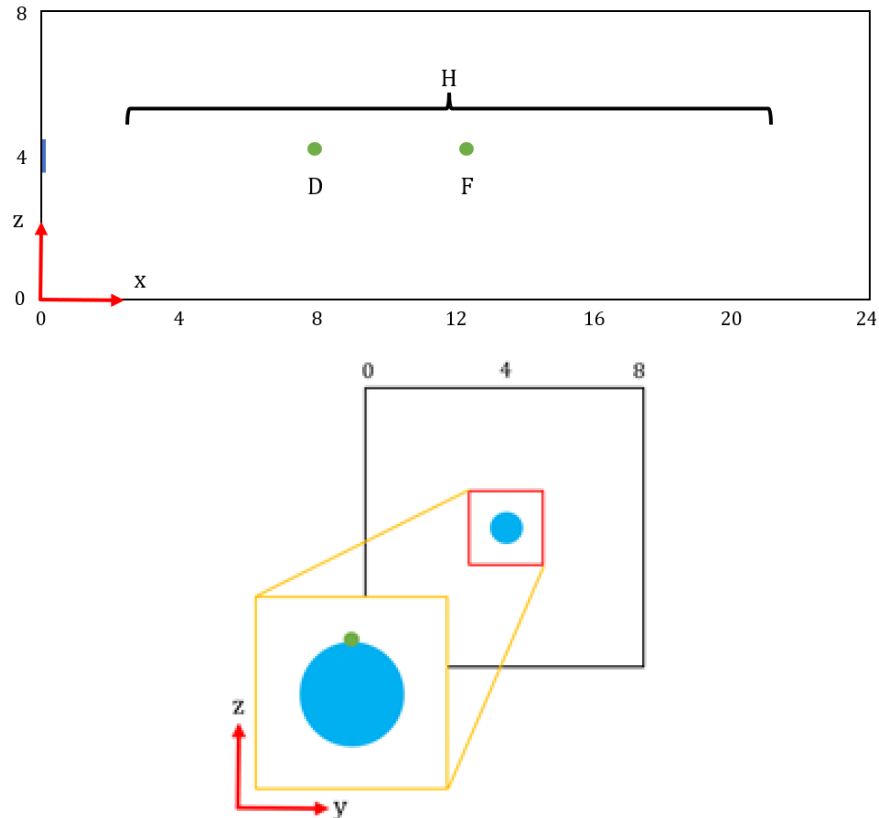


Figura 30. Representación de las regiones analizadas a través del AIM en diferentes vistas.

Los únicos puntos utilizados y representados son los puntos mostrados en la **Fig. 30**. Esto se debe a que como se trata de una simulación numérica, para que comience el desarrollo de la turbulencia es necesario el generar ruido al inicio de ésta. Por esta razón los resultados mostrados cerca del punto de inyección son omitidos y únicamente se utilizan D, F y la serie de puntos definidos en el tramo H. En la **Fig. 31** se muestran los dos puntos D y F, como se observa, el caso transcrito es de color verde mientras que el supercrítico es de color azul. En D, el caso que tiene una mayor aproximación a la región isotrópica es el supercrítico, esto se puede explicar viendo el núcleo denso y potencial, ya que para que exista una turbulencia isotrópica, primero se debe empezar a mezclar el fluido inyectado con el medio y en el primer caso esta mezcla se lleva a cabo en diámetros posteriores. A pesar de esto, ambos se encuentran cerca de la turbulencia axisimétrica en forma de “cigarro” (una componente mayor a las otras dos) mientras que en F ambos se encuentran cerca de la región isotrópica, C4 sigue

del lado derecho, en cambio se observa que C3 se aproxima a la turbulencia axisimétrica de forma de “panqueque” (una componente menor a las otras dos).

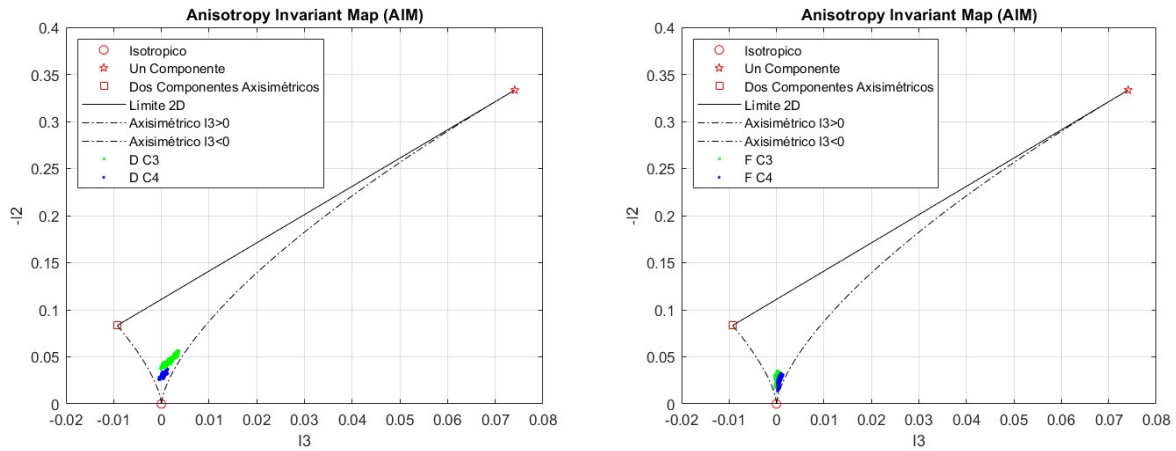


Figura 31. Mapas de anisotropía invariante en D y F para los casos C3 y C4.

La región H es representada en la **Fig. 32**, en esta se observa el comportamiento general de la turbulencia a lo largo de la capa cortante en ambos casos. Como era de esperarse, ambos casos empiezan alejados de la zona isotrópica pero conforme se empieza a avanzar en dirección longitudinal, se acerca a esta zona hasta alcanzarla. A su vez, al igual que en la **Fig. 31**, aunque ambos casos se van acercando, cada uno se encuentra en una diferente zona de turbulencia asimétrica.

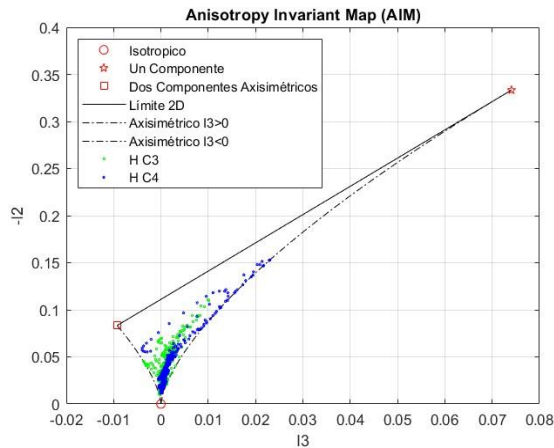


Figura 32. Mapa de anisotropía invariante de todo el dominio computacional (H) para los casos C3 y C4.

CAPÍTULO 6. CONCLUSIONES

Las simulaciones numéricas resultan una herramienta altamente efectiva en la investigación científica e industrial, una vez lograda la infraestructura necesaria para el trabajo numérico, es posible realizar un número importante de pruebas sin la necesidad de experimentos físicos con prototipos y modelos, incluso en ambientes que pudieran resultar peligrosos o extremos para la condición humana. Los fluidos supercríticos, sin importar la especie química o mezcla, presentan condiciones fuera de las encontradas en cualquier parte del planeta. No obstante, bajo las condiciones artificiales adecuadas es posible la investigación, de ahí la relevancia del trabajo experimental y numérico.

En este trabajo se analizó numéricamente el comportamiento de dos chorros a condiciones supercríticas con el objetivo de conocer más a fondo el fenómeno de la inyección transcítica y supercrítica, usando nitrógeno como fluido de trabajo. Al considerar números de Reynolds relativamente altos al inyectar nitrógeno, es necesario el uso de métodos numéricos para abordar la turbulencia en el fenómeno. La técnica seleccionada para dar solución a las ecuaciones de gobierno fue la simulación numérica de grandes escalas, al cual se le incorporaron modelos corregidos de baja presión, para que pudieran funcionar de buena forma a condiciones elevadas de presión y temperatura, y obtener así valores más exactos de las propiedades térmicas y de transporte. Los modelos utilizados son la ecuación de estado de Soave-Redlich-Kwong y los modelos de viscosidad dinámica y conductividad térmica de Chung. Los flujos analizados son los ya conocidos caso 3 y caso 4 de los experimentos de Wolfgang Mayer de 2002. A partir de los resultados se concluye lo siguiente:

- La herramienta numérica es capaz de simular el flujo a condiciones transcítica y supercríticas.
- Los contornos de densidad y temperatura no evolucionan de la misma forma, aunque están directamente relacionadas.
- Es inviable encontrar la longitud del núcleo denso a partir de los contornos de temperatura.
- El núcleo denso y potencial rompen en diferentes posiciones axiales.
- En ambos casos, el núcleo denso rompe primero.
- Para el caso transcítico, el núcleo potencial rompe 2.1D aguas abajo del núcleo denso.
- Para el caso supercrítico, el núcleo potencial rompe 0.3D aguas abajo del núcleo denso.
- La diferencia entre los rompimientos de los chorros se redujo con la relación de densidad.
- La turbulencia de la región del cortante, previo a la región de pseudosimilaridad es altamente anisotrópica.

Lo anterior permite dar un paso más adelante para el mejor entendimiento del fenómeno de inyección a condiciones supercríticas.

APÉNDICE

A.1 Cálculo de la densidad

En el capítulo 3 se desarrolló la ecuación generalizada de estado hasta obtener la forma cúbica de esta para usar el método de Cardano y así poder resolverla. A continuación, se ofrece un ejemplo de cómo se llevó a cabo este proceso con nitrógeno a una temperatura de 300 [K], una presión de 3 [MPa] y usando la ecuación de SRK.

La ecuación cúbica de estado normalizada es la siguiente:

$$v^3 + (d_1b - b - \frac{RT}{P})v^2 + (d_2b^2 - d_1b^2 - \frac{RTd_1b}{P} + \frac{a\alpha}{P})v + (-\frac{a\alpha b}{P} - d_2b^3 - \frac{RTd_2b^2}{P}) = 0$$

Se obtienen b_0 , b_1 , y b_2

$$b_2 = d_1b - b - \frac{RT}{P}$$

$$b_1 = d_2b^2 - d_1b^2 - \frac{RT}{P}d_1b + \frac{a\alpha}{P}$$

$$b_0 = -\frac{a\alpha b}{P} - d_2b^3 - \frac{RT}{P}d_2b^2$$

Tomando en cuenta que el fluido de trabajo es nitrógeno y se usa el modelo SRK

- $d_1 = 1$ y $d_2 = 0$
- $R = 296.8$ [Pa · m³/kg · K]
- $P_c = 3.3958$ [MPa] y $T_c = 126.192$ [K]
- $T_r = T/T_c = 300/126.192 = 2.377$ [-]
- $w_{\text{nitrógeno}} = 0.0372$

Al sustituir estos valores

$$b = 9.56 \times 10^{-4}$$

$$a = 176.58$$

$$f(w) = 0.538$$

$$\alpha = 0.502$$

Dando como resultado que b_0 , b_1 , y b_2 sean:

$$b_2 = -0.0296$$

$$b_1 = 2.56 \times 10^{-7}$$

$$b_0 = -2.82 \times 10^{-8}$$

Mientras que los parámetros del método de Cardano quedan como:

$$pr = -2.93 \times 10^{-4}$$

$$qr = -1.96 \times 10^{-6}$$

$$\Delta = 1.09 \times 10^{-13}$$

Como el determinante es mayor a 0, es el caso donde solo se puede obtener una raíz real

$$v_i = 2.97 \times 10^{-2}$$

v_i es el resultado de la ecuación cúbica de estado, por lo que representa el volumen específico. Por último, solo resta convertir este valor a densidad (su inverso) y comparar el resultado con el proporcionado por el NIST

$$\rho = 33.67 \text{ [kg/m}^3\text{]}$$

$$\rho_{NIST} = 33.8 \text{ [kg/m}^3\text{]}$$

A.2 Propiedades termodinámicas de un gas real

En esta parte se explica el proceso que se llevó a cabo para la obtención de los modelos obtenidos para el cálculo de estas propiedades. La ecuación de estado que se usó es la siguiente (por cuestiones de facilidad aquí se usa la ecuación con la densidad como una de sus variables):

$$P = \frac{\rho RT}{1 - b\rho} - \frac{a\rho^2}{1 + d_1 b\rho + d_2 b^2 \rho^2}$$

A.2.1 ENERGÍA INTERNA

La primera propiedad que se desarrollará es la energía interna que se definió como:

$$e = e_0 + e_{DP}$$

e_0 representa el cálculo de energía interna de un gas real, mientras que e_{DP} representa la función de desvío a partir del estado de gas ideal, donde:

$$e_{DP} = \int \left(\frac{P}{\rho^2} - \frac{T}{\rho^2} \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_\rho \right) dp$$

El primer paso es calcular la $\left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_\rho$

$$\left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_\rho = \frac{\rho R}{1 - b\rho} - \frac{da\alpha}{dT} \left(\frac{\rho^2}{1 + d_1 b\rho + d_2 b^2 \rho^2} \right)$$

Del capítulo 3 se saben los valores de a y α donde a depende de la temperatura crítica y $\frac{da\alpha}{dT}$ quedaría como:

$$\frac{da\alpha}{dT} = a \frac{d\alpha}{dT} = a \frac{d}{dT} \left(\left[1 + f(w) \left(1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^{0.5} \right) \right]^2 \right)$$

La derivada resultante se resuelve como una función elevada a un exponente $\frac{du^n}{dx} = nu^{n-1} \frac{du}{dx}$

$$a \frac{d\alpha}{dT} = a \left(2 \left[1 + f(w) \left(1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^{0.5} \right) \right] \left(-0.5 f(w) \frac{T^{-0.5}}{T_c^{0.5}} \right) \right)$$

Desarrollando el resultado y tomando en cuenta el valor de α

$$a \frac{d\alpha}{dT} = a \left(-f(w) \sqrt{\frac{\alpha}{TT_c}} \right)$$

Ya que se tiene $\left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_\rho$ y $\frac{da\alpha}{dT}$ obtenemos e_{DP}

$$e_{DP} = \int \left(\frac{\frac{\rho RT}{1 - b\rho} - \frac{\alpha \rho^2}{1 + d_1 b\rho + d_2 b^2 \rho^2}}{\rho^2} - \frac{T}{\rho^2} \left(\frac{\rho R}{1 - b\rho} - \frac{da\alpha}{dT} \left(\frac{\rho^2}{1 + d_1 b\rho + d_2 b^2 \rho^2} \right) \right) \right) dp$$

Desarrollando la primera parte

$$\frac{\frac{\rho RT}{1 - b\rho} - \frac{\alpha \rho^2}{1 + d_1 b\rho + d_2 b^2 \rho^2}}{\rho^2} = \frac{RT}{\rho - b\rho^2} - \alpha \left(\frac{1}{1 + d_1 b\rho + d_2 b^2 \rho^2} \right)$$

Desarrollando la segunda parte

$$-\frac{T}{\rho^2} \left(\frac{\rho R}{1 - b\rho} - \frac{da\alpha}{dT} \left(\frac{\rho^2}{1 + d_1 b\rho + d_2 b^2 \rho^2} \right) \right) = -\frac{RT}{\rho - b\rho^2} + T \frac{da\alpha}{dT} \left(\frac{1}{1 + d_1 b\rho + d_2 b^2 \rho^2} \right)$$

Como se puede observar en ambas partes hay un término semejante de signo contrario, por lo que se restan entre sí. Agrupando los términos restantes queda:

$$e_{DP} = \int \left(T \frac{da\alpha}{dT} - a\alpha \right) \left(\frac{1}{1 + d_1 b\rho + d_2 b^2 \rho^2} \right) dp$$

Al ya tener la integral definida con la ecuación de estado generalizada, se hace uso de un procedimiento similar al de Kim (2012) [30], debido a que facilita el proceso de integración. Para esto, las constantes d_1 y d_2 son sustituidas por $\delta_1 + \delta_2$ y $\delta_1 \delta_2$ respectivamente.

$$e_{DP} = \int \left(T \frac{da\alpha}{dT} - a\alpha \right) \left(\frac{1}{1 + (\delta_1 + \delta_2)b\rho + (\delta_1 \delta_2)b^2 \rho^2} \right) dp$$

$$e_{DP} = \int \left(T \frac{da\alpha}{dT} - a\alpha \right) \left(\frac{1}{(1 + \delta_1 b\rho + \delta_2 b\rho + (\delta_1 \delta_2)b^2 \rho^2)} \right) dp$$

$$e_{DP} = \int \left(T \frac{da\alpha}{dT} - a\alpha \right) \left(\frac{1}{(1 + \delta_1 b\rho)(1 + \delta_2 b\rho)} \right) dp$$

$$e_{DP} = \left(T \frac{da\alpha}{dT} - a\alpha \right) \int \left(\frac{1}{(1 + \delta_1 b\rho)(1 + \delta_2 b\rho)} \right) dp$$

Integrando a través de fracciones parciales y cambio de variable

$$e_{DP} = \left(T \frac{da\alpha}{dT} - a\alpha \right) \left[\frac{1}{(\delta_1 - \delta_2)b} \left(\text{Ln} \left(\frac{1 + \delta_1 b\rho}{1 + \delta_2 b\rho} \right) \right) \right]$$

la energía interna de un gas real quedaría como:

$$e = e_0 + \left(T \frac{da\alpha}{dT} - a\alpha \right) \left[\frac{1}{(\delta_1 - \delta_2)b} \left(\text{Ln} \left(\frac{1 + \delta_1 b\rho}{1 + \delta_2 b\rho} \right) \right) \right]$$

Donde la energía interna de gas ideal se calcularía como $e_0 = c_{v,0}T$. Mientras que los valores de los parámetros δ_1 y δ_2 dependen de la ecuación de estado que se esté empleando como se observa en la Tabla 4 [30].

Tabla 4.

	Peng-Robinson	Soave Redlich-Kwong
δ_1	$1 + \sqrt{2}$	1
δ_2	$1 - \sqrt{2}$	0

A.2.2 CAPACIDAD TÉRMICA A VOLUMEN CONSTANTE

Para obtener las propiedades restantes (capacidad térmica específica isocórica, isobárica y la velocidad del sonido), es necesario definir las derivadas $\left(\frac{\partial P}{\partial \rho}\right)_T$ y $\frac{d\alpha\alpha^2}{d^2T}$. Para ambos casos se resuelven como la derivada de la división de dos funciones $\frac{d}{dx}\left(\frac{u}{v}\right) = \frac{v\left(\frac{du}{dx}\right) - u\left(\frac{dv}{dx}\right)}{v^2}$ y quedarían como:

$$\left(\frac{\partial P}{\partial \rho}\right)_T = \frac{RT}{(1 - b\rho)^2} - \frac{a\alpha\rho(2 + (\delta_1 + \delta_2)b\rho)}{(1 + (\delta_1 + \delta_2)b\rho + \delta_1\delta_2b^2\rho^2)^2}$$

$$\frac{d\alpha\alpha^2}{d^2T} = \frac{a}{2} \left(\frac{f(w)^2}{TTc} + f(w) \sqrt{\frac{\alpha}{T^3Tc}} \right)$$

La capacidad térmica específica a volumen constante (isocórico) es:

$$c_v = \frac{de}{dT}$$

De tal forma que

$$c_v = \frac{d}{dT} \left(e_0 + \left(T \frac{d\alpha\alpha}{dT} - a\alpha \right) \left[\frac{1}{(\delta_1 - \delta_2)b} \left(\ln \left(\frac{1 + \delta_1 b\rho}{1 + \delta_2 b\rho} \right) \right) \right] \right)$$

Al aplicar la derivada con respecto a la temperatura a la energía interna de gas ideal da como resultado la capacidad térmica a volumen constante de gas ideal, por lo que el primer término queda resuelto. En cuanto al segundo término, solo la parte de $\left(T \frac{d\alpha\alpha}{dT} - a\alpha \right)$ depende de la temperatura y por tanto es en la que se trabajará.

$$\frac{d}{dT} \left(T \frac{d\alpha\alpha}{dT} - a\alpha \right) = \frac{d}{dT} \left(T \frac{d\alpha\alpha}{dT} \right) - \frac{d\alpha\alpha}{dT}$$

$\frac{d\alpha\alpha}{dT}$ ya se tiene de anteriores cálculos por lo que $\frac{d}{dT} \left(T \frac{d\alpha\alpha}{dT} \right)$ sería:

$$\frac{d}{dT} \left(T \frac{d\alpha\alpha}{dT} \right) = T \frac{d\alpha\alpha^2}{d^2T} + \frac{d\alpha\alpha}{dT}$$

Entonces

$$\frac{d}{dT} \left(T \frac{d\alpha\alpha}{dT} - a\alpha \right) = \left(T \frac{d\alpha\alpha^2}{d^2T} + \frac{d\alpha\alpha}{dT} \right) - \frac{d\alpha\alpha}{dT}$$

$$\frac{d}{dT} \left(T \frac{d\alpha\alpha}{dT} - a\alpha \right) = T \frac{d\alpha\alpha^2}{d^2T}$$

De ahí que c_v sea:

$$c_v = c_{v,0} + \left(T \frac{da\alpha^2}{d^2T} \right) \left[\frac{1}{(\delta_1 - \delta_2)b} \left(\text{Ln} \left(\frac{1 + \delta_1 bp}{1 + \delta_2 bp} \right) \right) \right]$$

$$c_v = c_{v,0} + \left[\frac{T}{(\delta_1 - \delta_2)b} \left(\frac{da\alpha^2}{d^2T} \right) \left(\text{Ln} \left(\frac{1 + \delta_1 bp}{1 + \delta_2 bp} \right) \right) \right]$$

A.2.3 ECUACIÓN POLINÓMICA DEL TRC (THERMODYNAMICS RESEARCH CENTER)

Como se observa en la energía interna y la capacidad térmica a volumen constante de gas real, es necesario el cálculo para gas ideal de estas mismas propiedades, esto se logra mediante el uso de la ecuación polinómica del Centro de Investigaciones Termodinámicas (TCR, Thermodynamics Research Center) [21] que se muestra a continuación:

$$C_p^\circ / R_g = a_0 + a_1 T + a_2 T^2 + a_3 T^3 + a_4 T^4$$

Donde:

- a_i (i= 0-4) son parámetros del polinomio y su valor depende de la sustancia que se emplee.
- T es la temperatura, K.
- R_g es la constante (universal o particular) del gas, J/kg · K.
- C_p° es la capacidad térmica a presión constante, J/kg · K.

Para el caso específico del nitrógeno, los valores para cada término de a_i son respectivamente: $a_0= 3.539$, $a_1= -0.261 \times 10^{-3}$, $a_2= 0.007 \times 10^{-5}$, $a_3= 0.157 \times 10^{-8}$ y $a_4= -0.099 \times 10^{-11}$.

Una vez obtenido el valor de C_p° el proceso para la obtención de la capacidad térmica isocórica de gas ideal (C_v°) es sencillo, ya que de la relación termodinámica $C_p^\circ - C_v^\circ = R_g$ simplemente se despeja la variable de interés C_v° y así es como se obtiene este valor.

A.2.4 CAPACIDAD TÉRMICA A PRESIÓN CONSTANTE

El cálculo de c_p para el caso real es relativamente más complejo comparado con el ideal donde únicamente se emplea la relación $c_p = R + c_v$. El primer paso para obtener esta relación es el considerar a la entalpía (h) y entropía (s) como función de la temperatura y presión

$$s(T, p)$$

$$ds = \left(\frac{\partial s}{\partial T}\right)_p dT + \left(\frac{\partial s}{\partial p}\right)_T dp$$

$$h(T, p)$$

$$dh = \left(\frac{\partial h}{\partial T}\right)_p dT + \left(\frac{\partial h}{\partial p}\right)_T dp$$

Y se sabe que $\left(\frac{\partial h}{\partial T}\right)_p$ representa también c_p

$$dh = c_p dT + \left(\frac{\partial h}{\partial p}\right)_T dp$$

Considerando la relación de Gibbs para la entalpía y sustituyendo de las relaciones anteriores

$$dh = T ds + v dp$$

$$dh = T \left(\left(\frac{\partial s}{\partial T}\right)_p dT + \left(\frac{\partial s}{\partial p}\right)_T dp \right) + v dp$$

$$dh = T \left(\frac{\partial s}{\partial T}\right)_p dT + \left(v + T \left(\frac{\partial s}{\partial p}\right)_T \right) dp$$

Igualando los coeficientes dT y dp de las dos relaciones de entalpía que se tiene

$$\left(\frac{\partial s}{\partial T}\right)_p = \frac{c_p}{T}$$

$$v + T \left(\frac{\partial s}{\partial p}\right)_T = \left(\frac{\partial h}{\partial p}\right)_T$$

Utilizando la primera igualdad de la entropía y utilizando la cuarta relación de Maxwell $\left(\frac{\partial s}{\partial p}\right)_T = -\left(\frac{\partial v}{\partial T}\right)_p$ se obtiene la primera relación derivada para la obtención de c_p

$$ds = \frac{c_p}{T} dT - \left(\frac{\partial v}{\partial T}\right)_p dp$$

La segunda relación se obtiene de la misma igualdad usada con anterioridad y la tercera relación de Maxwell $\left(\frac{\partial s}{\partial v}\right)_T = \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_v$

$$ds = \frac{c_v}{T} dT + \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_v dv$$

Igualando las dos ecuaciones obtenidas de ds y despejando dT

$$\frac{c_p}{T} dT - \left(\frac{\partial v}{\partial T}\right)_p dp = \frac{c_v}{T} dT + \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_v dv$$

$$dT = \frac{T \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_v}{c_p - c_v} dv + \frac{T \left(\frac{\partial v}{\partial T}\right)_p}{c_p - c_v} dp$$

Se considera a la temperatura como $T(v, p)$ y derivando se obtiene

$$dT = \left(\frac{\partial T}{\partial v}\right)_p dv + \left(\frac{\partial T}{\partial p}\right)_v dp$$

Al igualar los coeficientes se puede obtener la relación deseada de cualquiera de las igualdades. Por lo tanto, se tiene de la primera igualdad

$$\frac{T \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_v}{c_p - c_v} = \left(\frac{\partial T}{\partial v}\right)_p$$

$$\frac{T \left(\frac{\partial v}{\partial T}\right)_p}{c_p - c_v} = \left(\frac{\partial T}{\partial p}\right)_v$$

$$c_p - c_v = T \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_v \left(\frac{\partial v}{\partial T}\right)_p$$

$$c_p = c_v + T \left(\frac{\partial v}{\partial T}\right)_p \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_v$$

Una forma opcional de esta relación es obtenida con la relación cíclica

$$\left(\frac{\partial v}{\partial p}\right)_T \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_v \left(\frac{\partial T}{\partial v}\right)_p = -1 \rightarrow \left(\frac{\partial v}{\partial p}\right)_T \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_v = -\left(\frac{\partial v}{\partial T}\right)_p$$

$$c_p = c_v - T \frac{\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_v^2}{\left(\frac{\partial p}{\partial v}\right)_T}$$

De la misma manera en que la ecuación de estado, esta relación se puede expresar en función de la densidad ya que sabemos que $v = \frac{1}{\rho}$. Por lo que de la expresión anterior resulta en:

$$c_p = c_v - \frac{T \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_v^2}{\rho^2 \left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)_T}$$

A.2.5 VELOCIDAD DEL SONIDO

La expresión para la velocidad del sonido es:

$$c_s = \sqrt{\left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)_s}$$

Mediante el uso de las relaciones termodinámicas es posible expresar esta ecuación de la siguiente manera

$$c_s = \sqrt{\frac{c_p}{c_v} \left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)_T}$$

En este momento ya se cuentan con todos los parámetros necesarios para determinar la velocidad del sonido.

A.3 Propiedades de transporte

El capítulo 3 muestra los métodos usados para el cálculo de la viscosidad y de la conductividad térmica. En ambos casos el método de Chung fue el más adecuado, por lo que se procedió a explicar en qué consistía. A continuación, se mostrará de manera más detallada el proceso con el cual se obtienen estas dos propiedades.

A.3.1 VISCOSIDAD

Al igual que en el caso del cálculo de la densidad, el elemento a usar es el nitrógeno, además de las condiciones en las que se encuentra son a 300 [K] y 3 [MPa]. Teniendo la ecuación del método de Chung para el cálculo de la viscosidad a altas presiones

$$\mu = \mu^* \frac{36.344(MT_c)^{1/2}}{V_c^{2/3}}$$

La masa molecular se obtiene al saber que elemento es (nitrógeno) al igual que la temperatura y el volumen crítico. Los valores son los siguientes:

$$M = 28.0134 \text{ [g/mol]}; T_c = 126.192 \text{ [K]}; V_c = 90.1 \text{ [cm}^3\text{/mol]}$$

Ya se tienen casi todos los datos necesarios, únicamente falta el factor empírico de corrección (μ^*)

$$\mu^* = \frac{(T^*)^{1/2}}{\Omega_v} \{F_c[(G_2)^{-1} + E_6 y]\} + \mu^{**}$$

Donde

- $T^* = 1.2593T_r$ donde T_r representa la temperatura reducida.
- $\Omega_v = [A(T^*)^{-B}] + C[\exp(-DT^*)] + E[\exp(-FT^*)]$ donde $A=1.16145$, $B=0.14874$, $C=0.52487$, $D=0.7732$, $E=2.16178$, $F=2.43787$.
- $F_c = 1 - 0.2756\omega + 0.059035\eta_r^4 + \kappa$ donde ω es el factor acéntrico, κ es una corrección especial para sustancias altamente polares y $\eta_r = 131.1 \frac{\eta}{(V_c T_c)^{0.5}}$
- $y = \frac{\rho V_c}{6}$ donde ρ representa la densidad en mol/cm^3 .
- $G_1 = \frac{1-0.5y}{(1-y)^3}$
- $G_2 = \frac{E_1 \{ [1 - \exp(-E_4 y)] / y \} + E_2 G_1 \exp(E_5 y) + E_3 G_1}{E_1 E_4 + E_2 + E_3}$
- $\mu^{**} = E_7 y^2 G_2 \exp[E_8 + E_9 (T^*)^{-1} + E_{10} (T^*)^{-2}]$

Para los parámetros E_1 al E_{10} se hace uso de una función lineal donde los coeficientes de dicha función se obtienen de la Tabla 5.

$$E_i = a_i + b_i \omega + c_i \eta_r^4 + d_i \kappa$$

Tabla 5.

i	a_i	b_i	c_i	d_i
1	6.324	50.412	-51.68	1189
2	1.21×10^{-3}	-1.154×10^{-3}	-6.257×10^{-3}	0.03728
3	5.283	254.209	-168.48	3898
4	6.623	38.096	-8.464	31.42
5	19.745	7.63	-14.354	31.53
6	-1.9	-12.537	4.985	-18.15
7	24.275	3.45	-11.291	69.35
8	0.7972	1.117	0.01235	-4.117
9	-0.2382	0.0677	-0.8163	4.025
10	0.06863	0.3479	0.5926	-0.727

Con toda la información anterior ya se puede obtener el cálculo de la viscosidad para las condiciones ya establecidas. Lo primero es obtener el momento dipolar (η) medidos en debyes y el factor de corrección κ , cuyos valores son 0 en ambos casos para el nitrógeno. Por lo tanto, $\eta_r = 0$ y el cálculo de E_i y F_c se simplifican.

$$F_c = 1 - 0.2756(0.0372) = 0.9897$$

$$T^* = 1.2593 \left(\frac{300 \text{ [K]}}{126.192 \text{ [K]}} \right) = 2.99$$

$$\begin{aligned} \Omega_v &= [1.16145(T^*)^{-0.14874}] + 0.52487[\exp(-0.7732T^*)] + 2.16178[\exp(-2.43787T^*)] \\ &= 1.04 \end{aligned}$$

La densidad se obtiene de la misma forma que se mostró al inicio de este apéndice, pero como se explicó en este apartado, las unidades de la densidad son distintas a la que se obtiene por lo que se debe hacer un análisis dimensional.

$$\begin{aligned} \rho_{obtenida} &= 33.666 \text{ [kg/m}^3\text{]} \\ \rho \left[\frac{\text{mol}}{\text{cm}^3} \right] &= \rho_{obtenida} \left[\frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \right] \cdot \left(\frac{1000 \text{ g}}{1 \text{ kg}} \right) \cdot \frac{1}{M \left[\frac{\text{g}}{\text{mol}} \right]} \cdot \left(\frac{1 \text{ m}^3}{1000000 \text{ cm}^3} \right) = \frac{\rho_{obtenida}}{M \cdot 1000} \\ &= \frac{33.666}{28.0134(1000)} = 1.2018 \times 10^{-3} \left[\frac{\text{mol}}{\text{cm}^3} \right] \end{aligned}$$

Calculando los demás parámetros

$$y = \frac{1.2018 \times 10^{-3} \left[\frac{\text{mol}}{\text{cm}^3} \right] (90.1 \left[\frac{\text{cm}^3}{\text{mol}} \right])}{6} = 0.01805$$

$$G_1 = \frac{1 - 0.5(0.01805)}{(1 - 0.01805)^3} = 1.0466$$

Para el cálculo de las E_i , la función lineal queda como $E_i = a_i + b_i\omega$ por lo que sus valores son:

- $E_1 = 8.199$
- $E_2 = 1.167 \times 10^{-3}$
- $E_3 = 14.739$
- $E_4 = 8.04$
- $E_5 = 20.0288$
- $E_6 = -2.366$
- $E_7 = 24.4$
- $E_8 = 0.838$
- $E_9 = -0.236$
- $E_{10} = 0.0816$

Con la obtención de los valores de las E_i , se procede a sacar los valores restantes

$$G_2 = \frac{8.199 \left\{ \frac{[1 - \exp(-8.04 \cdot 0.01805)]}{0.01805} \right\} + 1.167 \times 10^{-3} (1.0466) \exp(20.0288 \cdot 0.01805) + 14.739 (1.0466)}{8.199(8.04) + 1.167 \times 10^{-3} + 14.739}$$

$$= 0.952$$

$$\mu^{**} = 24.4(0.01805)^2(0.952) \exp[0.838 + -0.236(2.99)^{-1} + 0.0816(2.99)^{-2}] = 0.0163$$

$$\mu^* = \frac{(2.99)^{1/2}}{1.04} \{0.9897[(0.952)^{-1} + (-2.366)(0.01805)]\} + 0.0163 = 1.675$$

Por último, la viscosidad quedaría como:

$$\mu = 1.675 \cdot \frac{36.344(28.0134 \cdot 126.192)^{1/2}}{(90.1)^{2/3}} = 180.169$$

$$\mu = 180.169 [\mu P] = 18.0169 [\mu Pa \cdot s]$$

$$\mu_{NIST} = 18.386 [\mu Pa \cdot s]$$

Al comparar los dos resultados nos da un error del 2%, lo cual está dentro del 5% que se mencionó en el capítulo 3. Es importante mencionar que el error obtenido en este modelo también trae consigo

un error proveniente del modelo de ecuación de estado usada (en este caso SRK) para el cálculo de la densidad.

A.3.2 CONDUCTIVIDAD TÉRMICA

El modelo de Chung para el cálculo de la conductividad térmica a altas presiones es:

$$\lambda = \frac{31.2\eta^\circ\Psi}{M'}(G_2^{-1} + B_6y) + (qB_7y^2Tr^{1/2}G_2)$$

El peso molecular (M') se es el del nitrógeno, la temperatura reducida (Tr) es la misma que en el caso de la viscosidad ya que las condiciones en las que se calcula la conductividad térmica son las mismas, 300 [K] de temperatura a una presión de 3 [MPa]. Los demás parámetros se calculan como:

- $q = 3.586 \times 10^{-3} \left(\frac{[T_C/M']^{0.5}}{V_c^{2/3}} \right)$, los valores de T_C , V_c y M' ya son conocidos.
- $\Psi = 1 + \alpha\{[0.215 + 0.28288\alpha - 1.061\beta + 0.26665Z]/[0.6366 + \beta Z + 1.061\alpha\beta]\}$
- $\alpha = (C_v/R) - 3/2$ donde R es la constante del gas en J / mol · K, mismas unidades usadas para C_v
- $\beta = 0.7862 - 0.7109\omega + 1.3168\omega^2$
- $Z = 2 + 10.5Tr^2$
- $y = \frac{V_c}{6V}$ donde V representa el volumen de la sustancia en cm³/mol.
- $G_1 = \frac{1-0.5y}{(1-y)^3}$
- $G_2 = \frac{(B_1/y)[1-\exp(-B_4y)] + B_2G_1\exp(B_5y) + B_3G_1}{B_1B_4 + B_2 + B_3}$
- $\eta^\circ = 40.785 \frac{F_c(MT)^{1/2}}{V_c^{2/3}\Omega_v}$

Para el cálculo de la viscosidad a baja presión ya se tienen todos los valores necesarios del punto anterior. El único inconveniente que se tiene es que el resultado de este modelo está en μP mientras que para el modelo de la conductividad térmica se necesita que las unidades sean N · s / m², por lo que hay que hacer una conversión. Al igual que en el caso de la viscosidad con E_i los parámetros B_i se calculan a través de la misma función lineal. La única diferencia radica en los coeficientes que se obtienen de la Tabla 6.

$$B_i = a_i + b_i\omega + c_i\eta_r^4 + d_i\kappa$$

Tabla 6.

i	a_i	b_i	c_i	d_i
1	2.4166	0.74824	-0.91858	121.72
2	-0.50924	-1.5094	-49.991	69.983
3	6.6107	5.6207	64.76	27.039
4	14.543	-8.9139	-5.6379	74.344
5	0.79274	0.82019	-0.69369	6.3173
6	-5.8634	12.801	9.5893	65.529
7	91.089	128.11	-54.217	523.81

Con toda esta información y los valores obtenidos de procedimiento anterior se procede a calcular la conductividad térmica.

$$q = 3.586 \times 10^{-3} \left(\frac{[126.192 / 0.0280134]^{0.5}}{90.1^{2/3}} \right) = 1.198 \times 10^{-2}$$

$$Z = 2 + 10.5 \left(\frac{300}{126.192} \right)^2 = 61.343$$

$$\beta = 0.7862 - 0.7109(0.0372) + 1.3168(0.0372)^2 = 0.762$$

Para α se usa la constante del gas como $R = 8.314472 \text{ [J/mol} \cdot \text{K]}$, mientras que para el valor de C_v se obtiene mediante las propiedades térmicas y lo único que se debe hacer es pasar a las unidades correspondientes. Tomando esto en cuenta, se tiene que:

$$C_{v \text{ obtenida}} = 754.867 \text{ [J/kg} \cdot \text{K]}$$

$$\begin{aligned} C_v \left[\frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \right] &= C_{v \text{ obtenida}} \left[\frac{\text{J}}{\text{kg} \cdot \text{K}} \right] \cdot \left(\frac{1 \text{ kg}}{1000 \text{ g}} \right) \cdot M \left[\frac{\text{g}}{\text{mol}} \right] = \frac{C_{v \text{ obtenida}} \cdot M}{1000} \\ &= \frac{754.867(28.0134)}{1000} = 21.146 \left[\frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \right] \end{aligned}$$

Entonces α quedaría como:

$$\alpha = (21.146/8.314472) - 3/2 = 1.0433$$

$$\begin{aligned} \Psi &= 1 + 1.0433\{[0.215 + 0.28288(1.0433) - 1.061(0.762) + 0.26665(61.343)] \\ &\quad / [0.6366 + 0.762(61.343) + 1.061(1.0433)(0.762)]\} = 1.347 \end{aligned}$$

En el caso de γ y de G_1 son las mismas que las que se calcularon para la obtención de la viscosidad, por lo que solo faltaría los valores B_i . Al igual que en el caso anterior la ecuación lineal queda como $B_i = a_i + b_i \omega$

- $B_1 = 2.444$
- $B_2 = -0.565$
- $B_3 = 6.819$
- $B_4 = 14.211$
- $B_5 = 0.823$
- $B_6 = -5.387$
- $B_7 = 95.855$

$$G_2 = \frac{(2.444/0.01805)[1 - \exp(-14.211 \cdot 0.01805)] + (-0.565)(1.0466)\exp(0.823 \cdot 0.01805) + (6.819)(1.0466)}{(2.444)(14.211) + (-0.565) + 6.819}$$

$$= 0.9069$$

$$\eta^\circ = 40.785 \frac{0.9897 (28.0134 \cdot 300)^{1/2}}{90.1^{2/3} \cdot 1.04} = 177.037 [\mu P]$$

Como se mencionó anteriormente, las unidades que presenta este modelo de viscosidad a baja presión son las de μP , pero las que se necesitan son las de $N \cdot s/m^2$ y para eso se tiene que:

$$1 \times 10^6 \mu P = 0.1 N \cdot s/m^2$$

$$\eta^\circ = 177.037 [\mu P] = 1.77037 \times 10^{-5} [N \cdot s/m^2]$$

$$\lambda = \frac{31.2(1.77037 \times 10^{-5})(1.347)}{0.0280134} (0.9069^{-1} + (-5.387)(0.01805))$$

$$+ \left(1.198 \times 10^{-2} \cdot 95.855 \cdot 0.01805^2 \cdot \left(\frac{300}{126.192} \right)^{1/2} \cdot 0.9069 \right) = 0.02723 [W/m \cdot K]$$

$$\lambda_{obtenida} = 0.02723 [W/m \cdot K]$$

$$\lambda_{NIST} = 0.02705 [W/m \cdot K]$$

El error que se tiene en este caso es del 0.67% lo cual es esta dentro del 8% que nos menciona la bibliografía. Con esto se termina de explicar el proceso del cálculo de las propiedades térmicas como de transporte para gases reales. Un punto importante para remarcar es que desde el modelo de ecuación de estado que se escoge existe un cierto error que se va arrastrando hasta llegar a estas propiedades. Esto se puede observar desde el momento en que se obtiene la densidad ya existe un error y esa misma densidad es usada para el cálculo de las demás propiedades.

REFERENCIAS

- [1] Laminar Flow. (2002) *McGraw-Hill Concise Encyclopedia of Physics*. Recuperado de <https://encyclopedia2.thefreedictionary.com/laminar+flow>.
- [2] Connor, N. (2020) *¿Qué es el flujo laminar? Flujo viscoso: definición*. Recuperado de <https://www.thermal-engineering.org/es/que-es-el-flujo-laminar-flujo-viscoso-definicion/>.
- [3] Jet Flow. (2002) *McGraw-Hill Concise Encyclopedia of Physics*. Recuperado de <https://encyclopedia2.thefreedictionary.com/Jet+Flow>.
- [4] Shoberi, M. T. (2010). *Fluid mechanics for engineers: a graduate textbook*. Springer Science & Business Media.
- [5] Pope, S. B. (2000). *Turbulent flows*. Cambridge University.
- [6] Ball, C. G., Fellouah, H. & Pollard, A. (2012). The flow field in turbulent round free jets. *Progress in Aerospace Sciences*, 50, 1-26. doi: 10.1016/j.paerosci.2011.10.002
- [7] Lagarza, C. C. (2019). *Simulación numérica de grandes escalas de un proceso de inyección transcrítica*. (Tesis inédita de doctorado). Universidad Nacional Autónoma de México, Ciudad Universitaria, CDMX.
- [8] Pioro, I. & Mokry, S. (2011). Thermophysical Properties at Critical and Supercritical Conditions. En A. Belmiloudi. (Ed.), *Heat Transfer Theoretical Analysis, Experimental Investigations and Industrial Systems*. (pp. 573-592).
- [9] Navarro, G. R. (2019). *Modelos de turbulencia introductorio*. (pp. 5-7). Recuperado de https://www.researchgate.net/publication/335611158_Modelos_de_turbulencia_introductorio.
- [10] Lesieur, M. & Métais, O. (1996). New trends in large-eddy simulations of turbulence. *Annual review of fluid mechanics*, 28(1), 45-82. Recuperado de www.annualreviews.org/aronline.
- [11] Lele, S. K. (1992). Compact finite difference schemes with spectral-like resolution. *Journal of Computational Physics*, 103(1), 16-42.
- [12] Visbal, M. R. & Gaitonde, D. V. (2002). On the use of high-order finite-difference schemes on curvilinear and deforming meshes. *Journal of Computational Physics*, 181(1), 155-185. doi:10.1006/jcph.2002.7117

- [13] Jovičić, N., Breuer, M., & Jovanović, J. (2006). Anisotropy-invariant mapping of turbulence in a flow past an unswept airfoil at high angle of attack. *Journal of Fluids Engineering*, 128, 559-567.
- [14] Likkason, O. (2011). Spectral analysis of geophysical data. *Advances in Data, Methods, Models and Their Applications in Geoscience*, 27-52. doi: 10.5772/28070
- [15] Muhammad, L. & Manik, H. (2016). Signal processing for power spectral density (PSD). En C. Evans. (Ed.), *Signal processing for marine acoustic and dolphin using matlab* (pp. 15-25).
- [16] Liebenberg, L., & Meyer, J. P. (2006). The characterization of flow regimes with power spectral density distributions of pressure fluctuations during condensation in smooth and micro-fin tubes. *Experimental Thermal and Fluid Science*, 31(2), 127-140. doi: 10.1016/j.expthermflusci.2006.03.023
- [17] Martín, L. A & Pacheco, R. (2021). *Tema 9 – Propiedades de Transporte*. Studocu. Recuperado de <https://www.studocu.com/es/document/uned/quimica-fisica-ii-espectroscopia-y-estadistica-molecular/tema-9-propiedades-de-transporte/21676728>
- [18] Kuo, K. K. (2005). Principles of combustion. Hoboken: Wiley-Interscience.
- [19] Cengel, Y. & Boles, M. (2011). *Termodinámica*. Ciudad de México: Mcgraw-hill.
- [20] Poling, B. E., Prausnitz, J. M. & O'connell, J. P. (2001). *The properties of gases and liquids* (Vol. 5) New York: Mcgraw-hill.
- [21] Ivorra, C. (2020). Las fórmulas de Cardano-Ferrari. *Recuperado de la Universidad de Valencia*: <https://www.uv.es/ivorra/Libros/Ecuaciones.pdf>.
- [22] Ruiz, A. (2012). *Unsteady numerical simulations of transcritical turbulent combustion in liquid rocket engines* (Tesis doctoral).
- [23] Thermtest Instruments- Latin America (2020). *Conductividad térmica*. Recuperado de <https://thermtest.com/latinamerica/que-es-la-conductividad-termica>.
- [24] Mayer, W., Telaar, J., Branam, R., Schneider, G., & Hussong, J. (2003). Raman measurements of cryogenic injection at supercritical pressure. *Heat and Mass Transfer*, 39(8), 709-719. doi: 10.1007/s00231-002-0315-x
- [25] Poinso, T. J., & Lelef, S. K. (1992). Boundary conditions for direct simulations of compressible viscous flow. *Journal of Computational Physics*, 101(1), 104-129.

- [26] Salinas-Vázquez, M., Vicente, W., González-Rodríguez, C., Barrios-Bonilla, E., & Espinosa-Gayosso, A. (2010). Large Eddy Simulation of a jet flow with a suction/ejection system using immersed boundary conditions. *Journal of wind engineering and industrial aerodynamics*, 98(10-11), 618-627.
- [27] Banuti, D. T., & Hannemann, K. (2016). The absence of a dense potential core in supercritical injection: A thermal break-up mechanism. *Physics of Fluids*, 28(3), 035103-1 - 035103-19. doi: 10.1063/1.4943038
- [28] Cao, G., Kurnitski, J., Ruponen, M., & Seppänen, O. (2009). Experimental investigation and modeling of the attached plane jet velocity development characteristics in the transition process in a room. *HVAC&R Research*, 15(3), 489-508.
- [29] Wang, P., Fröhlich, J., Michelassi, V., & Rodi, W. (2008). Large-eddy simulation of variable-density turbulent axisymmetric jets. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 29(3), 654-664.
- [30] Kim, S. K., Choi, H. S. & Kim, Y. (2012). Thermodynamic modeling based on a generalized cubic equation of state for kerosene/LOx rocket combustion. *Combustion and Flame*, 159(3), 1351-1365.