

SIMULACIÓN NUMÉRICA DE FLUJOS SUPERSÓNICOS QUÍMICAMENTE ACTIVOS EN TÚNELES DE CHOQUE REFLEJADO

Gustavo A. Ríos Rodríguez*, José P. Tamagno⁺, Sergio A. Elaskar⁺

*Centro de Investigaciones Aplicadas, Instituto Universitario Aeronáutico
Ruta 20 km 5.5, Córdoba (5022), Argentina.
e-mail: gusadrr@yahoo.com.ar

⁺Departamento de Aeronáutica, Universidad Nacional de Córdoba
Av. Vélez Sarsfield 1601, Córdoba (5000), Argentina.
e-mail: jtamagno@efn.uncor.edu - selaskar@efn.uncor.edu

Palabras clave: Flujo hipersónico, desequilibrio químico, desequilibrio vibracional, esquema TVD upwind de Harten-Yee, características.

Resumen: Se presenta un esquema en volúmenes finitos para solucionar el flujo de gases en túneles de choque reflejado (*reflected shock tunnels*). El flujo es invíscido, cuasi-unidimensional, inestacionario y químicamente activo, con reacciones que evolucionan a velocidades finitas. El flujo es tal que no se alcanzan las condiciones de equilibrio químico ni vibracional. El sistema es resuelto utilizando la técnica de “*aproximación local por características*” en conjunto con el esquema TVD upwind de Harten Yee para el cálculo de los flujos numéricos. En las discontinuidades de contacto se aplica un “*solver*” de Riemann, que permite seguir las mismas e implementar una grilla móvil. La dependencia exponencial de la cinética de las reacciones con la temperatura hace que el conjunto de ecuaciones de conservación sea “*stiff*”, lo cual obliga a utilizar una técnica implícita de avance de la solución en el tiempo conocida como “*point implicit approach*”. El mecanismo de reacciones implementado describe la cinética química del aire a altas temperaturas, y no contempla la presencia de especies ionizadas. Dicho mecanismo asume 5 especies químicamente activas (N₂, O₂, N, O y NO) y la presencia del He como una especie inerte. Se predicen propiedades del flujo tales como: densidad, presión, temperatura, número de Mach, entalpía total del flujo, etc. También se estiman el tiempo de ensayo efectivo y la composición química del gas de prueba en la sección de ensayo. Se presentan resultados para el modo de operación *tailored interface* de un túnel de choque. Algunos de ellos son comparados con la solución teórica para gases perfectos.

1 INTRODUCCIÓN

Un método en volúmenes finitos es utilizado para resolver el flujo de gases en túneles de choque reflejado (*Reflected Shock Tunnels RST*). Estos son dispositivos que se utilizan para simular, durante tiempos muy breves (del orden de los milisegundos), las condiciones de flujo super/hipersónico que se requieren para realizar ensayos de unidades propulsoras conocidas como SCRAMjets (*Supersonic-Combustion Ram jets*). Dichos túneles se aplican también al estudio de la aerodinámica de vehículos hipersónicos, por ejemplo, en la condición de reentrada a la atmósfera terrestre. El flujo generado en los *RST* es de carácter pulsante, de muy elevada entalpía, en el cual se produce la excitación de los modos vibracionales y electrónicos de energía del gas y en el que no necesariamente se alcanzan las composiciones de equilibrio químico así como tampoco el equilibrio vibracional, dado que el tiempo de tránsito de las partículas de gas en el interior del túnel es del mismo orden de magnitud que los tiempos característicos de las reacciones químicas y el vibracional.

Se asume que el gas de ensayo es aire, compuesto por 5 especies químicamente activas (N_2 , O_2 , N , O y NO). El He se incluye como especie inerte, por lo que sólo intervendrá como “socio de colisión” (*third-body collision partner*) en las reacciones de las otras especies. El He se encuentra, en un principio, altamente comprimido en el *driver* del tubo de choque que forma parte del túnel.

Se implementa un mecanismo que describe la cinética química de las reacciones que se suceden cuando el aire es sometido a altas temperaturas. Este mecanismo, desarrollado por Dunn y Kang¹, permite predecir la rapidez con la que aumentan/disminuyen las masas de las especies activas. Al respecto, interesa estimar la composición del gas de prueba en la cámara de ensayo, ya que esto afecta aspectos tan importantes como la distribución de presiones y el régimen de transferencia de calor hacia el vehículo.

También se asume un tiempo de rotura finito del diafragma que separa el extremo final del tubo de choque con la sección de tobera. El efecto en la calidad del flujo producido por este comportamiento no ideal del diafragma ya ha sido simulado y presentado por los presentes autores en publicaciones anteriores, Tamagno^{2,3}.

La solución del sistema de ecuaciones es encontrada planteando el esquema en volúmenes finitos llamado *point implicit approach*, que trata de forma implícita solamente al vector de términos fuente.

Se aplica la técnica de *aproximación local por características* junto con el esquema *upwind* TVD de Harten Yee⁴, el cual se basa en el esquema del flujo modificado de Harten, a la resolución de los flujos numéricos en las interfases de las celdas, excepto en las discontinuidades de contacto. Esta técnica extiende el método TVD escalar de Harten-Yee a sistemas de ecuaciones, de forma que el esquema resultante es TVD.

El flujo en las discontinuidades de contacto es resuelto con un *solver* de Riemann^{5,6}. Esto permite implementar una grilla móvil que sigue a las interfases, dado que se conocen sus velocidades. Con ello, se pueden agrupar celdas en las proximidades de las discontinuidades, que es donde se las requiere.

Se introducen las ecuaciones que gobiernan el problema del flujo inestacionario, cuasi-unidimensional e invíscido de una mezcla de gases térmicamente perfectos, químicamente

activos y vibracionalmente excitados, fuera de las condiciones de equilibrio químico y vibracional. Luego se describen el esquema numérico para el cálculo de la solución y los métodos para computar los flujos numéricos. Se presentan resultados y conclusiones.

2 ECUACIONES QUE GOBIERNAN EL PROBLEMA

El problema del flujo inestacionario, invíscido y cuasi-unidimensional está gobernado por las ecuaciones de Euler. Si se asume que el fluido de trabajo es una mezcla químicamente activa de gases térmicamente perfectos fuera de la condición de equilibrio químico, entonces es válida la ecuación de estado para una mezcla de gases térmicamente perfectos, a la vez que se debe introducir una ecuación de conservación de la masa para cada especie que interviene en el proceso considerado (por ej, disociación de aire). Si además se asume que el gas se encuentra excitado en sus modos vibracionales de energía y que el tiempo de tránsito es comparable al tiempo de relajación vibracional característico de la mezcla de gases (no-equilibrio vibracional), entonces es necesario introducir una ecuación de conservación para la energía vibracional de la mezcla.

Así, el sistema de ecuaciones en variables conservativas se expresa como

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{1}{S} \frac{\partial(FS)}{\partial x} = Q \quad (2.1)$$

en la que U es el vector de variables conservativas, F el vector de flujos convectivos y Q el vector de los términos fuentes, los que se escriben de la siguiente forma

$$U = \begin{bmatrix} \rho_1 \\ \rho_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \rho_{N_s} \\ \rho u \\ \varepsilon_v \\ \varepsilon \end{bmatrix} \quad F = \begin{bmatrix} \rho_1 u \\ \rho_2 u \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \rho_{N_s} u \\ \rho u^2 + p \\ u \varepsilon_v \\ u(\varepsilon + p) \end{bmatrix} \quad Q = \begin{bmatrix} \dot{w}_1 \\ \dot{w}_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \dot{w}_{N_s} \\ \frac{p}{S} \frac{\partial S}{\partial x} \\ \dot{w}_v \\ 0 \end{bmatrix} \quad (2.2)$$

si se asume que no existe fricción ni transferencia de calor entre el fluido y las paredes del tubo. En Ec.(2.2), N_s indica el número de especies que participan en el mecanismo de reacciones considerado, ρ es la densidad de la mezcla de gases, u es la velocidad del flujo, ε_v es la energía vibracional de la mezcla por unidad de volumen, ε es la energía total por unidad de volumen, S representa a la sección transversal del conducto, \dot{w}_i es el término fuente de la especie i debido a las reacciones químicas (régimen de aumento/disminución de la masa de la

especie i) y \dot{w}_v es aquél correspondiente a la ecuación de energía vibracional, ambos dados por unidad de volumen.

Se satisface que la densidad de la mezcla es igual a la suma de las densidades de las especies

$$\rho = \sum_{i=1}^{N_s} \rho_i \quad (2.3)$$

Si la mezcla químicamente activa está constituida por gases térmicamente perfectos, entonces vale la siguiente ecuación de estado

$$p = \sum_{i=1}^{N_s} \frac{\rho_i}{M_i} \mathcal{R}T \quad (2.4)$$

en la que \mathcal{R} es la constante universal de los gases y M_i es la masa molecular de la especie i .

La energía total por unidad de volumen se expresa como

$$\varepsilon = \sum_{i=1}^{N_s} (\rho_i c_{v_i} T) + \sum_{i=1}^{N_s} \rho_i h_i^0 + \varepsilon_v + \varepsilon_{el} + 0.5 \rho u^2 \quad (2.5)$$

donde los términos del segundo miembro representan las siguientes contribuciones respectivamente: el primero de ellos es la suma de las energías debidas a los *modos traslacional* y *rotacional* de las moléculas, el segundo es la suma de la energía absorbida o liberada por las *reacciones químicas* asociadas a cada especie, el tercero es la suma de las energías vinculadas a los *modos de energía vibracionales excitados* de las moléculas, el cuarto es la suma de las energías asociadas a los *modos electrónicos excitados*, y el último término es la energía *cinética* media de la mezcla de gases, todos ellos dados por unidad de volumen. En la Ec.(2.5), c_{v_i} es el calor específico *traslacional-rotacional* a volumen constante de la especie i , mientras que h_i^0 es la entalpía específica de formación de la misma especie.

Las energías vibracionales son calculadas asumiendo que las moléculas son osciladores armónicos, según lo sugiere⁷. Se introducen correcciones para incluir efectos no armónicos en el caso de especies que se puedan encontrar en grandes fracciones de masa y que posean además términos no armónicos significativos, tales como N_2 y O_2 . Los modos electrónicos de energía interna son incluidos sólo para N, O y O_2 . Todos los datos termodinámicos necesarios para computar las energías asociadas a los distintos modos se obtuvieron de las tablas JANAF⁸.

2.1 Términos fuente de las ecuaciones de conservación de la masa de las especies

Sea N_R el número de reacciones químicas *elementales* necesarias para describir el mecanismo de disociación del aire a altas temperaturas y N_S el número de especies. Combinando las ecuaciones de las reacciones hacia adelante y hacia atrás, se obtiene la siguiente ecuación química general



donde $i=1, \dots, N_R$, v'_{ij}, v''_{ij} son los coeficientes estequiométricos para la especie j , actuando como reactiva en la i -ésima reacción, hacia adelante y hacia atrás respectivamente. Y_j indica al símbolo químico de la especie j , mientras que k_{fi} y k_{bi} son las velocidades de la i -ésima reacción, hacia adelante y hacia atrás respectivamente. Para una especie j dada, cada una de las i -ecuaciones (2.1.1) nos indica la velocidad neta de cambio de los moles de la especie j debida a la reacción- i considerada. Las constantes de velocidad de las reacciones son calculadas en función de la fórmula empírica de Arrhenius, mejorada con un factor pre-exponencial de temperatura⁹

$$k = cT^\alpha e^{-\varepsilon_0/\kappa T} \quad (2.1.2)$$

en la que κ es la constante de Boltzmann y c , α , ε_0 (energía de activación) son constantes experimentales. Las mismas se hallan tabuladas⁹ junto con el mecanismo de reacción considerado, en este caso, disociación del aire de Dunn y Kang¹.

Introduciendo la concentración molar C_j de la especie j y la constante de equilibrio en función de las concentraciones K_{C_i} asociada a la reacción i , la velocidad neta de cambio de la concentración molar de la especie j debida a todas las reacciones en las que ella participa está dada por la siguiente

$$\dot{C}_j = \sum_{i=1}^{N_R} \left(\dot{C}_j \right)_i = \sum_{i=1}^{N_R} (v''_{ij} - v'_{ij}) \cdot R_i \quad (2.1.3)$$

En consecuencia, la velocidad neta de cambio de la masa por unidad de volumen de la especie j es

$$\dot{w}_j = M_j \cdot \sum_{i=1}^{N_R} (v''_{ij} - v'_{ij}) \cdot R_i \quad \text{donde} \quad R_i = k_{fi} \left(\prod_{m=1}^{N_S} C_m^{v'_{im}} - \frac{1}{K_{C_i}} \prod_{m=1}^{N_S} C_m^{v''_{im}} \right) \quad (2.1.4)$$

siendo M_j la masa molecular de la especie j . Se desea enfatizar que las ecuaciones presentadas en esta sección son válidas solamente para reacciones *elementales*, es decir, reacciones que ocurren en un solo paso (*single-step reactions*).

2.2 Término fuente de la ecuación de energía vibracional

Se presenta una ecuación diferencial que permite estimar la velocidad de cambio de la energía vibracional de una mezcla de gases, \dot{w}_v , debido a las colisiones que ocurren entre sus moléculas. Esta ecuación se conoce como *ecuación de régimen vibracional*, y en la derivación de la misma se asumió que las moléculas son diatómicas y que se comportan como osciladores armónicos⁹. La ecuación se puede escribir como

$$\dot{w}_v = \frac{d\varepsilon_v}{dt} = \frac{\varepsilon_v^{eq} - \varepsilon_v}{\tau(T, \rho)} \quad (2.2.1)$$

donde ε_v^{eq} es la energía vibracional por unidad de volumen de la mezcla en la condición de equilibrio termodinámico y ε_v es el valor local instantáneo (no-equilibrio) de dicha energía. Ec.(2.2.1) relaciona la velocidad de cambio de la energía vibracional con la diferencia entre el valor de equilibrio al cual tiende el sistema y el valor local de no-equilibrio. Al derivar esta ecuación, Anderson ⁹, Vincenti y Kruger ¹⁰ no hicieron ninguna hipótesis acerca de la distribución de los osciladores en sus estados de energía cuando no se hallan en equilibrio. Tampoco se ha hecho hipótesis alguna acerca de la magnitud de la diferencia $(\varepsilon_v^{eq} - \varepsilon_v)$. Por lo tanto, Ec.(2.2.1) debería ser válida aún para estados que se encuentren muy alejados de la condición de equilibrio termodinámico. Sin embargo, al considerar que las moléculas se comportan como osciladores armónicos, la Ec.(2.2.1) queda limitada a estados próximos al equilibrio. Si los estados vibracionales de mayor energía se encuentran densamente poblados, se deben tener en cuenta efectos no-armónicos. Estos últimos fueron introducidos tal cual lo sugiere Wilson ⁷.

El parámetro τ tiene unidades de tiempo y se lo conoce como “*tiempo de relajación vibracional*”. El mismo es función de la presión (o densidad) y de la temperatura. Se lo puede estimar con la siguiente ecuación

$$\tau p = C_1 e^{(C_2/T)^{1/3}} \quad (2.2.2)$$

Los valores de las constantes son experimentales, varían de una especie a otra con un rango de temperaturas acotado para el cual son válidos y se encuentran tabulados ^{10,11}. Debido a que el orden de magnitud de τ se encuentra próximo a 10^{-10} , en general el término fuente asociado a la ecuación de la energía vibracional será relativamente grande. Las Ec.(2.2.1) y (2.2.2) constituyen el modelo de Landau y Teller de relajación vibracional.

La energía vibracional por unidad de masa de la especie j , en la condición de equilibrio termodinámico y para especies diatómicas, se expresa como

$$(E_v^{eq})_j = \frac{h\nu_j / \kappa T}{e^{h\nu_j / \kappa T} - 1} \cdot \mathfrak{R}_j T \quad (2.2.3)$$

donde h es la constante de Plank, \mathfrak{R}_j es la constante de los gases para la especie j y ν_j es la *frecuencia vibracional fundamental* de las moléculas de la especie j . Algunos valores de ν_j se encuentran tabulados ¹². Al producto $h\nu_j/\kappa$ se lo conoce como “*temperatura vibracional característica*” y se lo indica con θ_{ν_j} . En consecuencia, para moléculas que poseen un solo modo de vibración (moléculas diatómicas), Ec.(2.2.3) se reduce a

$$(E_v^{eq})_j = \frac{\theta_{v_j}}{e^{\theta_{v_j}/T} - 1} \mathfrak{R}_j \quad (2.2.4)$$

Introduciendo la fracción de masa c_j para la j -ésima especie, $c_j = \rho_j/\rho$, la energía vibracional en la condición de equilibrio termodinámico, por unidad de volumen de la mezcla de gases, se expresa finalmente como

$$\varepsilon_v^{eq} = \sum_{j=1}^{N_s} (\varepsilon_v^{eq})_j = \sum_j \rho_j (E_v^{eq})_j = \rho \sum_j c_j (E_v^{eq})_j \quad (2.2.5)$$

A su vez, conocido ε_v como parte de la solución, se puede calcular en forma iterativa y utilizando las ecuaciones ya presentadas para computar la energía vibracional en la condición de equilibrio termodinámico, una temperatura T_v llamada *temperatura vibracional* de la mezcla de gases. Dicha temperatura caracteriza a la energía vibracional de las moléculas. El conocimiento de los valores locales de T y T_v permite implementar un modelo de 2 temperaturas, imprescindible al momento de tratar flujos que presentan no-equilibrio vibracional. Luego las velocidades de las reacciones serán dependientes de ambas T y T_v . Park^{13,14} propone un modelo en el cual las velocidades de las reacciones son función de una temperatura promedio T_a

$$T_a = T_v^q T^{1-q} \quad (2.2.6)$$

siendo que q varía entre 0.3 y 0.5 para todas aquellas reacciones en las que están involucrados reactantes con estructura interna. Este modelo implica que si $T > T_v$ entonces T_a será menor que T , con lo que las velocidades de las reacciones serán menores que si las mismas hubiesen sido computadas con T . Lo contrario ocurre cuando $T_v > T$, es decir que las reacciones en las cuales participan especies que presentan modos vibracionales son aceleradas. Este modelo permite tener en cuenta los efectos debidos a los intercambios entre los distintos modos de energía (traslacional, rotacional y vibracional) causados por las colisiones entre átomos y moléculas del gas. Obviamente, el equilibrio termodinámico implica que $T_v = T$.

3 ESQUEMA DE SOLUCIÓN Y AVANCE TEMPORAL

El esquema en volúmenes finitos que se utiliza trata únicamente al vector de términos fuente en forma implícita y se lo conoce como *point implicit approach*. Aplicando el esquema al sistema de Ec.(2.1) se tiene

$$\frac{\delta(UV)_j^n}{\Delta t} + \left[F_{j+\frac{1}{2}}^{*n} - F_{j-\frac{1}{2}}^{*n} \right] = (QV)_j^{n+1} \quad (3.1)$$

donde $\delta U_j^n = U_j^{n+1} - U_j^n$ es la incógnita a resolver y V_j es el volumen de la celda j . V_j aparece en Ec.(3.1) como consecuencia de haber planteado el esquema en coordenadas generalizadas (τ, ξ) para poder implementar la grilla móvil. Dicho volumen reemplaza al Jacobiano de la transformación que pasa del plano (t, x) al plano (τ, ξ) .

Luego se procede a la linealización temporal del vector Q

$$Q_j^{n+1} = Q_j^n + \left. \frac{\partial Q}{\partial U} \right|_j^n \delta U_j^n + O(\Delta t^2) \quad (3.2)$$

$$Q_j^{n+1} = Q_j^n + C_j^n \delta U_j^n \quad (3.3)$$

C_j^n denota la matriz Jacobiana del vector de los términos fuente Q respecto del vector de variables conservativas. La dependencia de Q en U se puede expresar, para un modelo de dos temperaturas, mediante la siguiente relación sugerida por Gökçen¹⁵

$$Q(U) = \tilde{Q}[U, T(U), T_v(U)] \quad (3.4)$$

Aplicando la regla de la cadena, la matriz C_j^n viene dada por la expresión

$$C_j^n = \left. \frac{\partial Q}{\partial U} \right|_j^n = \left. \frac{\partial \tilde{Q}}{\partial U} \right|_j^n + \left(\frac{\partial \tilde{Q}}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial U} \right) \Big|_j^n + \left(\frac{\partial \tilde{Q}}{\partial T_v} \frac{\partial T_v}{\partial U} \right) \Big|_j^n \quad (3.5)$$

Separando U y V en la Ec.(3.1) de forma tal de explicitar a δU_j^n , reemplazando Ec.(3.3) y (3.5) en Ec.(3.1), se llega a expresar el esquema de la siguiente manera

$$(I - \Delta t C_j^n) \delta U_j^n = -\frac{\Delta t}{V_j^{n+1}} (F_{j+1/2}^{*n} - F_{j-1/2}^{*n}) - U_j^n \frac{\delta V_j^n}{V_j^{n+1}} + \Delta t Q_j^n \quad (3.6)$$

La resolución del sistema de Ec.(3.6) permite conocer δU_j^n . Luego, la solución en el paso de tiempo $n+1$ se computa utilizando un método *predictor-corrector*. Leveque y Yee¹⁶ proponen modificar el método predictor-corrector, lo que permite obtener segundo orden de precisión en el tiempo cuando se hallan presentes términos fuente muy grandes. El paso *predictor* del esquema de Leveque y Yee se escribe como

$$\left(I - \frac{1}{2} \Delta t C_j^n \right) \delta \bar{U}_j^n = -\frac{\Delta t}{V_j^{n+1}} \delta F_j^{*n} - U_j^n \frac{\delta V_j^n}{V_j^{n+1}} + \Delta t Q_j^n \quad (3.7)$$

$$\bar{U}_j^n = U_j^n + \delta \bar{U}_j^n \quad (3.8)$$

mientras que el paso *corrector* viene dado por

$$\left(I - \frac{1}{2} \Delta t C_j^n \right) \delta \tilde{U}_j^n = -\frac{\Delta t}{V_j^{n+1}} \delta \bar{F}_j^{*n} - \bar{U}_j^n \frac{\delta V_j^n}{V_j^{n+1}} + \Delta t Q_j^n \quad (3.9)$$

de la que se obtiene $\delta \tilde{U}_j^n$. Finalmente, la solución en el paso de tiempo $n+1$ se calcula como

$$U_j^{n+1} = U_j^n + \frac{1}{2}(\delta\tilde{U}_j^n + \delta\bar{U}_j^n) \quad (3.10)$$

Se observa en este esquema que tanto el vector de los términos fuente Q como la matriz C son computados utilizando U_j^n , tanto en el paso *predictor* como en el *corrector*, y se introduce el factor 1/2 afectando a la matriz C .

4 CÁLCULO DE LOS FLUJOS NUMÉRICOS

Se aplican dos métodos para resolver los flujos numéricos en las interfases de las celdas. El primero de ellos resuelve los flujos numéricos en todo el dominio, excepto sobre las discontinuidades de contacto. Consiste en la extensión efectuada por Yee⁴, a través de la técnica llamada “aproximación local por características”, del esquema escalar *upwind* TVD, de segundo orden en el espacio y en el tiempo, desarrollado originalmente por Harten¹⁷ y generalizado luego por Yee⁴. Esta técnica extiende el esquema escalar de Harten-Yee a sistemas de ecuaciones, conservando la propiedad TVD del esquema original.

El segundo método consiste en aplicar un *solver* aproximado de Riemann^{5,6} para computar el flujo numérico en las discontinuidades de contacto. Dicho *solver* se aplica, realizando primero una interpolación *MUSCL* de las variables conservativas y transformando luego a variables características, a los valores obtenidos en las interfases de las celdas vinculadas con las discontinuidades.

4.1 Aproximación local por características y esquema TVD de Harten-Yee

La técnica de aproximación local por características (*Local Characteristic Approach*) permite extender el método TVD escalar de Harten¹⁷ a sistemas, de forma que la propiedad TVD del esquema sea conservada.

Sea un sistemas de ecuaciones diferenciales parciales hiperbólicas expresado en forma conservativa. El procedimiento consiste en definir en las interfases de las celdas un sistema local de variables características W y obtener un sistema de ecuaciones desacopladas. Sea R la matriz de pasaje de variables características a variables conservativas. Luego el sistema en características se expresa como

$$\frac{\partial W}{\partial t} + \Lambda \frac{\partial W}{\partial x} = 0 \quad \text{con} \quad W = R^{-1}U \quad (4.1)$$

de forma que Λ sea una matriz diagonal. Luego R debe ser la matriz de vectores propios a la derecha $r^{(l)}$, con $l=1, \dots, N^{\circ}$ ecuaciones, de la matriz Jacobiana $A = \frac{\partial F}{\partial U}$ del sistema de Ec. (2.1). Entonces Λ tiene $a^{(l)}$ elementos y posee, para el sistema de ecuaciones que aquí se trata, la siguiente forma¹⁸

$$\Lambda = \text{diag}(a^{(l)}) = \text{diag}(u, \dots, u, u + c, u, u - c) \quad (4.2)$$

siendo u la velocidad del flujo y c la velocidad del sonido para la condición de flujo *vibracionalmente congelado*⁹.

Se aplica entonces el esquema escalar TVD de Harten-Yee a cada una de las ecuaciones escalares en variables características para luego volver a variables conservativas. El esquema final se ve similar al esquema escalar en variables conservativas, pero ahora existe un acoplamiento de las variables características a través de la matriz R . De esta manera, el vector flujo numérico se define como

$$\tilde{F}_{j+1/2} = \frac{1}{2} \left[F_j + F_{j+1} + R_{j+1/2} \Phi_{j+1/2} \right] \quad (4.3)$$

$R_{j+1/2}$ es la matriz de los vectores propios a la derecha evaluada en un “estado intermedio”, que puede ser

$$R_{j+1/2} = R \left(\frac{U_{j+1} + U_j}{2} \right) \quad (4.4)$$

o el “estado promedio de Roe”, denotado como \bar{U} , cuya expresión se encuentra en Yee⁴ y Hirsch¹⁹, en cuyo caso $R_{j+1/2} = R(\bar{U})$.

Se verá ahora la forma que toman las componentes del vector $\Phi_{j+1/2}$ para el esquema TVD *upwind* explícito de segundo orden en el espacio y en el tiempo desarrollado por Harten y generalizado luego por Yee⁴. El vector será denotado como $\Phi_{j+1/2}^U$, con elementos $(\phi_{j+1/2}^{(l)})^U$ que poseen la siguiente forma

$$(\phi_{j+1/2}^{(l)})^U = \sigma(a_{j+1/2}^{(l)}) \cdot (g_{j+1}^{(l)} - g_j^{(l)}) - \psi(a_{j+1/2}^{(l)} + \gamma_{j+1/2}^{(l)}) \cdot \alpha_{j+1/2}^{(l)} \quad (4.5)$$

donde $\psi(z)$ es una función que introduce una corrección por entropía que reemplaza al término $|z| = |a_{j+1/2}^{(l)} + \gamma_{j+1/2}^{(l)}|$ del esquema original, y está dada por

$$\psi(z) = |z| \quad \text{si} \quad |z| > \delta_1 \quad (4.6)$$

$$\psi(z) = \frac{z^2 + \delta_1^2}{2\delta_1} \quad \text{si} \quad |z| < \delta_1 \quad (4.7)$$

siendo δ_1 un parámetro positivo muy pequeño, o una función de z . Se puede visualizar a δ_1 como una medida de la disipación numérica para el flujo numérico *upwind* de Harten-Yee. La función $\psi(z)$ es conocida como el coeficiente del término de viscosidad numérica. $\alpha_{j+1/2}^{(l)}$ son elementos del vector en variables características obtenido de hacer

$$\bar{\alpha}_{j+1/2} = R_{j+1/2}^{-1} \cdot \Delta_{j+1/2} = R_{j+1/2}^{-1} \cdot (U_{j+1} - U_j) \quad (4.8)$$

A su vez, se define

$$\sigma(z) = \frac{1}{2} [\psi(z) - \tau z^2] \quad (4.9)$$

con $\tau = \frac{\Delta t}{\Delta x}$. Además se tiene

$$\gamma_{j+\frac{1}{2}}^{(l)} = \sigma\left(\alpha_{j+\frac{1}{2}}^{(l)}\right) \cdot \frac{g_{j+1}^{(l)} - g_j^{(l)}}{\alpha_{j+\frac{1}{2}}^{(l)}} \quad \text{si } \alpha_{j+\frac{1}{2}}^{(l)} \neq 0 \quad (4.10)$$

$$\gamma_{j+\frac{1}{2}}^{(l)} = 0 \quad \text{si } \alpha_{j+\frac{1}{2}}^{(l)} = 0 \quad (4.11)$$

$g_j^{(l)}$ es la función que actúa como *limitador* y está definida de la siguiente manera

$$g_j^{(l)} = \min \text{mod} \left(\alpha_{j-\frac{1}{2}}^{(l)}, \alpha_{j+\frac{1}{2}}^{(l)} \right) = \text{sgn} \left(\alpha_{j-\frac{1}{2}}^{(l)} \right) \cdot \max \left\{ 0, \min \left[\left| \alpha_{j-\frac{1}{2}}^{(l)} \right|, \alpha_{j+\frac{1}{2}}^{(l)} \cdot \text{sgn} \left(\alpha_{j-\frac{1}{2}}^{(l)} \right) \right] \right\} \quad (4.12)$$

También se podría haber utilizado alguna de las otras expresiones propuestas por Yee ⁴ para la función $g_j^{(l)}$.

El esquema escalar original de Harten, conocido como *aproximación de flujo modificado* puede encontrarse en Hirsch ¹⁹ ó Yee ⁴.

4.2 Discontinuidades de contacto: solver de Riemann y grilla móvil

Un *solver* aproximado de Riemann propuesto por Jacobs ⁶ es utilizado para calcular la velocidad y la presión en las discontinuidades de contacto. Con ello se pueden computar los flujos numéricos en las interfases de las celdas adyacentes a las mismas como

$$F = (0, \dots, 0, p^c, 0, u^c p^c) \quad (4.13)$$

El seguimiento de las discontinuidades de contacto permite evitar los problemas producidos por la difusión numérica así como también implementar una grilla móvil con un cluster de celdas alrededor de las mismas. El uso de una grilla móvil obliga a modificar las ecuaciones para introducir la contribución del desplazamiento de las celdas en el cálculo de los flujos. Si $\frac{dx}{dt}$ es la velocidad de desplazamiento de la celda y tomamos por ej., la primera componente del vector flujo F dado en Ec.(2.2), dicha componente debe calcularse ahora como $\rho_1 \left(u - \frac{dx}{dt} \right)$. Esto mismo debe extenderse a todas las componentes del vector F . Obviamente, deben computarse las velocidades de desplazamiento y las nuevas posiciones de las interfases de las celdas en cada paso de tiempo. Sin embargo, se logra un ahorro notable en el número de celdas necesarias para definir correctamente a las interfases así como también un incremento en el paso de tiempo.

5 RESULTADOS

Se presentan resultados para un túnel de choque reflejado. Estos son dispositivos en los que, las condiciones para la expansión en la tobera son proporcionadas por el gas a alta

temperatura y presión que se aloja en el extremo final del tubo de choque. El gas que ha sido procesado por el choque reflejado en el extremo del tubo, se expande a través de la tobera, pasa por la sección de ensayo y se descarga finalmente en un tanque. Se asume que la sección de ensayo del túnel se encuentra 30cm corriente debajo de la sección de salida de la tobera, en la coordenada $x=7\text{m}$.

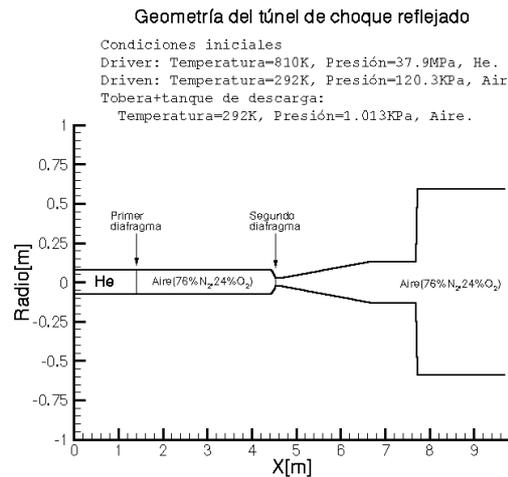


Figura 1. Geometría del túnel de choque.

Los *driver* y *driven* del tubo de choque poseen 1.44m y 3.00m de longitud respectivamente. El área de la sección transversal es 0.01824m^2 , constante a lo largo de todo el tubo. La sección de tobera se encuentra vinculada al extremo del tubo y un diafragma se encuentra en la posición correspondiente al área de pasaje mínima. El tramo divergente es cónico, con un ángulo de divergencia de 3° . El área de pasaje mínima es 0.001824m^2 y la relación área de salida/área mínima es 30. La cámara de ensayo es un conducto cilíndrico de 1m de longitud, cuya sección transversal posee la misma área que la correspondiente a la sección de descarga de la tobera. La relación área tanque de descarga/área cámara de ensayo es 20.

El gas en el *driver* es He, se halla a la presión de 37.9Mpa y 810K de temperatura. En el *driven* se encuentra alojado el gas de ensayo, en este caso aire. Se encuentra a 120Kpa de presión y 292K de temperatura. Finalmente, en la sección de tobera y tanque de descarga se encuentra aire a 1Kpa de presión y 292K de temperatura.

En los túneles de choque reflejado, la finalización del tiempo de ensayo está marcada por la llegada del gas del *driver* a la sección de tobera. El nivel de entalpía total es controlado por la velocidad del choque en el gas de ensayo. Se verifica experimentalmente que las condiciones de estancamiento deseadas se mantienen el mayor tiempo posible cuando el tubo de choque es operado en la condición *tailored interface*, es decir, cuando la discontinuidad de contacto He/aire es llevada al reposo al ser procesada por el choque reflejado en el extremo del tubo, sin que se produzcan reflexiones posteriores entre el choque y la discontinuidad. El diagrama x-t de líneas de igual temperatura confirma esta condición de funcionamiento.

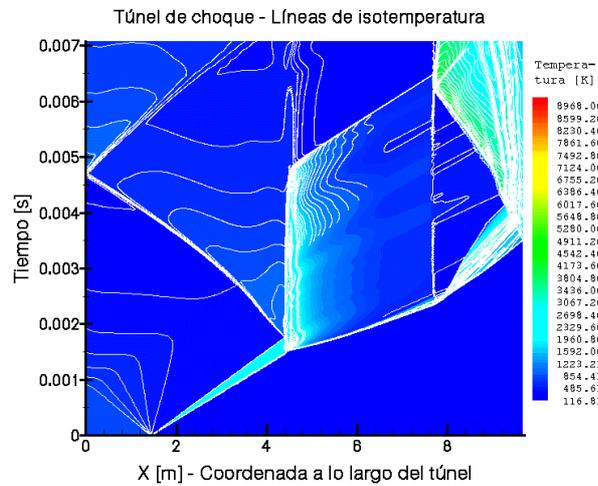


Figura 2. Diagrama x-t de líneas de igual temperatura.

También se observa el instante en el cual el He ingresa a la sección de tobera, marcando el final del tiempo de ensayo. Para las condiciones iniciales dadas, el flujo en la tobera se establece en 1.5ms y el tiempo de ensayo es 1.8ms aproximadamente. La comparación de las distribuciones computadas y teórica del Mach en la sección de tobera permite afirmar que la solución es prácticamente estacionaria entre los 3ms y 4.8ms contados a partir de la rotura del primer diafragma, instante a partir del cual se estima que el He comienza a ingresar a la sección de tobera.

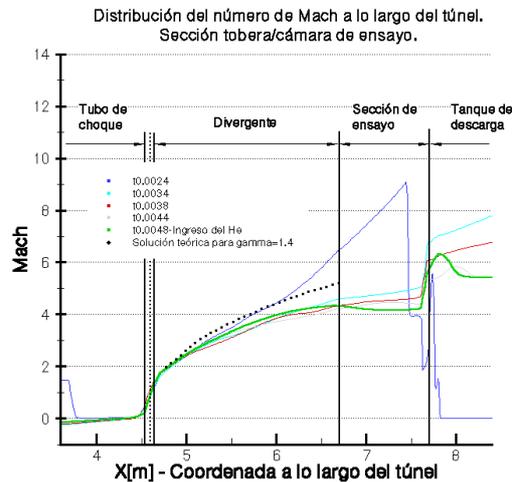


Figura 3. Comparación del Mach computado y teórico en la sección de tobera del túnel.

La solución computada corresponde a la mezcla químicamente activa y vibracionalmente excitada, mientras que la solución teórica es para un flujo química y vibracionalmente congelado. Este es el motivo principal de la discrepancia que se observa entre la solución

7 REFERENCIAS

- [1] Dunn, M.G., and S.W. Kang: “*Theoretical and Experimental Studies of Reentry Plasmas*,” NASA CR-2232, April, 1973.
- [2] Tamagno, J., Elaskar, S., Ríos Rodríguez, G., “*Numerical Simulation of time-dependent Reacting Flows*,” 1er. Congreso Sudamericano de Mecánica Computacional MECOM 2002, 28-31 Octubre, 2002.
- [3] Ríos Rodríguez, G., Tamagno, J., Elaskar, S., “*Simulación numérica de flujos supersónicos químicamente activos*”, Congreso Argentino de Tecnología Espacial CATE 2003, 14-16 Mayo, 2003.
- [4] Yee, H.C., “*A class of high-resolution explicit and implicit shock capturing methods*,” NASA TM 101088, 1989.
- [5] JACOBS, P., *Single-block Navier-Stokes integrator*, NASA Contract Not. NAS1-18605, 1991.
- [6] JACOBS, P.A., *Approximate Riemann Solver for hypervelocity flows*, AIAA Journal, Vol.30, N°10, 1992.
- [7] WILSON, G., *Time-dependent quasi-one-dimensional simulations of high enthalpy pulse facilities*, AIAA Paper-92-5096, 1992.
- [8] JANAF Thermochemical Tables, *Journal of Chemistry Reference Dates*, Vol 14, Supl. 1, 1985.
- [9] Anderson, Jr., John D., *Hypersonic and High Temperature Gas Dynamics*, McGraw Hill, 1994.
- [10] Vincenti, W.G., and Kruger, C.H., *Introduction to Physical Gas Dynamics*, John Wiley and Sons, Inc., New York, 1965.
- [11] Bussing, T., Scott E., “*Chemistry Associated with Hypersonic Vehicles*,” AIAA Paper no. 87-1292.
- [12] D. Van Nostrand, *Molecular spectra and molecular structure*, New York, 1963.
- [13] Park, C., *Assessment of Two-Temperature Kinetic Model for Ionizing Air*, AIAA Paper 87-1574, Honolulu, HI, June 1987.
- [14] Park, C., *Nonequilibrium Hypersonic Aerothermodynamics*, John Wiley & Sons, New York, 1990.
- [15] Gökçen, T., *Computation of hypersonic low density flows with thermochemical nonequilibrium*, Ph.D. Thesis, Stanford University, 1989.
- [16] Leveque, R.J., and Yee, H.C., *A study of numerical methods for hyperbolic conservation laws with stiff source terms*, Journal of computational physics, 86, pp. 187-210.
- [17] Harten, A., “*On a Class of High Resolution Total-Variation-Stable Finite-Difference Schemes*,” SIAM J. Num. Anal., Vol. 21, pp. 1-23, 1984.
- [18] Wilson, G.J., *Computation of steady and unsteady shock-induced combustion over hypervelocity blunt bodies*, Ph.D. Tesis, Stanford University, 1992.
- [19] Hirsch, C., *Numerical computation of internal and external flows*, Vol.2: Computational methods for inviscid and viscous flows, John Wiley & Sons Ltd., 1992.