

UNIVERSIDAD NACIONAL DEL LITORAL



DOCTORADO EN INGENIERÍA

Simulación de la inyección directa de combustible en motores de combustión interna

Horacio Javier Aguerre

FICH

FACULTAD DE INGENIERÍA Y CIENCIAS HÍDRICAS

INTEC

INSTITUTO DE DESARROLLO TECNOLÓGICO PARA LA INDUSTRIA QUÍMICA

CIMEC

CENTRO DE INVESTIGACIÓN DE MÉTODOS COMPUTACIONALES

sinc(*i*)

INSTITUTO DE INVESTIGACIÓN EN SEÑALES, SISTEMAS E INTELIGENCIA
COMPUTACIONAL



UNIVERSIDAD NACIONAL DEL LITORAL
Facultad de Ingeniería y Ciencias Hídricas
Instituto de Desarrollo Tecnológico para la Industria Química
Centro de Investigación de Métodos Computacionales
Instituto de Investigación en Señales, Sistemas e Inteligencia Computacional

**SIMULACIÓN DE LA INYECCIÓN DIRECTA
DE COMBUSTIBLE EN MOTORES
DE COMBUSTIÓN INTERNA**

Horacio Javier Aguerre

Tesis remitida al Comité Académico del Doctorado
como parte de los requisitos para la obtención
del grado de
DOCTOR EN INGENIERÍA
Mención Mecánica Computacional
de la
UNIVERSIDAD NACIONAL DEL LITORAL

2018



UNIVERSIDAD NACIONAL DEL LITORAL
Facultad de Ingeniería y Ciencias Hídricas
Instituto de Desarrollo Tecnológico para la Industria Química
Centro de Investigación de Métodos Computacionales
Instituto de Investigación en Señales, Sistemas e Inteligencia Computacional

**SIMULACIÓN DE LA INYECCIÓN DIRECTA
DE COMBUSTIBLE EN MOTORES
DE COMBUSTIÓN INTERNA**

Horacio Javier Aguerre

Lugar de trabajo:

Centro de Investigación de Métodos Computacionales
Facultad de Ingeniería y Ciencias Hídricas
Universidad Nacional del Litoral

Director:

Dr. Norberto M. Nigro

CIMEC (CONICET-UNL), FICH-UNL

Codirector:

Dr. Santiago Márquez Damián

CIMEC (CONICET-UNL), FRFSF-UTN

Jurado Evaluador:

Dr. José Manuel Pastor Enguídanos
Dr. Axel Eduardo Larretguy
Dr. Enzo Alberto Dari
Dr. Nestor Calvo

Universitat Politècnica de València
Facultad de Ingeniería y Ciencias Exactas, UADE
Comisión Nacional de Energía Atómica, CONICET
FICH-UNL




ACTA DE EVALUACIÓN DE TESIS DE DOCTORADO

En la sede de la Facultad de Ingeniería y Ciencias Hídricas de la Universidad Nacional del Litoral, a los veintidós días del mes de marzo del año dos mil dieciocho, se reúnen los miembros del Jurado designado para la evaluación de la Tesis de Doctorado en Ingeniería titulada *“Simulación de la inyección directa de combustible en motores de combustión interna”*, desarrollada por el Ing. Horacio Javier AGUERRE, DNI N° 31.788.347. Ellos son: el Dr. Enzo Dari, el Dr. Axel Larreteguy, el Dr. Néstor Calvo y el Dr. José Manuel Pastor Enguíanos.

Luego de escuchar la Defensa Pública y de evaluar la Tesis, el Jurado resuelve:

otorgar la máxima calificación de 10 (sobresaliente) a esta tesis, debido a su carácter interdisciplinario, los múltiples aportes realizados, y la solidez de los respuestas del tesis en la defensa oral.


Sin más, se da por finalizado el Acto Académico con la firma de los miembros del Jurado al pie de la presente. -----



Dr. Enzo Dari



Dr. Axel Larreteguy



Dr. Néstor Calvo

Dr. José Manuel Pastor Enguíanos (u)

(u) El Dr. José Manuel Pastor Enguíanos participó por video conferencia


Dr. JOSÉ LUIS MACOR
SECRETARIO DE POSGRADO
Facultad de Ingeniería y Cs. Hídricas

Universidad Nacional del Litoral
Facultad de Ingeniería y Ciencias Hídricas

Secretaría de Posgrado

Ciudad Universitaria
C.C. 217
Ruta Nacional N° 168 - Km. 472.4
(3000) Santa Fe
Tel: (54) (0342) 4575 229
Fax: (54) (0342) 4575 224
E-mail: posgrado@fich.unl.edu.ar

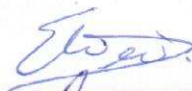


UNIVERSIDAD NACIONAL DEL LITORAL
Facultad de Ingeniería y Ciencias Hídricas

Santa Fe, 22 de marzo de 2018.

Como miembros del Jurado Evaluador de la Tesis de Doctorado en Ingeniería titulada *“Simulación de la inyección directa de combustible en motores de combustión interna”*, desarrollada por el Ing. Horacio Javier AGUERRE en el marco de la Mención “Mecánica Computacional”, certificamos que hemos evaluado la Tesis y recomendamos que sea aceptada como parte de los requisitos para la obtención del título de Doctor en Ingeniería.

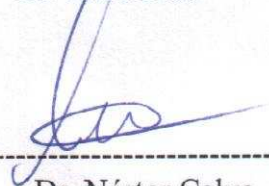
La aprobación final de esta disertación estará condicionada a la presentación de dos copias encuadernadas de la versión final de la Tesis ante el Comité Académico del Doctorado en Ingeniería.



Dr. Enzo Dari



Dr. Axel Larreteguy



Dr. Néstor Calvo


Dr. José Manuel Pastor Enguídanos (v)

(v) El Dr. José Manuel Pastor Enguídanos participó por video conferencia


Dr. JOSÉ LUIS MACOR
SECRETARIO DE POSGRADO
Facultad de Ingeniería y Cs. Hídricas

Santa Fe, 22 de marzo de 2018.

Certifico haber leído la Tesis, preparada bajo mi dirección en el marco de la Mención “Mecánica Computacional” y recomiendo que sea aceptada como parte de los requisitos para la obtención del título de Doctor en Ingeniería.



Dr. Santiago Marquez Damián
Codirector de Tesis



Dr. Norberto Nigro
Director de Tesis

Universidad Nacional del Litoral
Facultad de Ingeniería y Ciencias Hídricas
Secretaría de Posgrado

Ciudad Universitaria
C.C. 217
Ruta Nacional Nº 168 - Km. 472,4
(3000) Santa Fe
Tel: (54) (0342) 4575 229
Fax: (54) (0342) 4575 224
E-mail: posgrado@fich.unl.edu.ar

Declaración legal del autor

Esta Tesis ha sido remitida al Departamento de Posgrado de la Facultad de Ingeniería y Ciencias Hídricas como parte de los requisitos para la obtención del grado de Doctor en Ingeniería - Mención Mecánica Computacional de la Universidad Nacional del Litoral y estará disponible en la Biblioteca de la Facultad de Ingeniería y Ciencias Hídricas bajo las condiciones estipuladas en su Reglamento.

Horacio Javier Aguerre

Agradecimientos

Esta tesis ha recibido apoyo económico del Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), Universidad Nacional del Litoral (UNL), Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica (ANPCyT) y de la Universidad Tecnológica Nacional (UTN). Las investigaciones han sido realizadas en el Centro de Investigación de Métodos Computacionales dependiente de la UNL y CONICET.

En este párrafo quiero agradecer especialmente a mi Director, el Dr. Norberto Nigro, por su constante guía, apoyo y recomendaciones en el ideado, desarrollo y escritura de esta tesis. También quiero agradecer a mi codirector, el Dr. Santiago Márquez Damián, por sus valiosas enseñanzas y consejos que fui recibiendo durante estos años. Finalmente agradezco a todos mis compañeros del CIMEC con los cuales fue muy grato trabajar y compartir experiencias.

También agradezco a la comunidad de Software Libre y particularmente a OpenFOAM(R), Ubuntu, Octave, Gnuplot y LaTeX los cuales han sido herramientas fundamentales para realizar este trabajo.

Índice general

1. Introducción	1
1.1. Motivación	1
1.2. Mecánica de fluidos computacional en motores de combustión interna	3
1.3. Motores de pistones opuestos	3
1.3.1. Motor de pistones opuestos de desarrollo regional	4
1.4. Problemática	6
1.5. Objetivo de la tesis	8
1.6. Metodología	8
1.7. Organización de la tesis	9
1.8. Contribuciones realizadas	11
2. Método de los volúmenes finitos	13
2.1. Fundamentos	13
2.1.1. Volúmenes finitos con variables colocadas en centro de celdas	14
2.1.2. Discretización de las integrales de volumen	14
2.1.3. Discretización de las integrales de superficie	15
2.1.4. Sistema de ecuaciones lineales	17
2.2. Conservación global del método de los volúmenes finitos	17
2.2.1. Flujo en una cara y flujos parciales	19
2.2.2. Propiedad telescópica	20
2.3. Formulación Euleriana-Lagrangiana Arbitraria	22
2.3.1. Integración temporal Euler de segundo orden	22
2.3.2. Método de discretización temporal de Crank Nicolson	23
2.4. <i>Solver</i> de flujo compresible	25
2.4.1. Ecuaciones de gobierno	25

2.4.2.	Resolución numérica de las ecuaciones de gobierno	26
3.	Acople numérico por medio de interfaces no conformes	31
3.1.	Conceptos preliminares	31
3.1.1.	Interfaces parcialmente y totalmente acopladas	33
3.1.2.	Interfaces conformes o no conformes	34
3.2.	Acople numérico de interfaces con el método de los volúmenes finitos	35
3.3.	Conservación local y global e interpolaciones acotadas en interfaces no conformes . . .	37
3.3.1.	Interpolación de flujos en la interfaz	38
3.3.2.	Interpolación acotada	43
3.3.3.	Expresiones generales para el acople numérico en interfaces	44
3.4.	Interfaz conservativa basada en proyección de coeficientes	45
3.4.1.	Propiedades del método de proyección de coeficientes	47
3.4.2.	Determinación de las cantidades independientes sobre una de las interfaces	49
3.4.3.	Comentarios sobre la implementación computacional	51
3.5.	Ejemplos de aplicación	52
3.5.1.	Problema difusivo puro	52
3.5.2.	Problema de flujo con transporte escalar	54
3.6.	Notas finales	55
4.	Acople conservativo entre interfaces no conformes basado en intersección de mallas	57
4.1.	Introducción	57
4.1.1.	Definición de supermalla	58
4.1.2.	Ventajas y desventajas de la supermalla	58
4.2.	Una estrategia simplificada: la pseudo-supermalla	59
4.2.1.	Definición de pseudo-supermallas	59
4.2.2.	Conectividad de las pseudo-supermallas	60
4.2.3.	Supermalla local	62
4.2.4.	Ejemplos de aplicación	63
4.3.	Pseudo-supermallas con solapamiento parcial	72
4.3.1.	Caso de prueba con flujo laminar	76
4.4.	Implementación	78
4.4.1.	Construcción y remoción de las pseudo-supermallas	78
4.4.2.	Interfaces de pseudo-supermalla en mallas dinámicas	79
4.4.3.	La técnica de pseudo-supermalla en paralelo	80

4.4.4.	Eficiencia computacional	83
4.4.5.	Ventajas del método de pseudo-supermalla	83
5.	Estrategia de remallado utilizando adición y remoción de capas	87
5.1.	Introducción	87
5.2.	Formulación ALE en dominios con cambios topológicos	88
5.2.1.	Remoción de capas	89
5.2.2.	Adición de capas	91
5.3.	Discretización temporal de alto orden en dominios con cambios topológicos	95
5.3.1.	Diferencias descentradas hacia atrás y Crank-Nicolson	96
5.3.2.	Ejemplos de validación	96
5.4.	Gestión de la resolución de malla	101
5.4.1.	Deformación de malla y <i>layering</i>	102
5.4.2.	Caso particular con dos zonas de deformación	104
5.5.	Paralelismo	107
6.	Eliminación de oscilaciones en la velocidad	109
6.1.	Introducción	109
6.1.1.	Problema ejemplo	109
6.2.	<i>Solver</i> basado en reconstrucción de flujos	111
6.2.1.	Precisión del operador de reconstrucción	112
6.3.	Operadores de reconstrucción	114
6.3.1.	Una nueva fórmula de reconstrucción	115
6.3.2.	Precisión espacial de los operadores de reconstrucción	116
6.4.	Ejemplos de aplicación	119
6.4.1.	Resolución de un problema de flujo con solución analítica	119
6.4.2.	Compresión de una celda en un caso unidimensional	120
6.4.3.	Viaje de una onda de presión en una cavidad cúbica	120
6.5.	Notas finales	122
7.	Modelado de la inyección de combustible	125
7.1.	Introducción	125
7.2.	Formulación Lagrangiana en mallas dinámicas	127
7.2.1.	Seguimiento de partículas en mallas poliédricas arbitrarias	127
7.2.2.	Partículas e interfaces de pseudo-supermalla	133

7.2.3.	Partículas y <i>layering</i>	133
7.2.4.	Paralelización	134
7.2.5.	Eficiencia computacional y escalabilidad	135
7.3.	Interacción entre las partículas y la fase gaseosa	138
7.3.1.	Concepto de parcela y partícula	139
7.3.2.	Algoritmo de acople entre las fases	140
7.3.3.	Cinemática de las parcelas e intercambio de cantidad de movimiento	141
7.3.4.	Intercambio de masa	143
7.3.5.	Intercambio de energía	144
7.4.	Atomización del combustible	145
7.4.1.	Introducción	145
7.4.2.	Modelo de atomización de Huh-Gosman	146
7.4.3.	Modelo de atomización de Kelvin-Helmholtz	149
7.4.4.	Modelo de atomización de Rayleigh-Taylor	150
7.4.5.	Modelo de atomización híbrido HG-KH-RT	151
7.5.	Ajuste del modelo híbrido de inyección: <i>spray G</i>	153
7.5.1.	Estudio paramétrico	154
7.5.2.	Influencia de la turbulencia inicial del <i>spray</i>	156
7.5.3.	Influencia del parámetro B_1 en el modelo de KH	157
7.5.4.	Influencia del parámetro C_{bu} en el modelo de RT	160
7.5.5.	Conclusiones	162
8.	Simulación computacional de un motor de pistones opuestos	169
8.1.	Introducción	169
8.2.	Modelado computacional del motor JLA	170
8.2.1.	Cinemática del motor	171
8.2.2.	Interfaces de pseudo-supermalla en el motor de pistones opuestos	172
8.2.3.	Deformación de malla y <i>layering</i> en el motor de pistones opuestos	174
8.3.	Eficiencia en la paralelización de las herramientas de malla dinámica	174
8.3.1.	Descomposición de dominios	174
8.3.2.	Escalabilidad computacional	177
8.4.	Convergencia en malla y estabilidad numérica	177
8.4.1.	Configuración	177
8.4.2.	Resultados	178

8.4.3. Comentarios sobre la estabilidad numérica y convergencia	179
8.5. Inyección directa de combustible en el motor de pistones opuestos	180
8.5.1. Parámetros de estudio	181
8.5.2. Punto de comienzo de la inyección	181
8.5.3. Cavidades de pistón	182
8.5.4. Metodología	183
8.5.5. Comentarios generales sobre las simulaciones	185
8.5.6. Sensibilidad a la geometría de la cabeza del pistón	186
8.5.7. Sensibilidad al punto de comienzo de la inyección	188
8.5.8. Evolución temporal del vapor de combustible	189
8.5.9. Comentarios finales	191
9. Conclusiones	195
9.1. Resumen de la tesis	195
9.2. Contribuciones realizadas	197
9.2.1. Objetivo general	197
9.2.2. Contribuciones en el área de interfaces no conformes	197
9.2.3. Contribuciones en el área de mallas dinámicas	198
9.2.4. Contribuciones relacionadas al modelado computacional de la inyección de combustible	198
9.2.5. Contribuciones relacionadas a la estabilidad numérica	199
9.2.6. Contribuciones relacionadas al cómputo en paralelo	199
9.2.7. Contribuciones relacionadas al motor de pistones opuestos JLA	200

Índice de figuras

1.1. En la parte superior se muestran dos perfiles del motor de pistones opuestos JLA. En la parte inferior se muestra un corte lateral sobre uno de los cilindros (extraído de la memoria de patente de invención)	5
1.2. Principales etapas del ciclo de funcionamiento del motor de pistones opuestos JLA: (a) ignición; (b) escape de gases; (c) admisión y (d) compresión.	6
1.3. Estados de máxima y mínima separación entre pistones en el motor JLA.	7
1.4. Apertura de una lumbrera por medio de la interacción entre el pistón y los puertos.	7
2.1. Coeficientes en la matriz del sistema de ecuaciones lineales del problema de volúmenes finitos resultantes de la contribución al sistema de una cara arbitraria K	19
2.2. Diferentes subdominios compuestos como combinaciones arbitrarias de celdas que pertenecen al dominio Ω	21
3.1. Dos ejemplos de máquinas industriales con componentes móviles. Izquierda: motor de combustión interna de dos tiempos; derecha: ventilador centrífugo	31
3.2. Tres tipos de acople entre subdominios: (a) sin intersección; (b) intersección superficial e (c) intersección volumétrica.	32
3.3. Problema del tipo rotor-estator en donde se muestra que las interfaces son completamente acopladas para cualquier posición del rotor.	33
3.4. Interfaces variables en el tiempo en un motor de dos tiempos.	34
3.5. Subdominios elegidos de forma arbitraria dentro de un dominio con interfaces no conforme. El subdominio Ω_2 esta conformado por caras pertenecientes a ambos lados de la interfaz.	38
3.6. Explicación de las subdivisiones del flujo saliente en una cara de interfaz.	39
3.7. Esquema gráfico presentando el concepto de conservación global en interfaces no conformes.	41

3.8. Esquema gráfico presentando el concepto de conservación de flujos elementales en interfaces no conformes.	43
3.9. Definición del segmento que une los centroides de celdas separadas por la cara K . Las distancias parciales entre el centroide y el plano que contiene a la cara K se denominan d_A y d_B	51
3.10. Cavidad cúbica con una interfaz localizada sobre el plano $z = 0,5$. Se define una difusividad no uniforme la cual tiene un valor mínimo y máximo sobre los puntos $\mathbf{x} = (0, 0, 0)$ y $\mathbf{x} = (1, 1, 1)$	53
3.11. Promedio sobre todo el dominio de la cantidad ψ según el método de interpolación utilizado.	53
3.12. Un perfil Gaussiano se transporta a lo largo de un conducto de sección cuadrada el cual contiene una interfaz no conforme en la mitad del trayecto.	54
3.13. Balance total de la función trazadora en el tubo rectangular a lo largo del tiempo de simulación para el método de proyección de coeficientes y un método basado en pesos de áreas de solapamiento.	55
4.1. Ejemplo de pseudo-supermallas.	61
4.2. Triangulación del sector intersección mediante sucesivos recortes entre pares de triángulos.	62
4.3. Convergencia del error en el problema de convección pura.	64
4.4. Convergencia del error en un problema manufacturado puramente difusivo.	65
4.5. Descripción del problema de convección de un trazador de un flujo en una cavidad cuadrada. El dominio esta subdividido en dos regiones que separan las zonas con y sin trazador al inicio del problema.	66
4.6. Interfaces triangulares y hexagonales utilizadas en el problema de transporte del trazador en una cavidad cuadrada.	66
4.7. Plano transversal $x = 0,5$ mostrando para los primeros instantes de la simulación aquellas celdas del dominio cuyo valor de la función trazadora es $\phi \geq 50$	67
4.8. Resultados utilizando pseudo-supermallas y un método basado en interpolaciones; (a) evolución temporal de la integral de ψ sobre todo el dominio; (b) evolución temporal de la desviación estándar de ψ	68
4.9. Convección de una estructura de vórtice a través de interfaces de pseudo-supermallas. Los puntos iniciales y finales del vórtice (x_c, y_c) se indican en la figura.	69
4.10. Error en media cuadrática de la velocidad; (a) componente horizontal u y (b) componente vertical v	69

4.11. Cavidad cúbica dividida en tres subdominios a lo largo del eje- x definiendo dos pares de interfaces.	70
4.12. Evolución temporal de la energía cinética.	71
4.13. Evolución temporal de la tasa de disipación de energía cinética.	72
4.14. Detalle de dos subdominios con acoplamiento parcial diferenciando las zonas acopladas de las zonas no acopladas.	73
4.15. Definición dual de los bordes para resolver interfaces parcialmente acopladas.	74
4.16. Esquema mostrando las caras de pseudo-supermalla para un par de interfaces parcialmente solapadas. En la parte superior se definen las caras de pseudo-supermalla correspondientes a la zona acoplada. En la parte inferior se muestran las caras de las interfaces barrera correspondientes al sector no acoplado.	75
4.17. Geometría del problema del escalón descendente con sus respectivas dimensiones.	76
4.18. Detalle de la discretización utilizada por medio de un plano transversal al eje x centrado en la posición de la interfaz.	77
4.19. Comparación entre los resultados de la simulación (línea continua) y los datos experimentales (círculos) para un corte longitudinal del dominio coincidente con su centro geométrico. La sección transversal en $x = 0$ se ubica en el escalón coincidente con la interfaz.	77
4.20. Pasos a realizar en una simulación de con mallas dinámicas aplicando la técnica de pseudo-supermalla.	80
4.21. Dos esquemas de particionamiento del dominio. Ambos casos están descompuestos en ocho subdominios pero mediante diferentes esquemas; (a) particionamiento sin comunicación entre procesadores; (b) particionamiento con un máximo requerimiento de comunicación entre procesadores.	81
4.22. Evaluación de las interfaces de pseudo-supermalla en cómputo paralelo. Se grafica el tiempo de cómputo de dos esquemas de particionamiento con mínima (esquema A) y máxima (esquema B) comunicación entre procesadores según el número de procesadores. Las pruebas se realizan con un clúster compuesto por procesadores Intel(R) Xeon(R) E5-1620 v2 conectados con una red infiniband QDR.	82
4.23. Descripción de los ejemplos usados para evaluar la eficiencia computacional: (a) ensayo estático con interfaces planas no conformes; (b) ensayo dinámico con interfaces cilíndricas no conformes.	84

4.24. Tiempo de cómputo requerido para acoplar las interfaces en función del número de caras de la interfaz: (a) problema estático; (b) problema dinámico. Ambos problemas se resolvieron en modo serial utilizando un CPU modelo i7-3770K.	84
5.1. Extrusión de un dominio bidimensional y su discretización generando un dominio tridimensional discretizado con una sucesión de capas o <i>layers</i> de una malla bidimensional.	87
5.2. Ejemplo de remoción de una capa de celdas	90
5.3. Explicación de los mapas para el caso de remoción de una capa de celdas.	91
5.4. Ejemplo de adición de una capa de celdas	92
5.5. Explicación gráfica del mapa \mathcal{A}_A para el caso de la adición de una nueva capa de celdas.	93
5.6. Clasificación en grupos de las caras para el caso de adición de una capa de celdas.	94
5.7. Inflación de una capa de celdas.	95
5.8. Mapa temporal en donde la topología del dominio cambia en todos los pasos temporales. Sin embargo, la historia temporal en cada paso de tiempo tiene dominios con topología constante.	96
5.9. Descripción del dominio cilíndrico utilizado en los problemas de validación y su evolución temporal correspondiente a un sistema biela-manivela.	97
5.10. Valor de ζ según el tiempo expresado como ángulo de giro de la manivela para dos métodos de integración temporal.	98
5.11. Valor integral de ψ dentro del cilindro según el ángulo de giro de la manivela.	99
5.12. Error global del problema reactivo en función del paso temporal utilizado.	100
5.13. Convección de un vórtice resuelto en un contexto de malla dinámica: un grupo de celdas se desplaza con dirección normal al avance del vórtice atravesándolo completamente.	100
5.14. Convergencia del error de la componente x de la velocidad para los esquemas temporales Euler de segundo orden y Crank-Nicolson.	101
5.15. Convergencia del error de la componente y de la velocidad para los esquemas temporales Euler de segundo orden y Crank-Nicolson.	101
5.16. Inconvenientes al utilizar un tamaño de celdas constantes a lo largo de la transformación del dominio.	102
5.17. Dominio con capas de celdas de tamaño fino, intermedio y grueso.	102
5.18. Influencia del factor de mezcla δ en la compresión de una malla.	103
5.19. Estado intermedio del dominio necesario para agregar una nueva capa de celdas cuando se utiliza deformación de malla y <i>layering</i> simultáneamente.	104
5.20. Dominio dividido en dos zonas separadas por el frente de avance de <i>layering</i>	104

5.21. Cinemática de un problema de *layering* dividido en dos zonas: (a) *layering*; (b) deformación de malla; (c) una combinación de ambos. 106

5.22. Descomposición de un dominio para *layering*. Una descomposición inicial bidimensional se extruye para conformar subdominios independientes los cuales están comunicados por fronteras interprocesador. 107

5.23. Dominio descompuesto en cuatro zonas de *layering* utilizando diferente número de procesos. Cada zona tiene su propio comunicador de MPI. 108

6.1. Dominio unidimensional con 10 celdas de las cuales las dos inferiores ascienden con movimiento rígido comprimiendo la tercer celda de abajo hacia arriba. 110

6.2. Valores de velocidad en las celdas del dominio unidimensional en función del grado de compresión de la celda deformable: 50 %, 90 %, 99 % y 99.9 %. 110

6.3. Las oscilaciones de máxima frecuencia originalmente en centro de celdas se eliminan sobre las caras por medio de interpolación lineal. 111

6.4. Error E_2 para los operadores de reconstrucción. 117

6.5. Convergencia del error de la nueva fórmula de reconstrucción en problema de cálculo de gradiente en centro de celda. 118

6.6. Error en las componentes de la velocidad usando dos valores de viscosidad para las tres formulaciones. 119

6.7. Valor de la velocidad en las celdas del dominio unidimensional para diferentes grados de compresión de la celda deformable. 120

6.8. Dominio cúbico que contiene dos regiones de aire sometidos a diferentes presiones. . . . 121

6.9. Resultados utilizando el *solver* estándar para las tres componentes de la velocidad. . . . 122

6.10. Resultados utilizando reconstrucción de flujos para las tres componentes de la velocidad. 123

7.1. Esquema bidimensional que explica el método de localización de una partícula en una malla arbitraria de volúmenes finitos. 127

7.2. Esquema bidimensional que explica el seguimiento de una partícula dentro de un triángulo para un desplazamiento relativo determinado. En una fracción α_c del desplazamiento la partícula colisiona con una de las caras del triángulo. 132

7.3. Sustitución del proceso de inflación para posibilitar el seguimiento de partículas localizadas en una nueva celda de malla. 134

7.4. Seguimiento de una partícula a través de una interfaz de pseudo-supermalla que es frontera entre dos procesadores. La partícula ingresa en el nuevo procesador localizada en el centroide de la cara de entrada correspondiente. 135

7.5. Descripción del dominio utilizado para el test de partículas en combinación con <i>layering</i> e interfaces de pseudo-supermalla. La figura muestra tres posiciones del borde móvil.	136
7.6. Tiempo de cómputo necesario en función del número de partículas totales utilizadas en el problema de malla dinámica.	137
7.7. Tiempo de cómputo en función del número de procesadores	137
7.8. Seguimiento de una partícula en un paso temporal Δt . La partícula transfiere cantidades de masa, momento y energía por medio de fuentes de intercambio que dependen de los valores de la celda. La cantidad transferida es proporcional al tiempo de permanencia de la partícula en la celda.	140
7.9. Etapas en la conversión del combustible inyectado en vapor.	146
7.10. Diagrama de flujo que describe el proceso de atomización de una parcela por medio del modelo híbrido HG-KH-RT	152
7.11. Corte lateral del inyector en donde se especifican sus dimensiones principales.	154
7.12. Penetración de vapor y líquido para las tres condiciones de inyección utilizando diferentes valores de C_5	157
7.13. Evaporación instantánea y diámetro de Sauter medio para las tres condiciones de inyección utilizando diferentes valores de C_5	158
7.14. Número total de atomizaciones por paso de tiempo para las tres condiciones de inyección utilizando diferentes valores de C_5	159
7.15. Penetración de vapor y líquido para las tres condiciones de inyección utilizando diferentes valores de B_1	160
7.16. Evaporación instantánea y diámetro de Sauter medio para las tres condiciones de inyección utilizando diferentes valores de B_1	161
7.17. Número total de atomizaciones por paso de tiempo para las tres condiciones de inyección utilizando diferentes valores de B_1	162
7.18. Penetración de vapor y líquido para las tres condiciones de inyección utilizando diferentes valores de C_{bu}	163
7.19. Evaporación instantánea y diámetro de Sauter medio para las tres condiciones de inyección utilizando diferentes valores de C_{bu}	164
7.20. Número total de atomizaciones por paso de tiempo para las tres condiciones de inyección utilizando diferentes valores de C_{bu}	165
7.21. Evolución del <i>spray</i> líquido para diferentes instantes temporales en las tres condiciones ambientales estudiadas.	166

7.22. Evolución de la isosuperficie de vapor igual a 0,1 % para diferentes instantes temporales sobre las tres condiciones ambientes estudiadas. 167

8.1. Vistas y perspectiva de los dominios que componen el modelo computacional del motor de pistones opuestos. 171

8.2. Distancia entre pistones en función del ángulo de cigüeñal 173

8.3. Interfaces destino y fuente en el motor de pistones opuestos. 173

8.4. Distribución de las velocidades de de los puntos en función de la posición para el cilindro del motor de pistones opuestos diferenciando las zonas de movimiento. 175

8.5. Evolución del proceso de deformación del cilindro en la fase de compresión. 175

8.6. Descomposición del dominio para el caso del motor de pistones opuestos utilizando 256 procesadores. El dominio completo se divide en tres regiones combinando zonas estructuradas para *layering* y zonas no estructuradas. 176

8.7. Tiempo de cómputo necesario para completar un ciclo del motor en función del número de procesadores utilizando una malla de 18,5 millones de celdas y 2000 pasos temporales. 177

8.8. Cortes de malla sobre el colector de admisión que muestran los refinamientos utilizados para estudiar la convergencia de las simulaciones del motor de pistones opuestos. 178

8.9. Evolución de la presión y temperatura del cilindro y de los caudales de entrada y salida al motor para el primer ciclo de motor simulado: (a) promedio pesado en masa de la presión dentro del cilindro; (b) promedio pesado en masa de la temperatura dentro del cilindro; (c) caudal de entrada; (d) caudal de salida. 179

8.10. Cortes indicando valores de velocidad y viscosidad turbulenta para los tres niveles de refinamiento utilizados: (a) magnitud de la velocidad en el puerto de entrada para la fase de admisión del motor; (b) viscosidad turbulenta en una sección transversal al cilindro para su máximo estado de compresión. 180

8.11. Dimensiones de la cavidad cilíndrica (pistón con caras planas). Vista lateral al eje axial del pistón y perspectiva del volumen correspondiente a la cavidad. 182

8.12. Dimensiones del segundo modelo de cavidad. Se muestra la vista normal al eje axial, una vista lateral y perspectiva del volumen correspondiente a la cavidad. 183

8.13. Dimensiones del tercer modelo de cavidad. Se muestra la vista normal al eje axial, una vista lateral y perspectiva del volumen correspondiente a la cavidad. 183

8.14. Evolución del combustible líquido para los diferentes modelos de cavidad en función del ángulo de giro del cigüeñal. En cada columna se muestra una vista en perspectiva y una vista perpendicular al eje axial del cilindro. 186

8.15. Combustible evaporado y tasa de evaporación instantánea para los tres modelos de cavidades comenzando la inyección 90 grados previo al PMI.	187
8.16. Desviación estándar relativa y distancia al punto de ignición de la masa evaporada para los tres modelos de cavidades comenzando la inyección 90 grados previo al PMI.	187
8.17. Cantidad de combustible evaporado sobre los bordes y su concentración para los tres modelos de cavidades comenzando la inyección 90 grados previo al PMI.	188
8.18. Capturas de pantalla del <i>spray</i> líquido de combustible. Se muestra la evolución temporal del <i>spray</i> líquido para diferentes puntos de comienzo de la inyección.	189
8.19. Combustible evaporado y tasa de evaporación instantánea para los cuatro puntos temporales de comienzo de la inyección.	190
8.20. Desviación estándar relativa y distancia al punto de ignición de la masa evaporada para los cuatro puntos temporales de comienzo de la inyección.	190
8.21. Cantidad de combustible evaporado sobre los bordes y su concentración para los cuatro puntos temporales de comienzo de la inyección.	191
8.22. Evolución temporal de la concentración relativa de combustible dispuestas sobre cortes normales a los ejes cartesianos y coincidentes con el centro geométrico del cilindro.	192
8.23. Desviación estándar relativa evaluada para diferentes instantes del ciclo del motor en función del punto temporal de inyección y del modelo de cavidad.	193

Índice de cuadros

4.1. Tiempo relativo que requiere cada etapa de la implementación en paralelo utilizando el esquema de particionamiento A y dos procesadores.	83
7.1. Condiciones de operación del <i>spray</i> G según la ECN.	154
7.2. Tres condiciones de aire de la cámara de inyección utilizadas para el estudio de los modelos de inyección.	155
8.1. Principales parámetros del motor de pistones opuestos JLA.	172
8.2. Parámetros físicos del fluido.	178
8.3. Valores usados en la simulación de la inyección de combustible en el motor de pistones opuestos.	181

Resumen

Los motores de combustión interna ocupan un papel central en la matriz energética mundial significando más de la mitad del consumo total de recursos fósiles a nivel mundial. El agotamiento inminente de estos recursos y los efectos negativos de los gases de efecto invernadero y otros contaminantes sobre el medio ambiente obligan a reducir drásticamente la tasa de consumo de petróleo durante las próximas décadas. Dentro de este contexto, es primordial incrementar los esfuerzos en investigación para el desarrollo de nuevas tecnologías que busquen aumentar la eficiencia de los motores y así reducir las emisiones contaminantes. Un rol clave para el desarrollo de nuevas tecnologías es la mecánica de fluidos computacional que permite obtener resultados de diferentes variantes geométricas y de parámetros de forma rápida y económica en comparación a los métodos basados en la construcción de prototipos. En este escenario, esta tesis presenta técnicas de simulación computacional de motores de combustión interna que tienen como objetivo posibilitar simulaciones de ciclo completo en tiempos de cálculo reducidos. Se proponen modelos diseñados para funcionar en arquitecturas de cómputo en paralelo y se conciben bajo la premisa de alta escalabilidad y eficiencia computacional. En detalle, se estudian diferentes técnicas de mallas dinámicas profundizando sobre el estudio de interfaces no conformes y cambios topológicos para abordar la interacción entre las partes móviles del motor y las grandes deformaciones volumétricas del cilindro respectivamente. Atendiendo a las características de estos modelos de malla dinámica se diseña un estrategia Lagrangiana de seguimiento de partículas para simular la fase líquida de combustible. Para representar la atomización de combustible se implementa un modelo híbrido de atomización estudiando la sensibilidad a sus parámetros y validando los resultados con datos experimentales. Los desarrollos de malla dinámica e inyección de combustible se aplican en la simulación de un motor de pistones opuestos de desarrollo regional evaluando la robustez y eficiencia computacional de los métodos desarrollados en un estudio paramétrico del proceso de inyección de combustible.

Capítulo 1

Introducción

1.1. Motivación

Los motores de combustión interna (ICE, por sus siglas en inglés) tienen un papel fundamental en el desarrollo de la economía mundial. Su función principal está en el área de transporte comprendiendo vehículos livianos, medios y pesados entre otras aplicaciones. Su participación dentro de la matriz energética mundial es muy importante siendo los ICE responsable de más de la mitad del consumo de recursos fósiles a nivel mundial [1]. Los motores a combustión tienen múltiples ventajas con respecto a otras fuentes de energía. Una de las más importantes es su versatilidad como consecuencia de trabajar con combustibles líquidos. La gasolina, el gas-oil entre otros combustibles tienen un elevado poder calorífico por unidad de volumen. Esto reduce el espacio de almacenamiento necesario para el combustible lo que tiene un beneficio directo en la autonomía de los vehículos. Otro aspecto favorable derivado del uso de combustibles líquidos es su facilidad de almacenamiento, en general, dentro de un recipiente sometido a presión atmosférica. La versatilidad de los ICE es muy amplia encontrándose aplicaciones desde motores para aeromodelismo hasta impulsores de varios metros de altura necesarios en grandes vehículos marítimos. Además, estos tienen un amplio rango de aplicación como por ejemplo, bombas y ventiladores, equipos de transporte, generadores de energía eléctrica, equipos viales, tractores, aviones, barcos, motocicletas y autos entre otros.

Sin embargo, los ICE poseen un bajo rendimiento termodinámico. La energía química del combustible no se aprovecha en su totalidad debido a las pérdidas de energía térmica en su refrigeración y a la energía desechada en los gases de escape. En aplicaciones de transporte, el rendimiento de conversión de potencia química a potencia mecánica disponible en las ruedas es de solo un 20 %. Otro gran inconveniente del uso a gran escala de los ICE son sus emisiones de gases contaminantes. Estas se pueden dividir en tres grupos principales: óxidos de nitrógeno (NO_x), material particulado y dióxido de carbono el cual contribuye al

efecto invernadero. Por causa de estas características desfavorables, se debe reducir el consumo de los recursos fósiles para desacelerar el ritmo del cambio climático. Esta situación ha motivado a los estados gubernamentales a exigir estrictos límites en referencia a las emisiones de gases contaminantes de los ICE. En este contexto, se han incrementado los esfuerzos en investigaciones para diseñar nuevas fuentes de energía mecánica que reemplacen a los ICE tradicionales. Dentro de estas se pueden enumerar los motores rotatorios, motores Stirling, motores a hidrógeno y motores basados en celdas de combustible. Otra alternativa de gran crecimiento son los motores eléctricos o plantas de impulsión híbridas. Estas estrategias tienen grandes ventajas respecto al consumo, principalmente en el transporte con ciclos de manejo de ciudad. Sin embargo, su rendimiento térmico global puede ser variable dependiendo de la fuente que da origen a la energía eléctrica necesaria para alimentar a las baterías.

No obstante, los ICE van a seguir siendo utilizados en los próximos años debido a sus ventajas de durabilidad, bajo costo y alta densidad energética de los combustibles líquidos. Por otro lado, es posible adaptarlos al uso de energías renovables como lo son los biocombustibles o el hidrógeno. Además, su empleo dentro del área de transporte de cargas pesadas es insustituible en el corto plazo, área en la que se consume cerca de un cuarto del total de la producción global de petróleo [1]. De manera similar, en la aeronavegación, donde no se ve a corto plazo que pueda aplicarse la tracción híbrida. Por causa de los exigentes requerimientos asociados a las emisiones de gases contaminantes se están investigando nuevas tecnologías basadas en el concepto de combustión de baja temperatura (LTC). El objetivo por el cual se propone reducir la temperatura de combustión es evitar la formación de NO_x ya que estos se generan con elevada energía de activación. Dentro de estas tecnologías se encuentran los motores de ignición por compresión de carga homogénea (HCCI), motores de ignición por compresión de mezcla premezclada (PCCI), motores a combustión pobre (*Lean Combustion Engines*) y motores de ignición por compresión de reactividad controlada (RCCI).

Dentro de este marco, el desarrollo de nuevas tecnologías para la evolución y optimización de los ICE es una estrategia de altísimo impacto para la matriz energética mundial y para el cuidado del medio ambiente. Sumado a esto, el advenimiento de nuevos desarrollos en técnicas experimentales de diagnóstico y además, el incremento exponencial de las capacidades de cómputo facilitan los avances por parte de investigadores e ingenieros. Los procesos de diseño basados en la construcción de prototipos y su evaluación mediante el método de prueba y error no serán suficientes y deben complementarse por medio de la simulación computacional predictiva y el desarrollo de herramientas de diseño las cuales han demostrado ser efectivas y confiables [2]. El uso de herramientas de simulación predictivas para mejorar el rendimiento de los motores de combustión interna acorta significativamente los plazos de desarrollo, acelera el proceso de puesta en el mercado del producto y reduce los costos de desarrollo.

1.2. Mecánica de fluidos computacional en motores de combustión interna

La simulación computacional de ICE contempla varios aspectos que deben ser resueltos de forma combinada. Por un lado, debe hallarse la solución a un modelo que permita describir el flujo compresible desarrollado dentro del motor, acoplado con otros fenómenos físicos, como la transferencia de energía y la combustión de la mezcla aire-combustible resultante de un proceso de inyección y evaporación del combustible líquido. Por otro lado, se agrega una dificultad adicional debido a los componentes móviles del motor, los cuales generan que el dominio de estudio sea variable en el tiempo.

Existen diferentes grados de aproximación y complejidad para modelar numéricamente los ICE. Dentro de los más simples se encuentran los modelos empíricos en donde se modela la variación de las variables dentro del cilindro con enfoques cero-dimensionales. El primer modelo tridimensional basado en mecánica de fluidos computacional fue por medio del software de código abierto KIVA. Este programa combina flujo compresible, inyección y combustión en un contexto de mallas dinámicas estructuradas donde las ecuaciones de gobierno se resuelven utilizando el método de los volúmenes finitos. A partir de su primera versión, se han incorporado múltiples modelos [3] que han mejorado su capacidad de predicción cuantitativa de las propiedades termodinámicas y cualitativa de emisiones contaminantes como NO_x y material particulado. En la versión KIVA-4 [4] se introduce la capacidad de resolución sobre mallas no estructuradas lo que permite una mayor flexibilidad para abordar geometrías complejas. Con el fin de incrementar la capacidad de cálculo en KIVA y aprovechar el crecimiento de la capacidad de cómputo, se han implementado diferentes estrategias de paralelización [5, 6]. Otro *solver* dedicado a la simulación de ICE es presentado por Velghe *et al.* [7] en donde se utilizan múltiples mallas para representar las fases del motor. El *solver* está basado en mallas estructuradas hexaédricas y ha sido paralelizado y testeado en más de 1000 unidades de cómputo.

Además de KIVA, existen otros softwares ampliamente utilizados para la simulación de motores. Dentro de estos se encuentra OpenFOAM(R) [8] el cual comprende un conjunto de librerías de C++ para la resolución de problemas de mecánica del continuo por el método de los volúmenes finitos. Ejemplos de aplicación en ICE se pueden encontrar en [9, 10, 11, 12]. Por otro lado gran cantidad de trabajos se realizan utilizando softwares comerciales. Entre los más empleados se destacan FLUENT, Star-CD, VECTIS, FIRE y CONVERGE(TM).

1.3. Motores de pistones opuestos

Los motores de pistones opuestos se caracterizan por tener un par de pistones trabajando en un único cilindro. Estos se mueven en direcciones opuestas variando el volumen del cilindro prescindiendo de

una tapa de cilindros. La mayoría de estos motores trabajan utilizando un ciclo de dos tiempos en donde los pistones controlan el ingreso y egreso del aire por medio de puertos tallados sobre las paredes del cilindro. Estos tienen numerosas ventajas con respecto a motores de cuatro tiempos equivalentes. Las ventajas están basadas principalmente en la ausencia de la tapa de cilindros, de las respectivas válvulas y de su tren de comando, y además se dispone de solamente un cilindro por cada dos pistones. Debido a estas características, los motores de pistones opuestos tienen mejor relación de potencia-peso, potencia-cilindrada y disponen de un mejor rendimiento térmico [13]. Por otro lado, su fabricación es más sencilla y económica como también lo es su mantenimiento. Gracias a su menor cantidad de partes móviles, los motores de pistones opuestos tienen mayor robustez y confiabilidad.

Uno de los primeros motores de pistones opuestos se originó en Alemania cerca de 1880 fabricado por Wittig [13]. A partir del siglo XX, su uso comercial se popularizó principalmente en aplicaciones de aviación en el período de la segunda guerra mundial pero también se empleó en aplicaciones terrestres y marítimas. Dentro de los motores más reconocidos se destaca a la familia de motores Junkers Jumo 204-209 en aviación, el motor Napier-Deltic en aplicaciones viales y marítimas y el motor OPOC(TM) para aplicaciones de transporte liviano y de cargas.

Sin embargo, el motor de pistones opuestos tiene ciertas desventajas que han provocado un descenso de su popularidad en los últimos años a causa de los límites legales a las emisiones contaminantes. El consumo de aceite, propio de los motores de dos tiempos, es una fuente de contaminación que excluye a los motores de pistones opuestos de aplicaciones en donde las emisiones contaminantes por encima de ciertos límites está prohibida. Por el contrario, su uso en aviones y helicópteros ligeros donde sus ventajas de bajo costo, peso y confiabilidad son cruciales, los motores de pistones opuestos siguen siendo una alternativa conveniente. No obstante, algunas empresas intentan promocionar motores para aplicaciones de transporte ligero automotriz. Uno de los ejemplos más relevantes es el motor propiedad de la firma "Achatés Power" [14] del cual se ha probado una excelente eficiencia térmica cumpliendo requisitos de emisiones contaminantes [15, 16]. Otra empresa destacada es "FairDiesel" [17] la cual comercializan un motor de pistones opuestos con un sistema innovador de conversión de movimiento lineal a rotativo. Una versión de cuatro tiempos es presentada por la firma "Pinnacle Engines" [18].

1.3.1. Motor de pistones opuestos de desarrollo regional

En esta tesis se estudia un motor de pistones opuestos de desarrollo regional el cual ha sido ideado y diseñado por José Luis Alonso y ha sido denominado JLA a razón de las iniciales de su inventor. Este motor se encuentra en fase de desarrollo y requiere de múltiples ensayos para definir sus parámetros de diseño y funcionamiento óptimos previo a ser introducido en su fase comercial. El motor está compuesto por 4 cilindros que alojan un total de 8 pistones con sus respectivas bielas y muñones de cigüeñal los

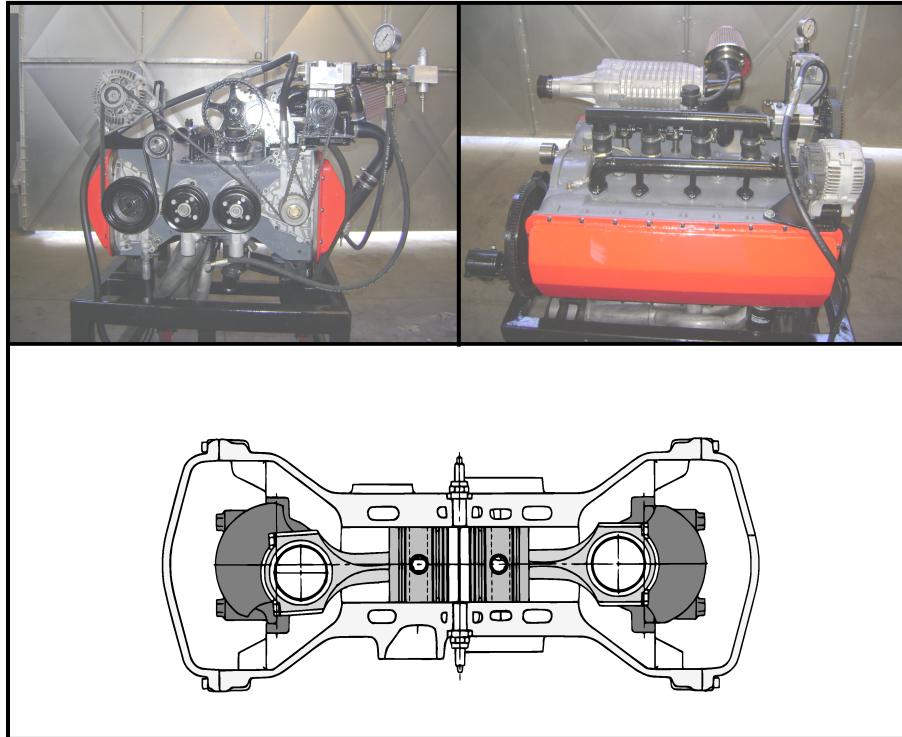


Figura 1.1: En la parte superior se muestran dos perfiles del motor de pistones opuestos JLA. En la parte inferior se muestra un corte lateral sobre uno de los cilindros (extraído de la memoria de patente de invención)

cuales están comandados por dos cigüeñales que vinculan a dos grupos enfrentados de cuatro pistones respectivamente. El motor se encuentra patentado [19] y se ha construido la primera unidad prototipo la cual se muestra en la Fig. 1.1. En esta figura se esquematiza un corte longitudinal de uno de los cilindros en donde se aprecia la disposición relativa entre los componentes principales del motor: cigüeñales, bielas, pistones y block. El motor tiene una cilindrada de 1700 cm^3 y, según un estudio preliminar, tiene capacidad para desarrollar una potencia máxima de 250 CV.

El motor funciona en base a un ciclo de dos tiempos en el cual se genera una explosión por cada giro de los cigüeñales. La entrada y salida de gases es comandada por los pistones que tapan o descubren lumbreras dispuestas en las paredes del cilindro. En la Fig. 1.2 se muestran cuatro fases dentro del ciclo de funcionamiento del motor. Se considera como primer fase a la ignición de la mezcla combustible la cual eleva la presión de los gases en la cámara de combustión. Luego, los pistones se alejan pero de forma asimétrica. Esta asimetría en el movimiento de los pistones con respecto al punto medio del cilindro se consigue debido a un desfase relativo entre los cigüeñales que se ajusta con el fin de regular los desfases temporales entre las aperturas y cierres de las lumbreras de admisión y escape. Por consiguiente, el pistón del lado de escape destapa sus respectivas lumbreras relativamente antes que el pistón del lado de admisión destape sus respectivas lumbreras. De esta forma, los gases comienzan su egreso por los

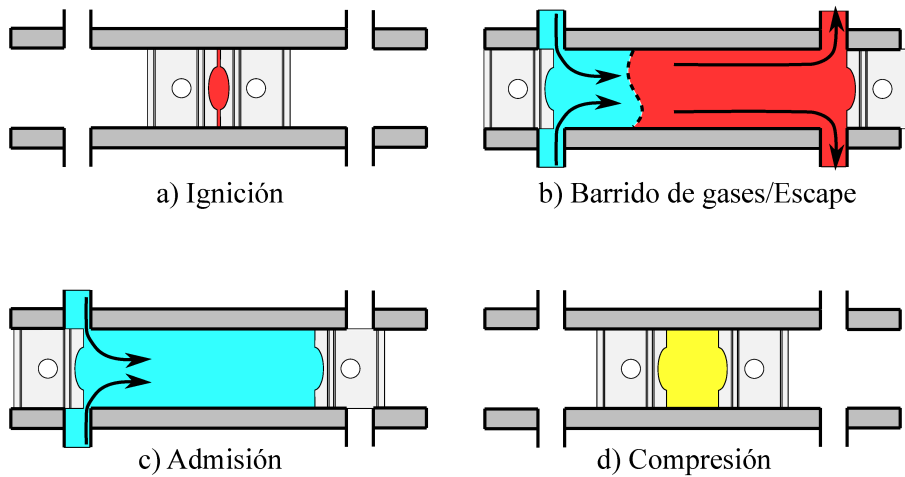


Figura 1.2: Principales etapas del ciclo de funcionamiento del motor de pistones opuestos JLA: (a) ignición; (b) escape de gases; (c) admisión y (d) compresión.

puertos de salida. Una vez que el pistón de admisión descubre los puertos de entrada, los gases frescos ingresan al cilindro barriendo a los gases remanentes de la combustión (figura b). La siguiente etapa del ciclo comienza cuando el pistón del lado de escape comienza su carrera de compresión. Aquí, este pistón cubre las lumbreras de escape mientras que el aire continúa su ingreso por las lumbreras de admisión (figura c). Finalmente, la compresión del aire por el acercamiento relativo entre los pistones se presenta en la figura d.

1.4. Problemática

La principal dificultad que enfrenta la simulación computacional de ICE es la variación temporal del dominio de estudio. En consecuencia se requiere modificar la discretización del dominio generando una malla diferente para cada paso temporal de la simulación. En comparación con un método numérico resuelto en una malla estática, los métodos computacionales aptos para mallas dinámicas requieren de una implementación más compleja, tienen mayores restricciones para su paralelización, son más costosos desde el punto de vista computacional y pueden ser menos exactos desde el punto de vista numérico.

Existen múltiples estrategias para resolver este inconveniente las cuales se dividen en dos grandes grupos. En primer lugar se encuentran aquellas técnicas que solamente modifican las coordenadas de los nodos de la malla sin necesidad de alterar su estructura de conectividades a las cuales se las denomina como técnicas de deformación de malla. Este grupo de metodologías son relativamente sencillas de implementar y son eficientes computacionalmente. Sin embargo, su rango de aplicación es limitado debido a que el grado de deformación de malla tiene un límite por encima del cual se invalida su estructura de conectividades. Esto sucede para grandes deformaciones volumétricas tal cual sucede en el motor JLA

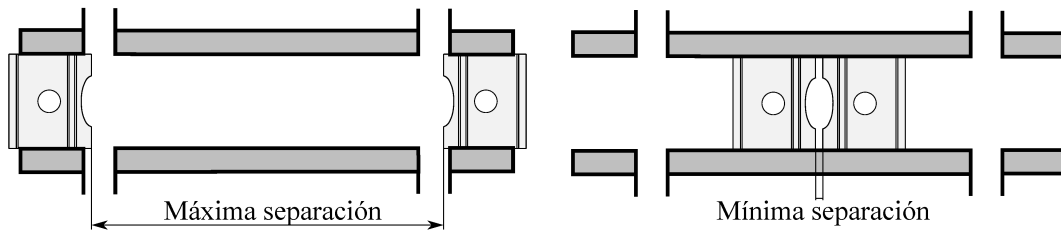


Figura 1.3: Estados de máxima y mínima separación entre pistones en el motor JLA.

según se muestra en la Fig. 1.3. En este ejemplo, la relación entre la distancia máxima y mínima entre los pistones es mayor a 50 veces. Por otro lado, las técnicas de deformación de malla no son capaces de resolver la interacción entre los pistones y las lumbreras, situación característica de los motores de dos tiempos. En la Fig. 1.4 se muestra un evento de apertura de una lumbrera en donde las regiones entre los puertos y el cilindro pasan de estar desacopladas a acopladas.

Dentro de un segundo grupo de estrategias de malla dinámica se encuentran aquellas que modifican la estructura de la mallas de forma parcial o total a las cuales se las denomina técnicas de remallado. En estos métodos, los problemas de grandes deformaciones volumétricas y de conectividad variable entre las regiones se resuelven de forma natural ya que para cada variación del dominio se corresponde una nueva discretización. Sin embargo, estos métodos tienen grandes desventajas desde el punto de vista de la eficiencia computacional. La generación de un nuevo estado de malla requiere modificar su estructura de datos lo cual conlleva dificultades desde el punto de vista de la implementación y de su paralelización. Conjuntamente, los campos de variables deben ser traducidos desde una discretización a otra incurriendo en errores de interpolación.

Teniendo en cuenta que la deformación que experimenta el cilindro en un motor es unidimensional, se ha ideado una técnica denominada *layering* [20, 21, 11] la cual ejecuta un remallado mínimo sobre el cilindro, localizado en las inmediaciones a las partes móviles, los pistones en este caso, manteniendo las ventajas de los métodos de deformación de malla y una calidad de malla casi inalterada. No obstante,

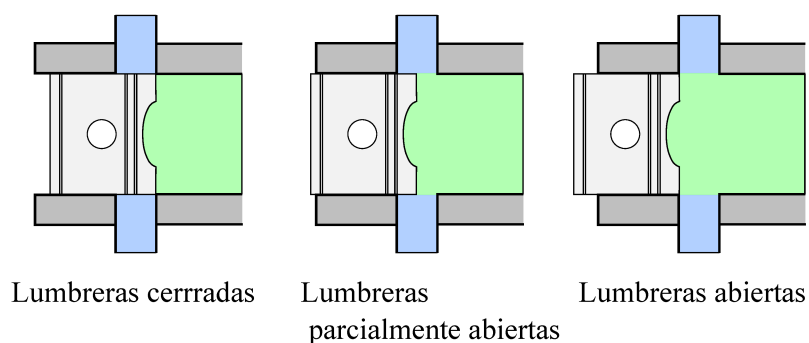


Figura 1.4: Apertura de una lumbrera por medio de la interacción entre el pistón y los puertos.

esta técnica se debe complementar con una estrategia de interfaces que permita acoplar numéricamente las regiones de los puertos y el cilindro. Para resolver esta problemática, la técnica de *layering* se complementa con el método llamado *Sliding Interfaces* [10] en donde las mallas entre regiones son unidas o “cosidas” por medio de remallar las interfaces. Además de tener un costo computacional elevado, las técnicas de acople de interfaces dinámicas por medio de interpolación de flujos no son numéricamente estables para resolver flujo compresible en motores [12].

1.5. Objetivo de la tesis

Esta tesis tiene como objetivo diseñar e implementar nuevas herramientas computacionales para simular el flujo y la inyección de combustible dentro del motor de pistones opuestos JLA considerando los puertos del motor y su cilindro a lo largo de todas las etapas de su ciclo de funcionamiento. Las herramientas computacionales se deben diseñar siguiendo los objetivos de robustez, exactitud numérica y eficiencia computacional. Además, su implementación debe ser concebida para el cómputo paralelizado con el propósito de reducir los tiempos de cálculo.

1.6. Metodología

La implementación de las nuevas herramientas computacionales se realiza sobre la plataforma OpenFOAM(R) la cual es abierta, libre y de amplio conocimiento por la comunidad científica. OpenFOAM(R) es un paquete de librerías de C++ concebidas para el desarrollo de nuevas técnicas computacionales basadas en volúmenes finitos colocados en celdas dentro de un marco de mallas poliédricas no estructuradas [8]. En este software se utilizan las librerías para cómputo en paralelo a través del protocolo de memoria distribuida MPI [22].

Las ecuaciones de gobierno del problema de flujo compresible se discretizan por medio de la formulación Lagrangiana-Euleriana-Arbitraria (ALE, por sus siglas en inglés) [23, 24, 20] utilizando el método iterativo PISO [25] para resolver el acople entre velocidad y presión. La estrategia de malla dinámica se basa en la técnica de *layering* la cual se complementa con deformación de malla en vistas de resolver las grandes deformaciones volumétricas del cilindro. El acople entre el cilindro y los puertos de admisión y escape se resuelven en base a un acople numérico conservativo basado en el concepto de supermalla [26].

La fase líquida que representa al combustible inyectado se resuelve utilizando una formulación Lagrangiana por medio del método de gota discreta (DDM, *Discrete Droplet Method*) [27]. La atomización de combustible se modela por medio de un método fenomenológico híbrido siguiendo los lineamientos

definidos en [28].

1.7. Organización de la tesis

La presente tesis se organiza en diferente capítulos en los cuales se desarrollan los siguientes temas:

En este primer capítulo se desarrolla una introducción al tema de trabajo de esta tesis. A continuación, el segundo capítulo abarca los aspectos teóricos más relevantes del método numérico empleado en el presente trabajo. Se comienza presentando una breve descripción del método de los volúmenes finitos colocados y centrados en celdas describiendo en particular las discretizaciones de las integrales de volumen y de superficie. Seguidamente se define un sistema de ecuaciones lineales a partir de la formulación inicial en el dominio continuo. En particular, se hace énfasis en la propiedad de conservación global del método de los volúmenes finitos para desarrollar los conceptos básicos necesarios para introducir el acople numérico entre interfaces que se desarrolla en los capítulos subsiguientes. Posteriormente, se explican los conceptos básicos de la formulación ALE la cual permite expresar las ecuaciones de balance en un contexto de malla móvil. Luego se plantean los esquemas de discretización temporal empleados en el presente trabajo sobre la base de la formulación ALE explicando la definición de los flujos de malla. Por último se presenta el método SIMPLE-PISO utilizado para resolver las ecuaciones de gobierno de flujo compresible y los detalles de implementación del *solver* utilizado.

En el tercer capítulo de esta tesis se aborda el problema de acople numérico entre interfaces no conformes. El capítulo comienza con una introducción a los diferentes tipos de interfaces de malla que son necesarios resolver en algunos problemas de ingeniería. En este contexto, se definen los conceptos de interfaces conformes y no conformes e interfaces acopladas y no acopladas. Luego, se presenta el tratamiento de los flujos en una interfaz no conforme a través de la interpolación de los grados de libertad ubicados en la interfaz opuesta. La determinación de los flujos en las interfaces se expresa de forma matricial concluyendo en un conjunto de restricciones que aseguran conservación global, conservación local e interpolación acotada en un acople numérico de interfaces no conformes. Siguiendo estas restricciones, se define un nuevo método de interpolación que se basa en ensamblar los coeficientes de los operadores de discretización sobre una de las interfaces para luego proyectar estos en la interfaz opuesta. Finalmente, se resuelven un par de ejemplos que demuestran las propiedades del método presentado.

El cuarto capítulo de esta tesis presenta la técnica de pseudo-supermalla para el acople de interfaces. El capítulo comienza con la definición de la técnica en su versión de interfaces totalmente acopladas para luego proseguir con una serie de ejemplos que demuestran las propiedades de conservación y de exactitud del método propuesto. Luego se presenta la extensión del método de pseudo-supermalla para el tratamiento de interfaces parcialmente acopladas resolviendo un ejemplo de flujo incompresible.

En la parte final del capítulo se presentan los detalles de implementación incluyendo el algoritmo de paralelización empleado y por último se realizan algunos tests para evaluar la eficiencia computacional.

El quinto capítulo de esta tesis describe la técnica de *layering* como una herramienta de malla dinámica para resolver grandes variaciones de volumen del dominio de estudio. En primer lugar, se explica el tratamiento de la formulación ALE en combinación con *layering* presentando las ecuaciones de conservación a satisfacer. Posteriormente se presenta la estrategia general adoptada para computar esquemas de alto orden temporal utilizando *layering* y se define un procedimiento para resolver los esquemas de diferencias descentradas hacia atrás de segundo orden y Crank-Nicolson. De forma posterior se resuelven tests para evaluar las propiedades de conservación para luego analizar el orden de precisión temporal en un problema reactivo simple. Finalmente, la discretización de alto orden se aplica sobre un problema de Navier-Stokes con solución analítica. El capítulo continúa estudiando la problemática de la gestión de la resolución de la malla. En este contexto, se presenta un método que combina *layering* con una metodología de deformación de malla. En la última parte del capítulo, se detalla la implementación en paralelo de la técnica de *layering*.

En el capítulo sexto se estudia el problema de oscilaciones en la velocidad en un *solver* de flujo basado en el algoritmo PISO. Se presenta una solución basada en flujos por medio de una nueva fórmula de reconstrucción de valores en caras a celdas de alto orden de precisión. Las propiedades anti-oscilatorias de este nuevo *solver* se validan en un par de ejemplos en donde su resolución con una formulación estándar genera resultados oscilatorios.

En el séptimo capítulo, se desarrolla el modelado de la inyección directa de combustible dentro de un motor de pistones opuestos de desarrollo regional por medio de una formulación Lagrangiana basada en partículas. En el capítulo se describen los algoritmos utilizados para resolver el seguimiento de partículas en mallas dinámicas con cambios topológicos e interfaces no conformes dentro de un marco de cómputo en paralelo. Se explica el acople numérico para resolver de forma conjunta la fase de combustible y la fase gaseosa detallando el algoritmo iterativo y las discretizaciones de las ecuaciones resultantes. En una segunda parte del capítulo, se presenta el problema de atomización el proceso de inyección en motores para el cual se propone un modelo híbrido. Sobre este modelo se realiza un estudio paramétrico y se valida el modelo contrastando los resultados con datos experimentales.

En el capítulo octavo se aplican las herramientas computacionales desarrolladas en los capítulos previos para la simulación de el motor de pistones opuestos JLA. El objetivo principal es evaluar la robustez y eficiencia computacional de las herramientas realizando pruebas de escalabilidad computacional y convergencia en malla. Finalmente, el conjunto de herramientas desarrolladas se aplica en el estudio de la inyección directa de gasolina sobre el motor. En particular se estudia la sensibilidad del punto temporal de inyección y de la forma geométrica de la cabeza del pistón sobre el mezclado del combustible dentro

del cilindro.

Finalmente, en el último capítulo se presenta un resumen final y las conclusiones de la tesis.

1.8. Contribuciones realizadas

El resultado de esta tesis proporciona un conjunto de herramientas computacionales basadas en volúmenes finitos que permiten resolver motores de combustión interna y otros problemas de ingeniería por medio de un *solver* de flujo compresible acoplado con un modelo Lagrangiano basado en partículas. Todas las herramientas desarrolladas están implementadas para funcionar de forma paralelizada, computacionalmente eficiente y destinadas para mallas poliédricas no estructuradas. La totalidad de las herramientas computacionales fueron implementadas bajo la plataforma de código libre y abierta OpenFOAM(R).

En particular este trabajo presenta las siguientes contribuciones originales:

- Desarrollo de una teoría general para el acople de interfaces no conformes en volúmenes finitos de forma de realizar un acople numérico en base a condiciones de conservación global y local (capítulo 3).
- Desarrollo e implementación de una técnica numérica conservativa para interfaces no conformes por medio de proyección de coeficientes (capítulo 3).
- Desarrollo e implementación de una nueva estrategia de resolución de interfaces no conformes basada en el concepto de supermallas. Esta nueva técnica, denominada como pseudo-supermalla, es completamente paralelizable y está concebida para trabajar con interfaces parcialmente acopladas (capítulo 4).
- Desarrollo e implementación de esquemas de integración numérica de segundo orden en mallas dinámicas con cambios topológicos (capítulo 5).
- Desarrollo e implementación de una técnica de adaptación de mallas basada en *layering* y deformación para gestionar los tamaños de celdas en problemas con variaciones de volumen extremas (capítulo 5).
- Desarrollo e implementación de un *solver* basado en reconstrucción de flujos de alto orden con el objetivo de eliminar oscilaciones en la velocidad (capítulo 6).
- Desarrollo e implementación de un modelo Lagrangiano de seguimiento de partículas apto para trabajar con la técnica de pseudo-supermallas incluyendo paralelismo e interfaces parcialmente acopladas (capítulo 7).

- Ajuste e implementación de un modelo de atomización de combustible basado en partículas (capítulo 7).
- Aplicación conjunta de la técnica de pseudo-supermalla, técnica de *layering* con deformación de malla, el modelo de seguimiento de partículas con el modelo de atomización híbrido en el estudio de un motor de pistones opuestos desarrollado en la región para el estudio del proceso de inyección de combustible (capítulo 8).

Como resultado de esta tesis se registran las siguientes publicaciones en revistas indexadas con referato,

- H.J. Aguerre, S.Márquez Damián, J.M. Gimenez, N.M. Nigro, Conservative handling of arbitrary non-conformal interfaces using an efficient supermesh, *Journal of Computational Physics*, 335 (2017) 21–49. Parte de los contenidos de este trabajo se desarrollan en el capítulo 4 de esta tesis.
- H.J. Aguerre, S.Márquez Damián, J.M. Gimenez, N.M. Nigro, Development of a stable and parallelised fluid solver for problems with mesh interfaces and deforming domains, *Computers and Fluids*, 168 (2018) 110–129. Parte del contenido de este trabajo se distribuye sobre los capítulos 4,5 y 8 de esta tesis.
- H.J. Aguerre, C.I. Pairetti, C.M. Venier, S. Márquez Damián, N.M. Nigro, An oscillation-free flow solver based on flux reconstruction, *Journal of Computational Physics*, 365 (2018) 135–148. Parte del contenido de este trabajo se encuentra en el capítulo 6 de esta tesis.
- H.J. Aguerre, S. Márquez Damián, N.M. Nigro, Conservative interpolation on surface interfaces for transport problems in the Finite Volume Method, *Journal of Computational Physics*, 395 (2019) 144-165. Parte del contenido de este trabajo se encuentra en el capítulo 3 de esta tesis.
- H.J. Aguerre, N.M. Nigro, Implementation and validation of a Lagrangian spray model using experimental data of the ECN Spray G injector, *Computers and Fluids*, 190 (2019) 30-48. Parte del contenido de este trabajo se encuentra en el capítulo 7 de esta tesis.

Capítulo 2

Método de los volúmenes finitos

2.1. Fundamentos

El método de los volúmenes finitos consiste en balancear las cantidades físicas de estudio dentro de un determinado volumen de control. De forma general, el volumen de control puede ser estático o móvil con respecto a un dado marco de referencia. En este desarrollo, se considera un volumen de control estático Ω en donde se propone balancear una cantidad tensorial arbitraria $(\rho \psi)$ definida sobre un material continuo moviéndose a una velocidad \mathbf{v} ,

$$\int_{\Omega} \frac{\partial(\rho \psi)}{\partial t} d\Omega = - \int_{\Gamma} \rho \psi \mathbf{v} \cdot d\mathbf{\Gamma} + \int_{\Omega} \mathbf{S}_{\Omega} d\Omega + \int_{\Gamma} \mathbf{S}_{\Gamma} \cdot d\mathbf{\Gamma}, \quad (2.1)$$

donde Γ es la frontera del dominio Ω , $d\mathbf{\Gamma}$ es el vector diferencial normal a la frontera, \mathbf{S}_{Ω} es una fuente volumétrica y \mathbf{S}_{Γ} es el flujo que egresa o ingresa al volumen de control a través de la frontera Γ . La Ec. (2.1) plantea que el total de la variación temporal de la cantidad extensiva $(\rho \psi)$ dentro del dominio Ω es igual a la suma de las ganancias o pérdidas de esta cantidad dentro del dominio debido a su transporte por convección y a su creación o destrucción por las fuentes de volumen y flujo a través de su superficie.

En el método de los volúmenes finitos, se discretiza el dominio Ω en un conjunto de celdas o “volúmenes finitos” P_i los cuales no se solapan y en su unión aproximan el dominio Ω ,

$$\Omega = \bigcup_i P_i \quad \wedge \quad P_i \cap P_j = \emptyset \quad \forall i, \forall j. \quad (2.2)$$

En este trabajo se considera a las celdas P como poliedros convexos y arbitrarios. El balance de $(\rho \psi)$ se aplica sobre cada una de las celdas P_i considerando a la frontera de cada celda como ∂P_i ,

$$\int_{P_i} \frac{\partial(\rho \psi)}{\partial t} dV = - \int_{\partial P_i} \rho \psi \mathbf{v} \cdot d\mathbf{S} + \int_{P_i} \mathbf{S}_{P_i} dV + \int_{\partial P_i} \mathbf{S}_{\partial P_i} \cdot d\mathbf{S} \quad \forall P_i \in \Omega \quad (2.3)$$

donde $d\mathbf{S}$ es el vector diferencial normal a la frontera de cada celda P_i . Debido a que las celdas P_i son poliedros, su frontera se puede descomponer en un conjunto de caras planas denominadas K_i ,

$$\partial P_i = \bigcup_i K_i \quad \wedge \quad K_i \cap K_j = \emptyset \quad \forall i, \forall j, \quad (2.4)$$

por lo tanto, las integrales de superficie, se expresan como la sumatoria de integrales sobre las caras K_i del poliedro,

$$\int_{P_i} \frac{\partial(\rho\psi)}{\partial t} dV = - \sum_{K_i \in P_i} \int_{K_i} \rho\psi \mathbf{v} \cdot d\mathbf{S} + \int_{P_i} \mathbf{S}_{P_i} dV + \sum_{K_i \in P_i} \int_{K_i} \mathbf{S}_{K_i} \cdot d\mathbf{S} \quad \forall P_i \in \Omega \quad (2.5)$$

2.1.1. Volúmenes finitos con variables colocadas en centro de celdas

La Ec. (2.5) genera un sistema de n ecuaciones igual al número de celdas en el cual se discretiza el dominio Ω . De forma de obtener una solución única y determinada, el sistema de n ecuaciones debe incluir n incógnitas. En un método de volúmenes finitos colocados en celdas, las incógnitas se localizan en el centroide o baricentro geométrico \mathbf{x}_P de la celda P la cual verifica,

$$\int_{P_i} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_P) dV = 0 \quad (2.6)$$

2.1.2. Discretización de las integrales de volumen

Para discretizar las integrales de volumen de una cantidad ψ dentro de una celda P ,

$$\int_P \psi(\mathbf{x}) dV, \quad (2.7)$$

se reemplaza al campo $\psi(\mathbf{x})$ por una aproximación de Taylor de primer orden centrada en el centro de celda \mathbf{x}_P ,

$$\psi(\mathbf{x}) = \psi(\mathbf{x}_P + \Delta\mathbf{x}) = \psi(\mathbf{x}_P) + (\Delta\mathbf{x})^T \cdot \nabla\psi(\mathbf{x}_P) + \mathbf{r}(\Delta\mathbf{x}), \quad (2.8)$$

en donde $\Delta\mathbf{x} = (\mathbf{x} - \mathbf{x}_P)$ es el vector que une cualquier punto con el centroide de celda y $\mathbf{r}(\Delta\mathbf{x})$ es el error de truncamiento o residuo el cual es proporcional a la segunda potencia de $\Delta\mathbf{x}$ y a la norma de la matriz Hessiana de la función ψ evaluada en un punto $\tilde{\mathbf{x}}$ perteneciente a la bola $B(\mathbf{x}_P, \Delta\mathbf{x})$,

$$\mathbf{r}(\Delta\mathbf{x}) = \frac{1}{2}(\Delta\mathbf{x})^T \cdot \mathbf{H}(\tilde{\mathbf{x}}) \cdot (\Delta\mathbf{x}) \quad \tilde{\mathbf{x}} \in B(\mathbf{x}_P, \Delta\mathbf{x}). \quad (2.9)$$

Introduciendo la aproximación (2.8) en (2.7) y considerando la propiedad definida en (2.6):

$$\begin{aligned}
\int_{P_i} \psi(\mathbf{x}) dV &\approx \int_{P_i} [\psi(\mathbf{x}_P) + (\Delta \mathbf{x})^T \cdot \nabla \psi] dV \\
&= \psi(\mathbf{x}_P) \int_{P_i} dV + \left[\int_{P_i} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_P)^T dV \right] \cdot \nabla \psi \\
&= \psi(\mathbf{x}_P) V_{P_i}
\end{aligned} \tag{2.10}$$

2.1.3. Discretización de las integrales de superficie

La integral de superficie sobre una cara K_i de una cantidad $\psi(\mathbf{x})$ se expresa como,

$$\int_{K_i} \psi(\mathbf{x}) dA, \tag{2.11}$$

en donde dA es el elemento diferencial de área. La cara K_i es compartida por dos celdas las cuales se denominan de forma relativa como P_1 y P_2 . Se utiliza una formulación compacta, en donde la discretización de la Ec. (2.11) se expresa en función de los valores de sus celdas adyacentes, es decir: ψ_{P_1} y ψ_{P_2} . Bajo este concepto, se discretizan las integrales de superficie considerando una variación espacial de la función $\psi(\mathbf{x})$ como una aproximación de Taylor centrada sobre un determinado punto intermedio del segmento que une los centroides de las celdas P_1 y P_2 , $\mathbf{x}_{12} \in [\mathbf{x}_{P_1}, \mathbf{x}_{P_2}]$:

$$\psi(\mathbf{x}) = \psi(\mathbf{x}_{12}) + (\Delta \mathbf{x}_{12})^T \cdot \nabla \psi(\mathbf{x}_{12}) + \mathbf{r}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{12}). \tag{2.12}$$

El punto intermedio \mathbf{x}_{12} es aquel que verifica que la derivada de $\psi(\mathbf{x})$ en dirección paralela al segmento $[\mathbf{x}_{P_1}, \mathbf{x}_{P_2}]$ es:

$$\frac{(\mathbf{x}_{P_2} - \mathbf{x}_{P_1})^T}{\|(\mathbf{x}_{P_2} - \mathbf{x}_{P_1})\|} \cdot \nabla \psi(\mathbf{x}_{12}) = \frac{\psi_{P_2} - \psi_{P_1}}{\|(\mathbf{x}_{P_2} - \mathbf{x}_{P_1})\|}. \tag{2.13}$$

Considerando los errores de cambio de centro se puede cambiar el centro de la serie de Taylor desde \mathbf{x}_{12} a los centros de celdas P_1 y P_2 . De esta forma, para todo \mathbf{x} perteneciente al segmento $[\mathbf{x}_{P_1}, \mathbf{x}_{P_2}]$,

$$\begin{aligned}
\psi(\mathbf{x}) &= \psi(\mathbf{x}_{P_1}) + \|(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{P_1})\| \cdot \frac{(\psi_{P_2} - \psi_{P_1})}{\|(\mathbf{x}_{P_2} - \mathbf{x}_{P_1})\|} + \mathbf{r}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{12}) + \mathbf{r}(\mathbf{x}_{P_1} - \mathbf{x}_{12}), \\
\psi(\mathbf{x}) &= \psi(\mathbf{x}_{P_2}) + \|(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{P_2})\| \cdot \frac{(\psi_{P_2} - \psi_{P_1})}{\|(\mathbf{x}_{P_2} - \mathbf{x}_{P_1})\|} + \mathbf{r}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{12}) + \mathbf{r}(\mathbf{x}_{P_2} - \mathbf{x}_{12}).
\end{aligned} \tag{2.14}$$

Al punto que resulta de la intersección del segmento $[\mathbf{x}_{P_1}, \mathbf{x}_{P_2}]$ con el plano que contiene a la cara K_i se lo denomina como \mathbf{x}_{f_i} . Evaluando la primer expresión (o bien la segunda) de la Ec. (2.14) en el punto

\mathbf{x}_{f_i} se obtiene,

$$\psi(\mathbf{x}_{f_i}) = \psi(\mathbf{x}_{P_1}) + \|(\mathbf{x}_{f_i} - \mathbf{x}_{P_1})\| \cdot \frac{(\psi_{P_2} - \psi_{P_1})}{\|(\mathbf{x}_{P_2} - \mathbf{x}_{P_1})\|} + \mathbf{r}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{12}) + \mathbf{r}(\mathbf{x}_{P_1} - \mathbf{x}_{12}) \quad (2.15)$$

Con el objetivo de expresar la integral de superficie a partir del valor del centroide \mathbf{x}_K , se propone expresarlo como una serie de Taylor centrada en el punto \mathbf{x}_{f_i} ,

$$\psi(\mathbf{x}_K) = \psi(\mathbf{x}_{f_i}) + \Delta \mathbf{x}_{f_i}^T \cdot \nabla \psi(\mathbf{x}_{f_i}) + \mathbf{r}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{f_i}) \quad (2.16)$$

Si se reemplaza la expresión dada en (2.15) en (2.16) se obtiene la expresión del valor de centroide de cara como función de los valores de celda ψ_{P_1} y ψ_{P_2} ,

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{x}_K) = & \psi(\mathbf{x}_{P_1}) + \|(\mathbf{x}_{f_i} - \mathbf{x}_{P_1})\| \cdot \frac{(\psi_{P_2} - \psi_{P_1})}{\|(\mathbf{x}_{P_2} - \mathbf{x}_{P_1})\|} + \Delta \mathbf{x}_{f_i}^T \cdot \nabla \psi(\mathbf{x}_{f_i}) \\ & + \mathbf{r}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{12}) + \mathbf{r}(\mathbf{x}_{P_1} - \mathbf{x}_{12}) + \mathbf{r}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{f_i}). \end{aligned} \quad (2.17)$$

De forma análoga a lo planteado en la discretización de las integrales de volumen, la integral sobre la cara se puede aproximar a segundo orden por medio del valor en el centroide de la cara:

$$\int_{K_i} \psi(\mathbf{x}) dA, \approx \psi(\mathbf{x}_K) A_K \quad (2.18)$$

donde A_K es el área de la cara K . Considerando la expresión obtenida en la Ec. (2.17) se puede aproximar el valor de $\psi(\mathbf{x}_K)$ a segundo orden como,

$$\psi(\mathbf{x}_K) \approx \psi(\mathbf{x}_{P_1}) + \|(\mathbf{x}_{f_i} - \mathbf{x}_{P_1})\| \cdot \frac{(\psi_{P_2} - \psi_{P_1})}{\|(\mathbf{x}_{P_2} - \mathbf{x}_{P_1})\|} + \Delta \mathbf{x}_{f_i}^T \cdot \nabla \psi(\mathbf{x}_{f_i}) \quad (2.19)$$

Si se considera que el centroide de la cara coincide con el punto \mathbf{x}_{f_i} entonces la expresión anterior se reduce a,

$$\psi(\mathbf{x}_K) \approx \psi(\mathbf{x}_{P_1}) + \|(\mathbf{x}_K - \mathbf{x}_{P_1})\| \cdot \frac{(\psi_{P_2} - \psi_{P_1})}{\|(\mathbf{x}_{P_2} - \mathbf{x}_{P_1})\|}. \quad (2.20)$$

Reemplazando la Ec. (2.20) en Ec. (2.18) se resuelve la integral de superficie como función de los valores de celdas adyacentes por medio de la siguiente expresión:

$$\int_{K_i} \psi(\mathbf{x}) dA, \approx \psi(\mathbf{x}_{P_2}) \left(1 - \frac{\|(\mathbf{x}_K - \mathbf{x}_{P_2})\|}{\|(\mathbf{x}_{P_2} - \mathbf{x}_{P_1})\|}\right) A_K + \psi(\mathbf{x}_{P_1}) \frac{\|(\mathbf{x}_K - \mathbf{x}_{P_2})\|}{\|(\mathbf{x}_{P_2} - \mathbf{x}_{P_1})\|} A_K. \quad (2.21)$$

2.1.4. Sistema de ecuaciones lineales

El balance integral definido en la Ec. (2.5) se discretiza con el objetivo de generar un sistema de ecuaciones lineales factible de ser resuelto eficientemente por métodos computacionales. De esta forma la Ec. (2.5) se discretiza como,

$$\sum_j a_{ij} \psi_j = b_i \quad \forall P_i \in \Omega, \quad (2.22)$$

donde a_{ij} son los coeficientes que afectan a los valores incógnita por celda ψ_j y b_i es el término independiente asociado a la celda i . El sistema de ecuaciones definido en la Ec. (2.22) genera un sistema lineal con n ecuaciones y n incógnitas. Con el fin de reducir la complejidad computacional, se busca que la matriz de coeficientes a_{ij} tenga la mayor cantidad de ceros de forma de reducir el número de operaciones al momento de realizar multiplicaciones matriz-vector. En este sentido, cada ecuación en (2.22) involucra solamente los valores discretizados de ψ que pertenecen a la celda P_i y a sus celdas vecinas. Las celdas vecinas a P_i son aquellas que comparten con ella una de sus caras. A estas celdas también se las denomina comúnmente como primeros vecinos. El balance discreto sobre cada una de las celdas P_i se puede expresar como:

$$a_{ii} \psi_i + \sum_n a_{in} \psi_n = b_i \quad \forall P_i \in \Omega, \quad (2.23)$$

donde el subíndice n identifica las celdas vecinas a P_i . A esta discretización que incluye solamente primeros vecinos se lo denomina discretización de *stencil* compacto.

2.2. Conservación global del método de los volúmenes finitos

Una propiedad importante del método de los volúmenes finitos es su propiedad de conservación global de las cantidades balanceadas. El concepto de conservación global consiste en satisfacer la ecuación de balance de una determinada cantidad sobre todo el dominio de estudio tal como se planteó en la Ec. (2.1). Si se considera que el dominio Ω está compuesto por una unión de celdas P_i tal como se definió en la Ec. (2.3), entonces el balance global sobre Ω se puede expresar como la sumatoria de los balances realizados sobre cada una de las celdas,

$$\sum_{P_i \in \Omega} \int_{P_i} \left(\frac{\partial \psi}{\partial t} - \mathbf{S}_{P_i} \right) dV = - \sum_{P_i \in \Omega} \sum_{K_i \in P_i} \int_{K_i} (\psi \mathbf{v} - \mathbf{S}_{K_i}) \cdot d\mathbf{A}. \quad (2.24)$$

La doble sumatoria anidada del término derecho en la Ec. (2.24) se puede considerar como la suma de tres sumatorias. Dos de ellas incluyen a las caras internas K_I y la sumatoria restante, a las caras de borde

al dominio K_Γ ,

$$\sum_{P_i \in \Omega} \sum_{K_i \in P_i} () = \sum_{K_{I_a} \in \Omega} () + \sum_{K_{I_b} \in \Omega} () + \sum_{K_\Gamma \in \Omega} (). \quad (2.25)$$

El par de sumatorias asociadas a las caras internas se corresponden a cada uno de los balances de sus celdas adyacentes respectivamente. Estas celdas se diferencian por medio de los subíndices a y b en K_I . Teniendo en cuenta que el vector normal de área $d\mathbf{A}$ esta orientado hacia el exterior de la celda en cada balance, entonces los vectores $d\mathbf{A}$ correspondientes al par de celdas adyacentes de una cara K tienen sentidos opuestos. Esto implica que la contribución neta de cada cara interna es nula,

$$\int_{K_a} \Psi \cdot d\mathbf{A} + \int_{K_b} \Psi \cdot d\mathbf{A} = 0 \quad (2.26)$$

donde Ψ es una cantidad tensorial arbitraria. Se incorporan las equivalencias dadas en (2.26) y (2.25) dentro de (2.24),

$$\sum_{P_i \in \Omega} \int_{P_i} \left(\frac{\partial \psi}{\partial t} - \mathbf{S}_{P_i} \right) dV = \sum_{K_\Gamma \in \Omega} \int_{K_\Gamma} (\psi \mathbf{v} - \mathbf{S}_{K_\Gamma}) \cdot d\mathbf{A}. \quad (2.27)$$

Luego, agrupando las integrales sobre cada una de las celdas y caras de borde sobre una única integral, en todo el dominio y en toda la frontera respectivamente, se llega al balance global del cual se comenzó este análisis,

$$\int_{\Omega} \frac{\partial(\psi)}{\partial t} d\Omega = - \int_{\Gamma} \psi \mathbf{v} \cdot d\mathbf{\Gamma} + \int_{\Omega} \mathbf{S}_{\Omega} d\Omega + \int_{\Gamma} \mathbf{S}_{\Gamma} \cdot d\mathbf{\Gamma}. \quad (2.28)$$

Del desarrollo realizado se concluye que la discretización por volúmenes finitos satisface por definición el balance global de la cantidad ψ dentro del dominio Ω . El punto clave de este concepto es la propiedad descrita en la Ec. (2.26), en donde los flujos definidos sobre las caras internas respectivos a los balances de sus celdas adyacentes son opuestos.

Las integrales sobre las caras se expresan como una combinación lineal de los valores en celdas adyacentes. En este sentido, se define a la integral sobre K_a como función de los valores en las celdas propias y vecinas a las caras,

$$\int_{K_a} \Psi \cdot d\mathbf{A} = \phi(K_a) = \alpha_{aa} \psi_a + \alpha_{ab} \psi_b. \quad (2.29)$$

De la misma forma para K_b ,

$$\int_{K_b} \Psi \cdot d\mathbf{A} = \phi(K_b) = \alpha_{ba} \psi_a + \alpha_{bb} \psi_b. \quad (2.30)$$

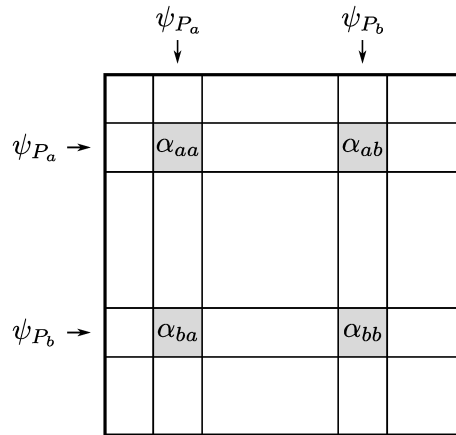


Figura 2.1: Coeficientes en la matriz del sistema de ecuaciones lineales del problema de volúmenes finitos resultantes de la contribución al sistema de una cara arbitraria K .

Combinando las Ec. (2.29) y (2.30) en (2.26) y reagrupando se llega a la siguiente expresión,

$$(\alpha_{aa} + \alpha_{ba}) \psi_a + (\alpha_{ab} + \alpha_{bb}) \psi_b = 0 \quad (2.31)$$

La ecuación anterior se debe cumplir para cualquier valor de las incógnitas ψ_a y ψ_b . Con esta última imposición la Ec. (2.31) entonces,

$$\begin{aligned} \alpha_{aa} &= -\alpha_{ba} \\ \alpha_{ab} &= -\alpha_{bb}. \end{aligned} \quad (2.32)$$

La última ecuación define que los coeficientes resultantes de la contribución de una cara K en el sistema de ecuaciones lineales son opuestos. El ensamble correspondiente a los flujos definidos en (2.30) y (2.29) se muestra en la Fig. 2.1 donde se aprecia que la sumatoria de los valores en las columnas respectivas a los grados de libertad ψ_a y ψ_b es nula como consecuencia de Ec. (2.32).

2.2.1. Flujo en una cara y flujos parciales

El flujo en una cara se corresponde con una cantidad física que atraviesa la frontera entre dos volúmenes de control que son sus celdas adyacentes. La magnitud del flujo depende físicamente del valor de la cantidad transportada ψ a ambos lados de la cara considerada. En el problema discretizado, esta dependencia espacial del flujo se linealiza por medio de una combinación lineal de los valores de celda ψ_a y ψ_b . En este sentido, el flujo en una cara K se puede considerar como la suma de dos contribuciones las cuales dependen cada una de las celdas adyacentes a la cara. A estas contribuciones se las denomina

como flujos parciales de la cara K y se definen como,

$$\begin{aligned}
 \phi_{aa}(K) &= \alpha_{aa} \psi_a \\
 \phi_{ba}(K) &= \alpha_{ba} \psi_a \\
 \phi_{ab}(K) &= \alpha_{ab} \psi_b \\
 \phi_{bb}(K) &= \alpha_{bb} \psi_b,
 \end{aligned} \tag{2.33}$$

entonces,

$$\begin{aligned}
 \phi_a(K) &= \phi_{aa}(K) + \phi_{ab}(K) \\
 \phi_b(K) &= \phi_{ba}(K) + \phi_{bb}(K).
 \end{aligned} \tag{2.34}$$

Teniendo en cuenta la Ec. (2.32) los flujos parciales que dependen de un mismo grado de libertad son opuestos,

$$\begin{aligned}
 \phi_{aa}(K) &= -\phi_{ba}(K) \\
 \phi_{ab}(K) &= -\phi_{bb}(K).
 \end{aligned} \tag{2.35}$$

2.2.2. Propiedad telescópica

La propiedad de conservación global del método de los volúmenes finitos se puede extender a un subdominio $\Omega_i \in \Omega$ cualquiera compuesto por n celdas. El subdominio Ω_i puede estar compuesto por una o varias celdas y formar incluso regiones disconexas, tal como se ejemplifica en la Fig. 2.2. Sobre cualesquiera de los subdominios Ω_i se puede plantear la ecuación de balance global como la sumatoria de los balances locales de cada una de sus celdas $P_i \in \Omega_i$,

$$\begin{aligned}
 \sum_{P_i \in \Omega_i} \int_{P_i} \left(\frac{\partial \psi}{\partial t} - \mathbf{S}_{P_i} \right) dV &= - \sum_{P_i \in \Omega_i} \sum_{K_i \in P_i} \int_{K_i} (\psi \mathbf{v} - \mathbf{S}_{K_i}) \cdot d\mathbf{A} \\
 &= - \left[\sum_{K_a \in \Omega_i} \int_{K_a} (\psi \mathbf{v} - \mathbf{S}_{K_a}) \cdot d\mathbf{A} + \sum_{K_b \in \Omega_i} \int_{K_b} (\psi \mathbf{v} - \mathbf{S}_{K_b}) \cdot d\mathbf{A} \right] \\
 &\quad - \sum_{K_\Gamma \in \Omega_i} \int_{K_\Gamma} (\psi \mathbf{v} - \mathbf{S}_{K_\Gamma}) \cdot d\mathbf{A}.
 \end{aligned} \tag{2.36}$$

en donde $K_\Gamma \in \Omega_i$ son las caras de borde del subdominio considerado. El término entre corchetes es nulo debido a que las integrales sobre cada cara K con las orientaciones a y b son opuestas. Por lo tanto se demuestra que para cualquier subdominio Ω_i , la sumatoria de los balances locales de las celdas que lo

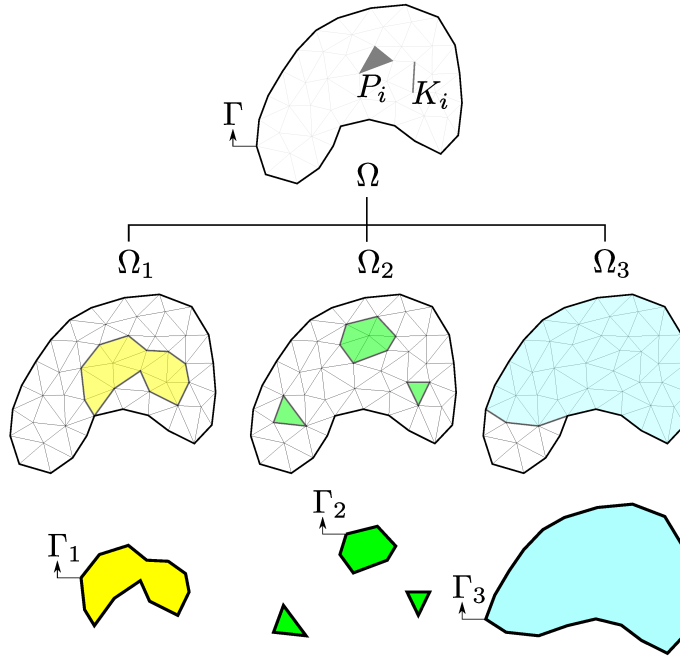


Figura 2.2: Diferentes subdominios compuestos como combinaciones arbitrarias de celdas que pertenecen al dominio Ω .

componen es equivalente al balance global sobre este:

$$\int_{\Omega_i} \left(\frac{\partial \psi}{\partial t} - \mathbf{S}_{P_i} \right) dV + \int_{\Gamma_i} (\psi \mathbf{v} - \mathbf{S}) \cdot d\mathbf{A} = 0 \quad \Gamma_i \in \partial\Omega_i, \forall \Omega_i \subseteq \Omega. \quad (2.37)$$

La ecuación anterior resume el concepto de propiedad telescópica del método de los volúmenes finitos. Teniendo en cuenta la igualdad planteada en (2.32) se puede extender a la totalidad de las caras $K^i \in \Omega_i$ como,

$$\begin{aligned} \alpha_{aa}^i &= -\alpha_{ba}^i \quad \forall K^i \in \Omega_i \\ \alpha_{ab}^i &= -\alpha_{bb}^i \quad \forall K^i \in \Omega_i \end{aligned} \quad (2.38)$$

La igualdad expresada en la ecuación anterior se puede interpretar como una igualdad matricial en donde el conjunto de coeficientes α_{aa}^i , α_{ba}^i , α_{ab}^i y α_{bb}^i son agrupados en matrices cuadradas y diagonales con un tamaño igual al número de celdas del dominio considerado: \mathbf{A}_{aa} , \mathbf{A}_{ba} , \mathbf{A}_{ab} y \mathbf{A}_{bb} tal que,

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{A}_{aa} \cdot \mathbf{e}_i &= \alpha_{aa} \\ \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{A}_{ba} \cdot \mathbf{e}_i &= \alpha_{ba} \\ \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{A}_{ab} \cdot \mathbf{e}_i &= \alpha_{ab} \\ \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{A}_{bb} \cdot \mathbf{e}_i &= \alpha_{bb}, \end{aligned} \quad (2.39)$$

donde e_i es el vector canónico de un tamaño equivalente al de las filas o columnas de las matrices \mathbf{A} recién definidas. Introduciendo estas definiciones, la Ec. (2.38) se expresa de forma matricial como,

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_{aa} \cdot \mathbf{1}^{m \times 1} &= -\mathbf{A}_{ba} \cdot \mathbf{1}^{m \times 1} \\ \mathbf{A}_{ab} \cdot \mathbf{1}^{m \times 1} &= -\mathbf{A}_{bb} \cdot \mathbf{1}^{m \times 1}, \end{aligned} \quad (2.40)$$

donde $\mathbf{1}^{m \times 1}$ es un vector columna de “unos” asumiendo que $\mathbf{A} \in \mathcal{R}^{m \times m}$.

2.3. Formulación Euleriana-Lagrangiana Arbitraria

La formulación Euleriana-Lagrangiana Arbitraria (ALE) [24] permite plantear ecuaciones de transporte sobre dominios que son variables en el tiempo. La ecuación de transporte de una cantidad ψ sobre un dominio con variación temporal $\Omega(t)$ se escribe como,

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega(t)} \psi dV + \int_{\Gamma(t)} \psi (\mathbf{v}_r \cdot d\mathbf{\Gamma}) = - \int_{\Gamma(t)} \nabla \psi \cdot \mathbf{D} \cdot d\mathbf{\Gamma} + \int_{\Omega(t)} r \psi dV, \quad (2.41)$$

donde \mathbf{v}_r es la velocidad relativa del medio continuo con respecto a la frontera móvil $\Gamma(t)$ que es igual a $(\mathbf{v} - \mathbf{v}_\Gamma)$ siendo \mathbf{v} la velocidad del medio continuo y \mathbf{v}_Γ la velocidad de la frontera. Por otro lado \mathbf{D} es el tensor de difusividad y r es el coeficiente lineal del término fuente. Además del balance presentado en (2.41) la formulación ALE requiere satisfacer un balance adicional denominado como ley de conservación del espacio,

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega(t)} dV + \int_{\Gamma(t)} \mathbf{v}_\Gamma \cdot d\mathbf{\Gamma} = 0. \quad (2.42)$$

Este balance define que la variación volumétrica del dominio Ω_t debe ser equivalente al volumen barrido por su frontera. La discretización temporal de los balances (2.41) y (2.42) se debe efectuar de forma idéntica. De otra forma se introducirían fuentes de masas espurias [29].

2.3.1. Integración temporal Euler de segundo orden

La discretización temporal de la ley de conservación del espacio por el método de segundo orden descentrado hacia atrás es,

$$\frac{\frac{3}{2}V_P^{(n)} - 2V_P^{(n-1)} + \frac{1}{2}V_P^{(n-2)}}{\Delta t} - \sum_{K \in P} \left[\frac{3}{2}\varphi_K^{(n)} - \frac{1}{2}\varphi_K^{(n-1)} \right] = 0, \quad (2.43)$$

donde los superíndices denotan el paso de tiempo correspondiente y $\varphi_K^{(n)}$ es el flujo espacial barrido por la cara para la transformación correspondiente a los pasos temporales $t^{(n-1)}$ y $t^{(n)}$. Estos flujos en las

caras se denominan como flujos de malla. Para toda transformación geométrica de una celda poliédrica la sumatoria de los flujos de malla $\varphi_K^{(n)}$ sobre todos las caras de una celda P satisface el cambio de volumen entre el paso temporal nuevo y su predecesor,

$$\begin{aligned} \frac{V_P^{(n-1)} - V_P^{(n-2)}}{\Delta t} - \sum_{K \in P} \varphi_K^{(n-1)} &= 0 \\ \frac{V_P^{(n)} - V_P^{(n-1)}}{\Delta t} - \sum_{K \in P} \varphi_K^{(n)} &= 0. \end{aligned} \quad (2.44)$$

Se puede demostrar que el cumplimiento del par de ecuaciones dadas en (2.44) es una condición suficiente para satisfacer la Ec. (2.43). Al término entre corchetes de la Ec. (2.43) se lo define como el flujo de malla en K del método de integración de Euler de segundo orden,

$$\varphi_K^E = \frac{3}{2}\varphi_K^{(n)} - \frac{1}{2}\varphi_K^{(n-1)}. \quad (2.45)$$

Teniendo en cuenta la última definición se discretiza la ecuación de transporte dada en (2.41) sobre la celda P como,

$$\begin{aligned} \frac{\frac{3}{2}\psi_P^{(n)}V_P^{(n)} - 2\psi_P^{(n-1)}V_P^{(n-1)} + \frac{1}{2}\psi_P^{(n-2)}V_P^{(n-2)}}{\Delta t} + \sum_{K \in P} \left(\phi_{v_K}^{(n)} - \varphi_K^E \right) \psi_K^{(n)} \\ = \\ \sum_{K \in P} \mathbf{D}_K \cdot \nabla \psi_K^{(n)} \cdot \mathbf{S}_K^{(n)} + r\psi_P^{(n)}V_P^{(n)}, \end{aligned} \quad (2.46)$$

donde $\phi_{v_K}^{(n)} = \mathbf{v}_K^{(n)} \cdot \mathbf{S}_K$ es el flujo volumétrico absoluto que atraviesa la cara K a tiempo n .

2.3.2. Método de discretización temporal de Crank Nicolson

La discretización de la ley de conservación del espacio por el método de Crank-Nicolson es,

$$\frac{V_P^{(n)} - V_P^{(n-1)}}{\Delta t} = \frac{1}{2} \left[\sum_{K \in P} \varphi_{\text{CN}_K}^{(n-1)} + \sum_{K \in P} \varphi_{\text{CN}_K}^{(n)} \right], \quad (2.47)$$

donde φ_{CN_K} se denomina al flujo de malla de la cara K para este método. La relación entre este flujo y el flujo de malla geométrico se obtiene reemplazando la segunda expresión de la Ec. (2.44) en (2.47),

$$\sum_{K \in P} \varphi_K^{(n)} = \frac{1}{2} \left[\sum_{K \in P} \varphi_{\text{CN}_K}^{(n-1)} + \sum_{K \in P} \varphi_{\text{CN}_K}^{(n)} \right], \quad (2.48)$$

por lo que el flujo de malla del esquema Crank-Nicolson se despeja como,

$$\sum_{K \in P} \varphi_{\text{CN}_K}^{(n)} = 2 \sum_{K \in P} \varphi_K^{(n)} - \sum_{K \in P} \varphi_{\text{CN}_K}^{(n-1)}. \quad (2.49)$$

Una condición suficiente para satisfacer la Ec. (2.49) es,

$$\varphi_{\text{CN}_K}^{(n)} = 2\varphi_K^{(n)} - \varphi_{\text{CN}_K}^{(n-1)} \quad \forall K. \quad (2.50)$$

Se discretiza la ecuación de transporte (2.41),

$$\frac{\psi_P^{(n)} V_P^{(n)} - \psi_P^{(n-1)} V_P^{(n-1)}}{\Delta t} = \frac{1}{2} \left[F(\psi)^{(n-1)} + F(\psi)^{(n)} \right], \quad (2.51)$$

en donde $F(\psi)$ es un operador que representa los términos discretizados de la ecuación de transporte exceptuando el término temporal. Este operador a tiempo $t^{(n)}$ se define como,

$$F(\psi)^{(n)} = \sum_{K \in P} \left(\phi_{v_K}^{(n)} - \varphi_{\text{CN}_K}^{(n)} \right) \psi_K^{(n)} - \sum_{K \in P} \mathbf{D}_K \cdot \nabla \psi_K^{(n)} \cdot \mathbf{S}_K^{(n)} + r \psi_P^{(n)} V_P^{(n)}. \quad (2.52)$$

El operador $F(\psi)^{(n-1)}$ se obtiene por despeje a partir de la discretización de la ecuación de transporte para el paso temporal $t^{(n-1)}$,

$$\frac{\psi_P^{(n-1)} V_P^{(n-1)} - \psi_P^{(n-2)} V_P^{(n-2)}}{\Delta t} = \frac{1}{2} \left[F(\psi)^{(n-2)} + F(\psi)^{(n-1)} \right], \quad (2.53)$$

entonces,

$$F(\psi)^{(n-1)} = 2 \left[\frac{\psi_P^{(n-1)} V_P^{(n-1)} - \psi_P^{(n-2)} V_P^{(n-2)}}{\Delta t} \right] - F(\psi)^{(n-2)}. \quad (2.54)$$

La evaluación del término $F(\psi)^{(n-1)}$ por medio de la ecuación anterior tiene una ventaja de implementación en comparación con especializar la definición dada en la Ec.(2.52) para el tiempo $t^{(n-1)}$. Esta última alternativa requiere evaluar nuevamente los operadores convectivos y difusivos del paso temporal previo mientras que la Ec. (2.54) determina este término por medio de un cálculo basado en los valores doblemente pasados $t^{(n-2)}$ incluyendo el operador $F(\psi)^{(n-2)}$ el cual necesita ser almacenado en todos los pasos de tiempo del modelo computacional.

2.4. Solver de flujo compresible

2.4.1. Ecuaciones de gobierno

El flujo a resolver dentro del motor de pistones opuestos es compresible y está sujeto a grandes transferencias de energía debido a la combustión y el trabajo mecánico. El flujo es gobernado por las ecuaciones de Navier-Stokes compresibles, la ecuación de conservación de la energía y una ecuación de estado:

- Conservación de la cantidad de movimiento:

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \rho \mathbf{g} \quad (2.55)$$

- Conservación de masa:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (2.56)$$

- Conservación de energía:

$$\frac{\partial(\rho e)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho e \mathbf{u}) = -\nabla \cdot \mathbf{q} - \nabla \cdot (p \mathbf{u}) - \nabla \cdot (\boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{u}) \quad (2.57)$$

- Ecuación de estado:

$$p = \rho R T \quad (2.58)$$

donde $\boldsymbol{\tau}$ es el tensor de tensiones, \mathbf{g} es la aceleración de la gravedad, \mathbf{q} es el vector del flujo de energía y R es la constante de gas ideal. Las ecuaciones definidas previamente generan un sistema indeterminado con más incógnitas que ecuaciones. Para resolver esta indeterminación se definen relaciones constitutivas para el tensor de tensiones $\boldsymbol{\tau}$ y el flujo de calor \mathbf{q} :

- El tensor de tensiones $\boldsymbol{\tau}$ se modela por medio de la ley de viscosidad de Newton,

$$\boldsymbol{\tau} = \mu [\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u}^T)] + \frac{2}{3} \mu (\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbf{I} \quad (2.59)$$

donde μ es la viscosidad dinámica del fluido e \mathbf{I} es el tensor identidad.

- El flujo de calor \mathbf{q} se determina por medio de la ley de Fourier,

$$\mathbf{q} = -k \nabla T, \quad (2.60)$$

siendo k la conductividad térmica del medio fluido.

2.4.2. Resolución numérica de las ecuaciones de gobierno

La determinación de las incógnitas de un problema de flujo compresible se resuelve por medio de los balances de momento, masa, energía, de la ecuación de estado de los gases ideales y las relaciones constitutivas. Mediante todas estas ecuaciones se determinan las incógnitas principales del problema las cuales son la velocidad \mathbf{u} , la presión p , la energía interna e y la densidad ρ . El conjunto de cuatro incógnitas y cuatro ecuaciones es un sistema determinado fuertemente acoplado. Por otro lado, las ecuaciones presentan relaciones no lineales de las incógnitas del problema.

Para resolver el sistema definido por las ecuaciones de gobierno se propone un método iterativo. En cada iteración se discretizan las ecuaciones de balance como combinación lineal de una de las incógnitas en donde los términos no lineales y aquellos que dependen del resto de las incógnitas se asumen como constantes e iguales al valor de la iteración previa. Entonces, los balances se resuelven sucesivamente hasta reducir el error por debajo de una cierta tolerancia. En este punto el método iterativo concluye o converge.

En detalle, el acople entre las incógnitas se basa en una combinación de los métodos SIMPLE [30] y PISO [25] denominado como PIMPLE [31]. Se definen dos bucles iterativos anidados: un bucle externo, bucle SIMPLE y otro interno, bucle PISO. Ambos bucles se disponen a su vez dentro de un tercer bucle externo encargado de avanzar temporalmente. Con el fin de identificar el número de iteración dentro de los bucles SIMPLE y PISO se utilizan los supra-índices i y j respectivamente. A continuación, en el Algoritmo 1, se describe el orden en que se resuelven las ecuaciones definiendo la incógnita resuelta en cada balance.

En el bucle SIMPLE se resuelve el balance de momento. Esta ecuación posee términos que se deben aproximar como constantes para poder determinar un sistema de ecuaciones lineales en la incógnita velocidad. Por un lado, se encuentra el término convectivo que es no lineal respecto a la velocidad y por otro lado se encuentran las incógnitas presión y densidad. En este contexto, el término convectivo se linealiza adoptando el último valor disponible de la velocidad $\mathbf{u}^{(i-1)}$. De la misma manera, la presión y la densidad se computan con sus valores disponibles $p^{(i-1)}$ y $\rho^{(i-1)}$ respectivamente. Considerando estas aproximaciones el balance de momento expresado sobre una celda P_i resulta como:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{P_i} \rho^{(i-1)} \mathbf{u}^{(i)} dV + \int_{\partial P_i} \rho^{(i-1)} \mathbf{u}^{(i)} \left[\left(\mathbf{u}^{(i-1)} - \mathbf{v}_\Gamma \right) \cdot d\mathbf{S} \right] + \int_{\partial P_i} \boldsymbol{\tau}(\mu, \nabla \mathbf{u})^{(i)} \cdot d\mathbf{S} \\ = - \int_{P_i} \nabla p^{(i-1)} dV \quad \forall P_i \in \Omega \end{aligned} \quad (2.61)$$

Esta ecuación se discretiza por el método de volúmenes finitos llegando a la siguiente expresión para cada celda de la malla,

Algoritmo 1 Esquema de acople entre los balances de momento, masa y energía utilizando un *solver* basado en los métodos SIMPLE y PISO.

- Bucle Temporal
 - Actualización de la malla:
 $\mathbf{u}_b^{n-1} \rightarrow \mathbf{u}_b^n$
 - Bucle SIMPLE, iteración i :
 - Balance de momento:
 $\mathbf{u}^{i-1} \rightarrow \mathbf{u}^i$
 - Bucle PISO, iteración j :
 - ◇ Balance de masa:
 $p^{j-1} \rightarrow p^j$
 - ◇ Ecuación de estado:
 $\rho^{j-1} \rightarrow \rho^{j-1/2}$
 - ◇ Balance de momento:
 $\mathbf{u}^{j-1} \rightarrow \mathbf{u}^j$
 - ◇ Balance de energía:
 $h^{j-1} \rightarrow h^j$
 - ◇ Ecuación de estado:
 $\rho^{j-1/2} \rightarrow \rho^j$
-

$$a_P \mathbf{u}_P^i + \sum_N a_N \mathbf{u}_N^i = \mathbf{b} \quad \forall P \in \Omega \quad (2.62)$$

en donde el subíndice N representa las celdas vecinas a la celda P . En la Ec. (2.62) los coeficientes a_P , a_N son función de la densidad $\rho^{(i-1)}$ y del valor de velocidad de la iteración previa $\mathbf{u}^{(i-1)}$, y por su lado, el vector del término independiente \mathbf{b} depende, además, de la presión $p^{(i-1)}$,

$$\begin{aligned} a_P &= f(\rho^{(i-1)}, \mathbf{u}^{(i-1)}) \\ a_N &= f(\rho^{(i-1)}, \mathbf{u}^{(i-1)}) \\ \mathbf{b} &= f(\rho^{(i-1)}, \mathbf{u}^{(i-1)}, p^{(i-1)}). \end{aligned} \quad (2.63)$$

Una vez resuelto la ecuación de momento y determinado el nuevo campo de velocidades \mathbf{u}^i se ingresa al bucle interior del algoritmo o bucle PISO. En este bucle se acopla la velocidad con la presión, densidad y temperatura resolviendo los balances de masa, momento y energía. La presión se determina a partir de resolver el balance de masa,

$$\frac{d}{dt} \int_{P_i} \rho dV + \int_{\partial P_i} \rho \mathbf{u} \cdot d\mathbf{S} = 0 \quad \forall P_i \in \Omega \quad (2.64)$$

Este balance se expresa en función de la presión sustituyendo la densidad y la velocidad por expresiones que dependen de la presión. La densidad se relaciona con la presión por medio de la ecuación de estado de los gases ideales,

$$\rho = \frac{p}{RT} \quad (2.65)$$

Si se considera el último valor disponible para la temperatura $T^{(j-1)}$, la relación entre la densidad y la presión se linealiza por medio del factor de compresibilidad $\psi = 1/(RT)$,

$$\rho = \psi^{j-1} p = \frac{p}{RT^{(j-1)}} \quad (2.66)$$

Por otro lado, la relación entre la velocidad y la presión se define a partir del balance de momento. Se define una versión semidiscreta del balance de momento similar a la Ec. (2.62) separando del término \mathbf{b} el gradiente de presión,

$$a_P \mathbf{u}_P^{(j-1)} + \sum a_N \mathbf{u}_N^{(j-1)} = -\nabla p_P + \mathbf{b}^0 \quad \forall P \in \Omega \quad (2.67)$$

en donde \mathbf{b}^0 representa el término independiente del balance de momento exceptuando la contribución del gradiente de presión. Se agrupan las contribuciones de las celdas vecinas N y el término independiente \mathbf{b}^0 por medio de un nuevo término denominado $\mathbf{H}(\mathbf{u})$,

$$\mathbf{H}[\mathbf{u}^{(j-1)}] = -\sum a_N \mathbf{u}_N^{(j-1)} + \mathbf{b}^0. \quad (2.68)$$

Luego de incluir la Ec. (2.68) en (2.67) se puede expresar la velocidad en la celda P en función de la presión,

$$\mathbf{u}_P = -\frac{\nabla p}{a_P} + \frac{\mathbf{H}(\mathbf{u})}{a_P} \quad (2.69)$$

Luego se reemplaza la densidad y velocidad por sus equivalentes funciones de la presión dadas en (2.66) y (2.69) y se las incluye en el balance de masa definido en (2.64):

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{P_i} \psi^{(j-1)} p^{(j)} dV + \int_{\partial P_i} p^{(j)} \left\{ \left[\frac{\psi^{(j-1)}}{a_P} \mathbf{H}(\mathbf{u}^{(j-1)}) - \mathbf{v}_\Gamma \right] \cdot d\mathbf{S} \right\} \\ - \int_{\partial P_i} \frac{\rho^{(j-1)}}{a_P} (\nabla p^{(j)} \cdot d\mathbf{S}) = 0 \quad \forall P_i \in \Omega. \end{aligned} \quad (2.70)$$

La relación entre velocidad y presión definida en la Ec. (2.69) se debe interpolar sobre las caras de las celdas para discretizar el término convectivo de la Ec. (2.70). En el término difusivo, se utiliza un valor conocido de la densidad. Una vez resuelta la ecuación de presión se define la velocidad en las caras de la

mall a partir de la ecuación algebraica de momento (2.69):

$$\mathbf{u}_k^{(j)} = \left[\frac{\mathbf{H}(\mathbf{u})^{(j-1)}}{a_P} \right]_k - \left[\frac{\nabla p^{(j)}}{a_P} \right]_k \quad (2.71)$$

en donde el gradiente de presión del segundo término se computa por medio de un *stencil* compacto usando valores de celdas adyacentes a la cara [32]. Proyectando los valores de velocidad de la Ec. (2.71) con el normal de cada cara se obtienen los flujos necesarios para resolver la discretización de los términos convectivos de las ecuaciones de transporte,

$$\phi_k = \mathbf{u}_k \cdot \mathbf{S}_k. \quad (2.72)$$

De forma análoga a la Ec. (2.71) se definen los valores de velocidad en celdas,

$$\mathbf{u}_p^{(j)} = \frac{\mathbf{H}(\mathbf{u})^{(j-1)}}{a_P} - \frac{\nabla p^{(j)}}{a_P}. \quad (2.73)$$

Una vez actualizada la velocidad se define la energía cinética,

$$E_c^{(j)} = \frac{\mathbf{u}^{(j)} \cdot \mathbf{u}^{(j)}}{2}. \quad (2.74)$$

Posteriormente se actualiza el valor de la densidad previo a resolver el balance de energía,

$$\rho^{(j-1/2)} = \psi^{(j-1)} p^{(j)}. \quad (2.75)$$

La ecuación de energía se plantea en términos de la entalpía h . El balance resuelto es el siguiente,

$$\begin{aligned} & \frac{d}{dt} \int \rho (h + E_c) dV + \int_{\partial P_i} (h + E_c) \left[(\mathbf{u}^{(j)} - \mathbf{v}_\Gamma) \cdot \mathbf{ds} \right] - \int_{\partial P_i} \alpha \nabla h^{(j)} \cdot \mathbf{ds} \\ & = \\ & \frac{d}{dt} \int_{P_i} p dV - \int_{\partial P_i} p \mathbf{v}_\Gamma^n \cdot \mathbf{ds} \quad \forall P \in \Omega. \end{aligned} \quad (2.76)$$

Una vez actualizada la entalpía se calcula el nuevo valor de temperatura $T^{(j)}$ y en consecuencia se actualizan los valores de la compresibilidad $\psi^{(j)}$ y de la densidad $\rho^{(j)}$,

$$\begin{aligned} T^{(j)} &= \frac{h^{(j)}}{C_p}, \\ \psi^{(j)} &= \frac{1}{RT^{(j)}}, \\ \rho^{(j)} &= \psi^{(j)} p^{(j)}. \end{aligned} \quad (2.77)$$

Capítulo 3

Acople numérico por medio de interfaces no conformes

3.1. Conceptos preliminares

Gran parte de las máquinas industriales presentan componentes con movimiento relativo. Cuando se plantea un problema de mecánica de fluidos computacional sobre este tipo de máquinas se divide el dominio del problema en múltiples subdominios los cuales experimentan una variación temporal de su tamaño, forma o posición. Algunos ejemplos de maquinarias con partes móviles se muestran en la Fig. 3.1 que presenta un motor de combustión interna de dos tiempos y un ventilador centrífugo.

Los subdominios en los que se divide un problema con partes móviles se relacionan entre sí a través

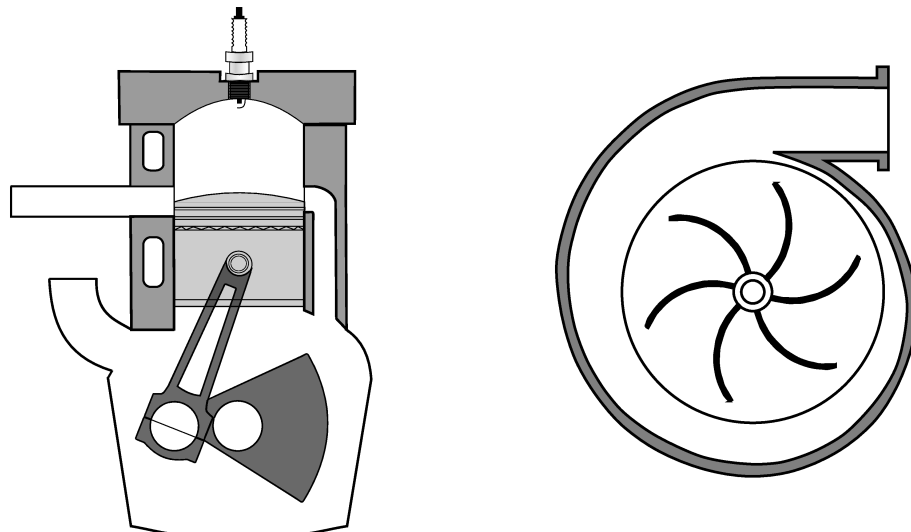


Figura 3.1: Dos ejemplos de máquinas industriales con componentes móviles. Izquierda: motor de combustión interna de dos tiempos; derecha: ventilador centrífugo

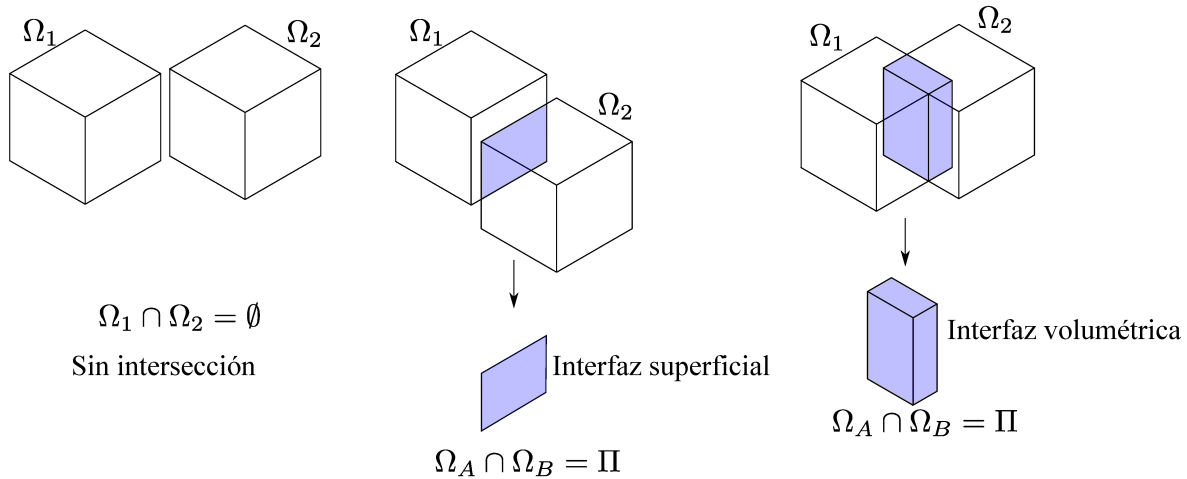


Figura 3.2: Tres tipos de acople entre subdominios: (a) sin intersección; (b) intersección superficial e (c) intersección volumétrica.

de una interfaz. Esta se define a continuación: dados dos subdominios Ω_1 y Ω_2 , se define a la interfaz Π como la región del espacio definida por la intersección $\Omega_1 \cap \Omega_2$. En base a esta definición se diferencian tres casos los cuales se detallan en la Fig. 3.2. En la Fig. 3.2 (a) se muestran dos subdominios que están separados sin interferir el uno con el otro por lo que no poseen una interfaz en común. En este caso no existe relación entre los subdominios por lo que la resolución del problema numérico sobre ellos se realiza de forma independiente. También se considera que dos dominios no poseen una interfaz en común cuando estos comparten un punto o una arista. En cambio, en la Fig. 3.2 (b), los subdominios interfieren espacialmente definiendo una interfaz superficial y finalmente, en la Fig. 3.2 (c), se muestra un par de subdominios que interfieren en una región tridimensional generando de esta forma una interfaz volumétrica. Cuando las interfaces del caso dado en la Fig. 3.2 (b) tienen movimiento relativo, estas dan lugar a problemas denominados de forma general como interfaces deslizantes (*sliding interfaces*). En estos problemas los subdominios se malla de forma independiente y se relacionan entre ellos por medio de una malla de superficie. La forma de trabajar y resolver la interacción entre las mallas de superficie da lugar a técnicas numéricas que son objeto de estudio de esta tesis. Por otro lado, el acople de subdominios por medio de una interfaz volumétrica requiere de resolver la interacción entre dos porciones de la malla de volumen. A este tipo técnicas se las denomina como el método de mallas solapadas o Chimera (*overset meshes*). Si bien, este tipo de técnicas son en general más complejas en lo que respecta a su implementación, estas presentan mayor libertad para definir geoméricamente la frontera de los subdominios del problema. De todos modos, este tipo de técnicas no serán abordadas en esta tesis.

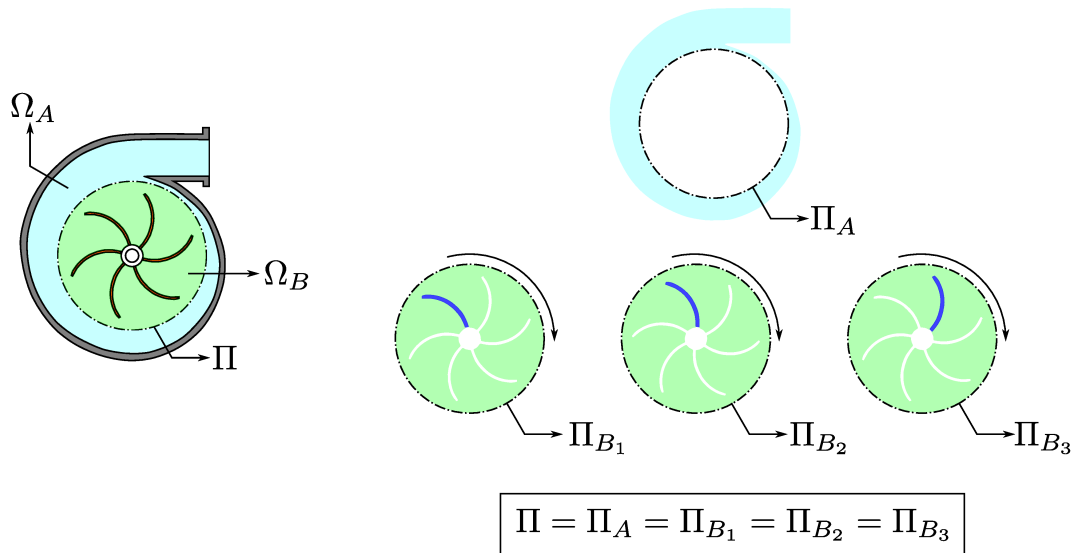


Figura 3.3: Problema del tipo rotor-estator en donde se muestra que las interfaces son completamente acopladas para cualquier posición del rotor.

3.1.1. Interfaces parcialmente y totalmente acopladas

La región superficial que determina la interfaz Π se define conceptualmente como la región compartida por un par de subdominios. Sin embargo, esta interfaz se discretiza independientemente en cada dominio definiendo las interfaces Π_A y Π_B para los subdominios Ω_A y Ω_B respectivamente. En el caso de que las interfaces Π_A y Π_B cubran la misma región del espacio se dice que son interfaces totalmente acopladas. En esta situación los bordes de los subdominios Π_A y Π_B son iguales a la interfaz conceptual Π . Dependiendo del problema, la interfaz Π puede ser constante a lo largo del tiempo. Un ejemplo de esta situación se presenta en la Fig. 3.3 que esquematiza un problema del tipo rotor-estator. Aquí, el subdominio del rotor es acoplado con el estator mediante una interfaz Π la cual es constante en el tiempo ya que independientemente de la posición del rotor, la interfaz es siempre circular y completamente acoplada con la interfaz del estator. En otras palabras, las interfaces discretas Π_A y Π_B son equivalentes en todo momento a la interfaz conceptual Π . Cuando se cumple la condición definida previamente, entonces las interfaces Π_A y Π_B se denominan interfaces completamente acopladas.

En otro tipo de problemas, la interfaz conceptual Π es variable a lo largo del tiempo. Esta puede variar su extensión o desaparecer como consecuencia del movimiento relativo entre las partes. Esta última situación sucede en un motor de combustión interna de dos tiempos en donde el cilindro modifica su volumen y a razón de esto se cubren y destapan las entradas y salidas de aire tal como se muestra en la Fig. 3.4. En la gráfica se presentan diferentes posiciones relativas del pistón dentro del cilindro detallando para cada caso las interfaces Π_A y Π_B de los subdominios del problema. En los tres estados, las interfaces Π_A y Π_B se solapan parcialmente para determinar la interfaz resultante Π . Debido a esta razón se las denomi-

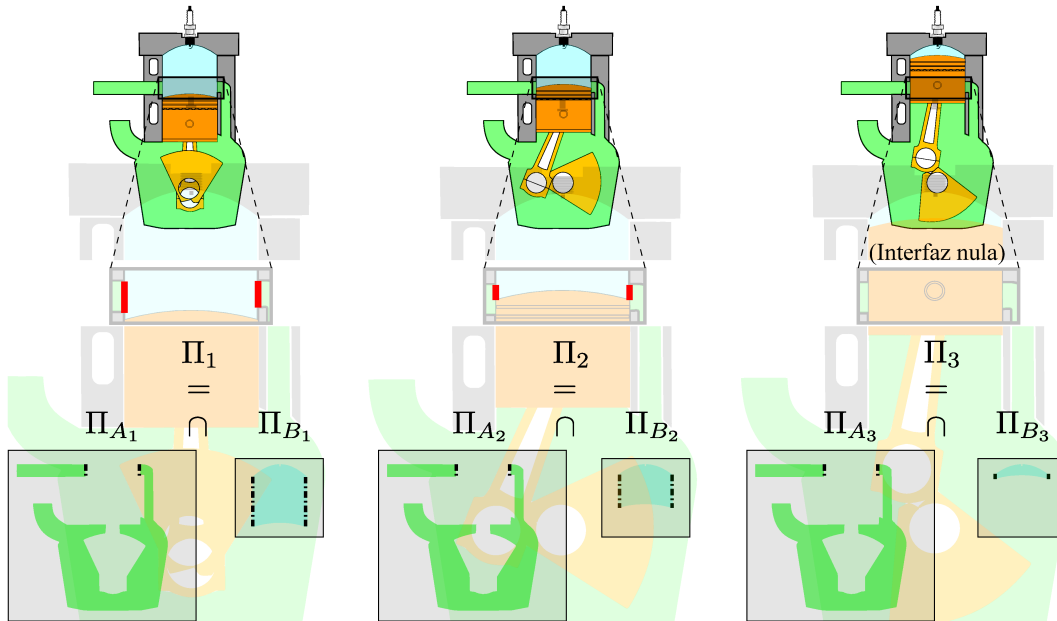


Figura 3.4: Interfaces variables en el tiempo en un motor de dos tiempos.

na como interfaces parcialmente acopladas. En la Fig. 3.4 se aprecian las tres situaciones posibles, a la izquierda, el caso donde la intersección coincide totalmente con una de las interfaces, en este caso Π_{A_1} , al medio, el caso donde esa intersección no cubre totalmente a ninguna de las dos interfaces enfrentadas sino solo parcialmente y finalmente a la derecha el caso donde esa intersección es vacía.

3.1.2. Interfaces conformes o no conformes

La discretización por volúmenes finitos de los subdominios Ω_A y Ω_B genera mallas de superficie τ_A y τ_B asociadas a las interfaces Π_A y Π_B respectivamente. En este trabajo, la interfaz τ_A se denomina como la interfaz “fuente” la cual esta compuesta por caras K_A^i . Por otro lado, la interfaz τ_B se la denomina como la interfaz “destino” siendo compuesta por caras K_B^j . En el caso de que las mallas de superficie τ_A y τ_B sean idénticas, a estas se las denomina como interfaces conformes. En esta situación, el número de caras de las mallas τ_A y τ_B son iguales y además, para cada cara $K_A^i \in \tau_A$ existe una y solo una cara idéntica $K_B^j \in \tau_B$.

Por otro lado, las mallas τ_A y τ_B se denominan como interfaces no conformes cuando sus discretizaciones son diferentes. En estos casos, cada cara $K_A^i \in \tau_A$ está en intersección geométrica con una o varias caras $K_B^j \in \tau_B$. Lo mismo sucede para la interfaz τ_B , para cada una de sus caras K_B^j se encuentra en oposición con un grupo determinado de caras K_A^i . Este esquema de conectividades entre ambas interfaces se define en un par de listas denominadas χ_A y χ_B que contienen para cada una de las caras de las interfaces τ_A y τ_B respectivamente el grupo de caras de la interfaz opuesta con las cuales intersecciona. La

descripción formal de estas listas se presenta a continuación,

$$\begin{aligned}\chi_{AB}(K_A^i) &= \left\{ K_B^j \in \tau_B : A(K_A^i \cap K_B^j) > 0 \right\} \quad \forall K_A^i \in \tau_A, \\ \chi_{BA}(K_B^j) &= \left\{ K_A^i \in \tau_A : A(K_B^j \cap K_A^i) > 0 \right\} \quad \forall K_B^j \in \tau_B,\end{aligned}\tag{3.1}$$

3.2. Acople numérico de interfaces con el método de los volúmenes finitos

El desafío principal de un método de interfaz es realizar un acople numérico entre los subdominios sin introducir errores en comparación con un problema análogo compuesto por solamente una región. En este contexto, algunos métodos se basan en eliminar las interfaces no conformes que unen los subdominios de forma tal de convertir estos en una única región. Aquí, los errores numéricos en la interfaz desaparecen. Sin embargo se necesita pegar o unir las interfaces y, en consecuencia, esta estrategia es costosa desde el punto de vista computacional. Este inconveniente es más importante en problemas de malla dinámica ya que la unión de las interfaces se debe realizar en todos los pasos de tiempo. Un ejemplo de este tipo de técnicas se denomina como “interfaces deslizantes” o *Sliding Interfaces* [10, 21, 11]. En este método se realizan cambios topológicos en la malla para unir las interfaces en un único conjunto de caras que pasan a ser caras internas de la malla. De esta manera se genera, al momento de resolver el problema numérico, una malla compuesta por una única región. Esta metodología es usualmente utilizada para resolver problemas de motores de combustión interna. Otra técnica similar se denomina como *Buffer layer method* la cual se describe en el trabajo de Qin *et al.* [33] y ha sido posteriormente mejorada por Wang *et al.* definiendo el método *Zipper Layer* [34]. Estos métodos definen bloques de mallas que se unen de forma automática formando una única región, pero con el limitante que los bloques deben ser discretizados con mallas estructuradas.

Por otro lado, una gran cantidad de técnicas introducen diferentes estrategias numéricas para resolver la comunicación física de las interfaces no conformes evitando modificar la estructura de la malla. Debido a esto, estas técnicas son computacionalmente más eficientes que las mencionadas previamente pero como contrapartida, se generan errores numéricos. Una propiedad importante y necesaria a exigir en estos métodos es la conservación de los flujos o conservatividad. Los problemas de conservación en la interfaz provocan pérdida de exactitud y además, generan problemas de estabilidad numérica, principalmente cuando se presentan discontinuidades en el entorno de las interfaces [35]. Mas aún, en algunos problemas, como aquellos que determinan el tiempo de residencia de ciertas partículas, importantes en procesos químicos, o el seguimiento de especies en tanques de agitación requieren de una estricta conservación de flujos para conseguir resultados aceptables. En el caso contrario, los problemas de conservación invalidan los resultados y pueden motivar situaciones de inestabilidad.

La propiedad de conservación de flujos en problemas con interfaces no conformes fue originalmente

estudiada por Berger [36] utilizando un esquema conservativo a partir de diferencias finitas bidimensionales. Dentro de las estrategias conservativas, una de las más citadas es la técnica *patched-grid* la cual fue presentada inicialmente por Rai quien introduce un abordaje conservativo sobre interfaces estructuradas bidimensionales [37]. Esta técnica se extendió en aplicaciones del tipo rotor-estator en un trabajo subsiguiente [38]. Lerut y Wu propusieron un método basado sobre *patched-grid* el cual asegura estabilidad y conservatividad en simulaciones con múltiples dominios utilizando un *solver* de Euler implícito [39]. Un trabajo más reciente establece el uso de interfaces del tipo *patched-grid* en combinación con un método de remapeo lineal de alto orden utilizando un esquema WENO [40]. Si bien, la estrategia *patched-grid* es adecuada para resolver problemas con múltiples dominios discretizados con mallas estructuradas, esta última condición es una limitante para resolver problemas industriales los cuales presentan una complejidad geométrica elevada requiriendo de mallas no estructuradas. Inspirado en esta limitación, Mathur [41] propuso un estrategia conservativa más general. Su trabajo se basa en la sustitución de las interfaces no conformes por un único conjunto de caras que actúan como caras internas. Sin embargo, estas caras carecen de una representación precisa del centroide siendo que éste es una característica geométrica importante para el cómputo de los flujos. Otra metodología conservativa se presenta en el trabajo de Loh *et. al* [42] donde se intercambian flujos entre los subdominios por medio de un esquema de convección del tipo *upwind*. Recientemente, en el trabajo de Ramírez *et al.* [43] se propone un esquema de interfaz de alto orden utilizando mínimos cuadrados. Sin embargo, la versión conservativa de este método es computacionalmente costosa debido a la necesidad de computar intersecciones geométricas entre las caras. Para solucionar este problema, los autores diseñaron una técnica de interfaces deslizantes usando celdas *halo* lo cual evita el cálculo de intersecciones pero incurriendo, no obstante, en problemas de conservación.

De forma contraria, los métodos no conservativos son en general más simples de implementar debido a la practicidad de sus interpolaciones. Es común encontrar combinaciones lineales para reconstruir los flujos en las caras sin imponer ninguna restricción que atienda a la conservación de los flujos. Dentro de estos métodos se encuentra una versión simple y efectiva para acoplar interfaces no conformes la cual se presenta en el trabajo de McNaughton *et al.* [44]. Aquí se utilizan nodos *halo* o *ghost* en las interfaces los cuales definen condiciones de borde independientes para cada uno de los subdominios que comparten la interfaz. Este trabajo emplea una interpolación no conservativa enfocándose en el criterio de eficiencia computacional. Otros grupo de trabajos utilizan pesos en sus interpolaciones basados en las áreas de intersección de las caras de interfaz. Un ejemplo de estas técnicas se presenta en el trabajo de Beaudoin y Jasak [45], técnica denominada como Interfaz de Grilla General (GGI). Ésta fue especialmente concebida para aplicaciones de turbomaquinaria. Otro método similar, está implementado en OpenFOAM(R)[8] y se denomina como Interfaz de Malla Arbitraria (AMI). Dentro de este grupo también se puede citar el

trabajo de Steijil and Barakos [46] el cual está diseñado para resolver la aerodinámica en helicópteros.

En general se concluye que los métodos conservativos son simples para su desarrollo e implementación pero utilizando mallas estructuradas. Aquellos métodos conservativos diseñados para mallas arbitrarias tienen una reducida eficiencia computacional y una elevada complejidad a la hora de implementar el método en un código computacional. Por otro lado, existen métodos conservativos con una concepción simple, pero estos son de una precisión reducida. En este contexto, la mayoría de las aplicaciones de ingeniería que utilizan configuraciones con múltiples dominios usan estrategias de acople no conservativas, enfocándose en un compromiso entre simplicidad y eficiencia. No obstante, tal como se describió previamente, en algunos problemas la conservación de los flujos es una propiedad imprescindible.

Dentro de este marco, este capítulo desarrolla los conceptos teóricos básicos relacionados a la conservatividad en un problema de volúmenes finitos con interfaces no conformes. Se expone un criterio matemático general que relaciona los coeficientes de ensamble de las caras de interfaz. Cumpliendo el criterio desarrollado se asegura un acople numérico conservativo y monótono entre los subdominios del problema con interfaces. Posteriormente se aplican estas relaciones conservativas por medio de una nueva técnica numérica basada en proyección de coeficientes la cual se valida resolviendo de un par de ejemplos numéricos.

3.3. Conservación local y global e interpolaciones acotadas en interfaces no conformes

Para lograr conservación global en problemas con interfaces no conformes se debe conservar la propiedad global o propiedad telescópica del método de volúmenes finitos definida en la Ec. (2.37). Debido a la no conformidad en las interfaces, los flujos sobre sus caras no se corresponden en las caras de su interfaz opuesta. A raíz de esto, la propiedad telescópica no se cumple de forma natural para todo subdominio que contenga por lo menos una celda adyacente a las interfaces. Esto se explica en la Fig. 3.5 la cual esquematiza un dominio subdividido en dos subdominios, Ω_A y Ω_B . Estos son mallados de forma independiente generando las interfaces no conformes τ_A y τ_B . A su vez, se eligen sobre este dominio tres subdominios cualesquiera según se muestra en el lado izquierdo de la Fig. 3.5. Los subdominios Ω_1 y Ω_3 contienen caras ajenas a las interfaces. En estos subdominios se satisface la propiedad telescópica de forma natural de acuerdo a las propiedades intrínsecas al método de los volúmenes finitos. Contrariamente, la propiedad telescópica no es aplicable en el subdominio Ω_2 ya que posee caras sobre las interfaces que no están solapadas completamente por caras de su interfaz opuesta. Entonces, Ω_2 posee un sector de la interfaz que no se encuentra en oposición por su correspondiente interfaz opuesta. Entonces cualquier flujo que egrese o ingrese por este sector no será correspondido por la interfaz restante

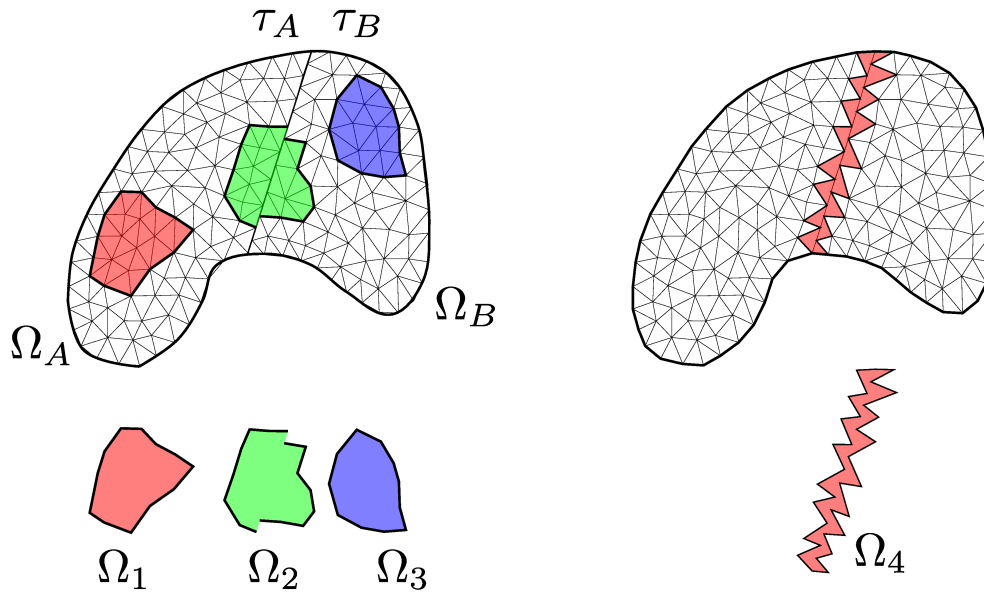


Figura 3.5: Subdominios elegidos de forma arbitraria dentro de un dominio con interfaces no conformes. El subdominio Ω_2 está conformado por caras pertenecientes a ambos lados de la interfaz.

violando la propiedad telescópica. Por lo tanto, para analizar la propiedad telescópica sobre interfaces no conformes se elige un subdominio que comprende la totalidad de las celdas adyacentes a la interfaz. En correspondencia a esto se define el subdominio Ω_4 en la Fig. 3.5 (lado derecho). Si se satisface la propiedad telescópica para este subdominio en particular significa que las interfaces son conservativas en sentido global o globalmente conservativas.

A diferencia de lo planteado en el capítulo anterior, las caras internas del subdominio Ω_4 pertenecen a interfaces no conformes. Debido a esto, no se puede plantear una correspondencia uno-a-uno entre las caras internas de este subdominio. Para resolver esta dificultad se plantean interpolaciones numéricas a través de las interfaces según se explica a continuación.

Nótese que lo desarrollado en esta sección está concebido para interfaces totalmente acopladas. El caso particular en donde las regiones a acoplar tienen un acople parcial (interfaces parcialmente acopladas) se abordará en la Sección 4.3.

3.3.1. Interpolación de flujos en la interfaz

En el capítulo anterior se definieron como flujos parciales a aquella porción del flujo en una cara que es función exclusiva de un determinado grado de libertad del problema numérico. En consecuencia, una cara interna posee dos flujos parciales respectivos a sus dos celdas adyacentes. En cambio, una cara de interfaz posee una única celda adyacente pero, no obstante, la cara en cuestión interfiere geoméricamente con un grupo determinado de caras de la interfaz opuesta relacionándose numéricamente con sus celdas

adyacentes respectivas. El equivalente a las ecuaciones (2.29) y (2.30) para las caras de la interfaz τ_A es,

$$\begin{aligned}
 \int_{K_A^i} \Psi \cdot d\mathbf{A} &= \phi_A^i \\
 &= \phi_{AA}^i + \phi_{AB}^i \\
 &= \phi_{AA}^i + \sum_{K_B^j \in \chi_{AB}^i} \phi_{AB}^{i,j} \\
 &= \alpha_{AA}^i \psi_A^i + \alpha_{AB}^i \sum_{K_B^j \in \chi_{AB}^i} w_B^{i,j} \psi_B^j \quad \forall K_A^i \in \tau_A.
 \end{aligned} \tag{3.2}$$

De la misma forma para la interfaz τ_B se tiene,

$$\begin{aligned}
 \int_{K_B^j} \Psi \cdot d\mathbf{A} &= \phi_B^j \\
 &= \phi_{BA}^j + \phi_{BB}^j \\
 &= \sum_{K_A^i \in \chi_{BA}^j} \phi_{BA}^{j,i} + \phi_{BB}^j \\
 &= \alpha_{BA}^j \sum_{K_A^i \in \chi_{BA}^j} w_A^{j,i} \psi_A^i + \alpha_{BB}^j \psi_B^j. \quad \forall K_B^j \in \tau_B.
 \end{aligned} \tag{3.3}$$

En las Ecs. (3.2) y (3.3), $w_B^{i,j}$ y $w_A^{j,i}$ son factores de interpolación los cuales se describirán posteriormente. Los flujos parciales provenientes de las interfaces opuestas ϕ_{AB}^i y ϕ_{BA}^j son resultado de la sumatoria de los denominados flujos elementales $\phi_{AB}^{i,j}$ y $\phi_{BA}^{j,i}$ respectivamente. Estos flujos elementales se corresponden con los grados de libertad de las interfaces opuestas. En resumen, el flujo en una cara de interfaz esta compuesto por el flujo parcial relacionado a su celda y un flujo parcial correspondiente a la interfaz opuesta tal como se esquematiza en la Fig. 3.6. En esta figura se detalla como el flujo parcial asociado a la interfaz opuesta se subdivide a su vez en los denominados flujos elementales asociados las celdas adyacentes del lado opuesto.

Según se observa en las Ecs. (3.2) y (3.3), la sumatoria de los flujos parciales provenientes de la interfaz

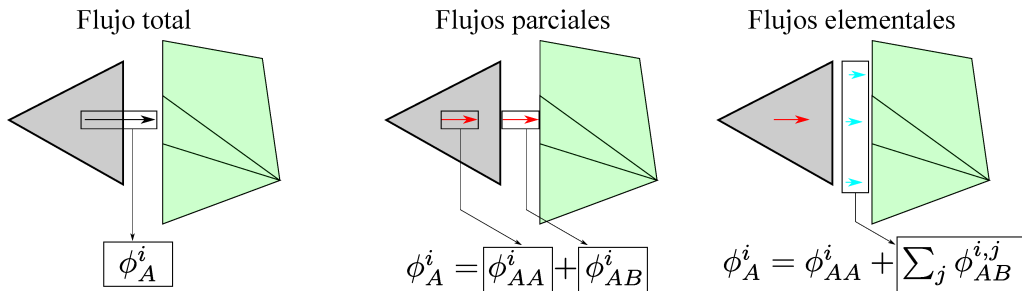


Figura 3.6: Explicación de las subdivisiones del flujo saliente en una cara de interfaz.

opuesta se expresa como el producto entre un coeficiente asociado a la interfaz opuesta (α_{AB}^i y α_{BA}^j) y un promedio pesado de los grados de libertad por medio de los factores w_A y w_B . Este promedio pesado se puede considerar como un valor promedio equivalente,

$$\begin{aligned}\overline{\psi}_B^i &= \sum_{K_B^j \in \chi_{AB}^i} w_B^{i,j} \psi_B^j \quad \forall K_A^i \in \tau_A \\ \overline{\psi}_A^j &= \sum_{K_A^i \in \chi_{BA}^j} w_A^{j,i} \psi_A^i \quad \forall K_B^j \in \tau_B.\end{aligned}\tag{3.4}$$

Esta última interpolación convierte la multiplicidad de valores provenientes de la interfaz opuesta en un único valor. De esta forma se resuelve la no conformidad de las interfaces generando un acoplamiento numérico uno-a-uno. La Ec. (3.4) se puede definir de forma matricial. Para esto se agrupan los grados de libertad de cada interfaz en vectores $\Psi_A \in \mathcal{R}^{m \times 1}$ y $\Psi_B \in \mathcal{R}^{n \times 1}$ para las interfaces τ_A y τ_B respectivamente en donde la componente i (j) de estos vectores es el valor de ψ en las celdas adyacentes a las caras K_A^i y K_B^j respectivamente. De la misma forma se definen los vectores $\overline{\Psi}_A \in \mathcal{R}^{n \times 1}$ y $\overline{\Psi}_B \in \mathcal{R}^{m \times 1}$ que contienen los valores interpolados $\overline{\psi}_A^j$ y $\overline{\psi}_B^i$ respectivamente. Finalmente, los pesos de interpolación $w_B^{i,j}$ y $w_A^{j,i}$ se agrupan en las matrices $w_B \in \mathcal{R}^{m \times n}$ y $w_A \in \mathcal{R}^{n \times m}$ respectivamente. Con estas nuevas definiciones, la Ec. (3.4) se reescribe como una igualdad vectorial,

$$\begin{aligned}\overline{\Psi}_B &= w_B \cdot \Psi_B \\ \overline{\Psi}_A &= w_A \cdot \Psi_A,\end{aligned}\tag{3.5}$$

en donde la matriz w_B es la matriz de la transformación lineal $T_{BA} : \mathcal{R}^n \rightarrow \mathcal{R}^m$ que define como los grados de libertad adyacentes a la interfaz τ_B se proyectan sobre τ_A . Análogamente, la matriz w_A es la matriz de la transformación lineal $T_{AB} : \mathcal{R}^m \rightarrow \mathcal{R}^n$ que define como los grados de libertad adyacentes a la interfaz τ_A se proyectan sobre τ_B .

De la misma forma, se expresan como igualdades vectoriales las expresiones planteadas en las Ecs. (3.2) y (3.3),

$$\begin{aligned}\Phi_A &= \mathbf{A}_{AA} \cdot \Psi_A + \mathbf{A}_{AB} \cdot w_B \cdot \Psi_B \\ \Phi_B &= \mathbf{A}_{BA} \cdot w_A \cdot \Psi_A + \mathbf{A}_{BB} \cdot \Psi_B,\end{aligned}\tag{3.6}$$

en donde Φ_A y Φ_B son los vectores que contienen los flujos ϕ_A^i y ϕ_B^j respectivamente y $\mathbf{A}_{AA} \in \mathcal{R}^{m \times m}$, $\mathbf{A}_{AB} \in \mathcal{R}^{m \times m}$, $\mathbf{A}_{BA} \in \mathcal{R}^{n \times n}$ y $\mathbf{A}_{BB} \in \mathcal{R}^{n \times n}$ son matrices diagonales que incorporan los coeficientes α de las ecuaciones (3.2) y (3.3). La propiedad de conservación global se cumple si la sumatoria de los

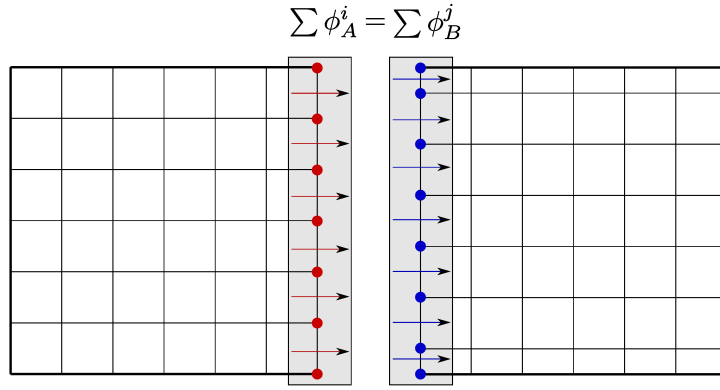


Figura 3.7: Esquema gráfico presentando el concepto de conservación global en interfaces no conformes.

flujos de las interfaces es nula lo que equivale a la siguiente expresión

$$\mathbf{1}^{1 \times m} \cdot \Phi_A + \mathbf{1}^{1 \times n} \cdot \Phi_B = 0. \quad (3.7)$$

El concepto de conservación global se explica de forma gráfica en la Fig. 3.7 en donde se plantea la equivalencia entre los flujos de un par de interfaces no conformes.

Introduciendo (3.6) en (3.7) y agrupando términos se llega a,

$$(\mathbf{1}^{1 \times m} \cdot \mathbf{A}_{AA} + \mathbf{1}^{1 \times n} \cdot \mathbf{A}_{BA} \cdot \mathbf{w}_A) \cdot \Psi_A + (\mathbf{1}^{1 \times m} \cdot \mathbf{A}_{AB} \cdot \mathbf{w}_B + \mathbf{1}^{1 \times n} \cdot \mathbf{A}_{BB}) \cdot \Psi_B = 0. \quad (3.8)$$

La conservación global se debe cumplir para cualquier valor de los grados de libertad Ψ_A y Ψ_B . Esto implica que los términos entre paréntesis deben ser nulos,

$$\begin{aligned} \mathbf{1}^{1 \times m} \cdot \mathbf{A}_{AA} + \mathbf{1}^{1 \times n} \cdot \mathbf{A}_{BA} \cdot \mathbf{w}_A &= \mathbf{0}^{1 \times m} \\ \mathbf{1}^{1 \times m} \cdot \mathbf{A}_{AB} \cdot \mathbf{w}_B + \mathbf{1}^{1 \times n} \cdot \mathbf{A}_{BB} &= \mathbf{0}^{1 \times n}. \end{aligned} \quad (3.9)$$

En consecuencia se llega a la siguiente igualdad vectorial que garantiza la conservación global en una interfaz no conforme,

$$\begin{aligned} \mathbf{1}^{1 \times m} \cdot \mathbf{A}_{AA} &= -\mathbf{1}^{1 \times n} \mathbf{A}_{BA} \cdot \mathbf{w}_A \\ \mathbf{1}^{1 \times m} \cdot \mathbf{A}_{AB} \cdot \mathbf{w}_B &= -\mathbf{1}^{1 \times n} \cdot \mathbf{A}_{BB}. \end{aligned} \quad (3.10)$$

Esta igualdad es análoga a lo expresado en la Ec. (2.40). En este caso en particular, la igualdad vectorial

se puede expresar como una equivalencia entre los coeficientes de las matrices de forma que,

$$\begin{aligned}\alpha_{AA}^i &= - \sum_j \alpha_{BA}^j w_A^{j,i} \quad \forall i \\ \alpha_{BB}^j &= - \sum_i \alpha_{AB}^i w_B^{i,j} \quad \forall j.\end{aligned}\tag{3.11}$$

De la ecuación anterior se observa que la sumatoria de coeficientes ensamblados por cada una de las caras de la interfaz dentro de una misma columna de la matriz del sistema de ecuaciones es nula. Si se multiplican ambos miembros de la Ec. (3.11) respectivamente por ψ_A^i y ψ_B^j se tiene,

$$\begin{aligned}\alpha_{AA}^i \psi_A^i &= - \sum_j \left(\alpha_{BA}^j w_A^{j,i} \psi_A^i \right) \quad \forall K_A^i \in \tau_A \\ \alpha_{BB}^j \psi_B^j &= - \sum_i \left(\alpha_{AB}^i w_B^{i,j} \psi_B^j \right) \quad \forall K_B^j \in \tau_B.\end{aligned}\tag{3.12}$$

Los términos entre paréntesis son los flujos elementales $\phi_{BA}^{j,i}$ y $\phi_{AB}^{i,j}$ para las interfaces τ_B y τ_A respectivamente, según se esquematizó en la Fig. 3.6. Reemplazando estas definiciones en (3.12) se llega a la siguiente relación:

$$\begin{aligned}\phi_{AA}^i &= - \sum_j \phi_{BA}^{j,i} \quad \forall K_A^i \in \tau_A \\ \phi_{BB}^j &= - \sum_i \phi_{AB}^{i,j} \quad \forall K_B^j \in \tau_B.\end{aligned}\tag{3.13}$$

Esta última igualdad equivale a que cada flujo parcial correspondiente a una determinada interfaz se distribuye completamente sobre las caras de su interfaz opuesta por medio de los flujos elementales. A esta propiedad de los flujos parciales se la denomina conservación local del método de interfaz. Un esquema gráfico para este concepto se presenta en la Fig. 3.8. En la primer subfigura se esquematiza como los flujos parciales ϕ_{AA}^i se distribuyen sobre la interfaz τ_B por medio de los flujos elementales $\phi_{BA}^{j,i}$. De la misma forma, en la segunda subfigura se aprecia que los flujos parciales ϕ_{BB}^j se distribuyen sobre la interfaz τ_A por medio de los flujos elementales $\phi_{AB}^{i,j}$.

A partir de este desarrollo se concluye lo siguiente: basado en un esquema de conectividades local dado por las expresiones (3.1), se consigue conservación global de los flujos en las interfaces para cualquier valor de los grados de libertad si y solo si se satisface conservación local de los flujos según la Ec. (3.13).

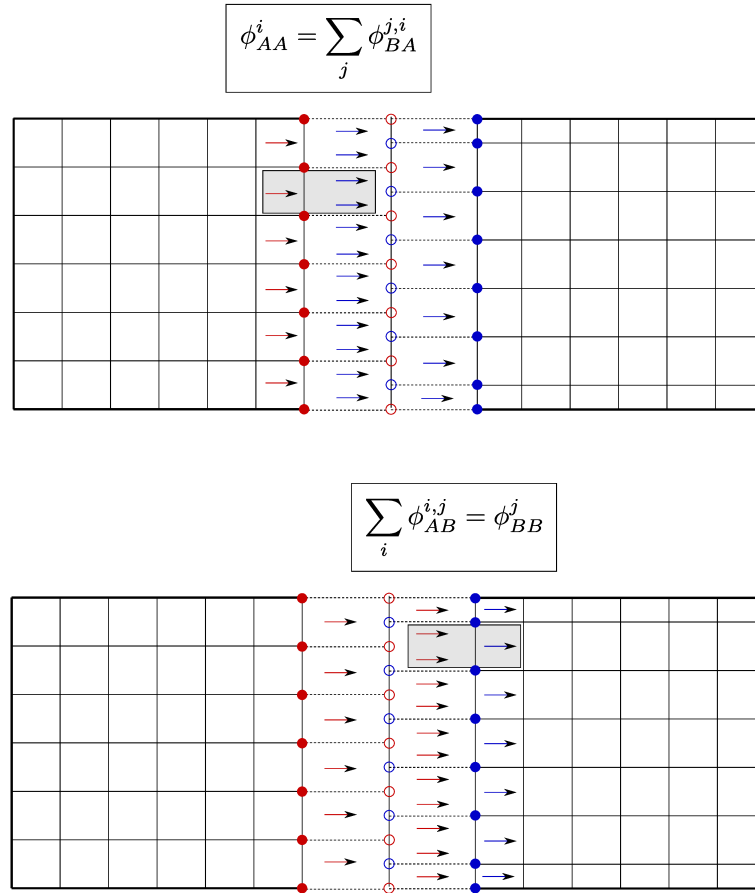


Figura 3.8: Esquema gráfico presentando el concepto de conservación de flujos elementales en interfaces no conformes.

3.3.2. Interpolación acotada

Las interpolaciones definidas en la Ec. (3.4) son acotadas si $\overline{\psi_A^j}$ and $\overline{\psi_B^i}$ se encuentran entre los valores mínimos y máximos respectivos a los grados de libertad usados en la interpolación:

$$\begin{aligned} \min \left\{ \psi_B^j : K_B^j \in \chi_{AB}(K_A^i) \right\} &\leq \overline{\psi_B^i} \leq \max \left\{ \psi_B^j : K_B^j \in \chi_{AB}(K_A^i) \right\} \quad \forall K_A^i \in \tau_A \\ \min \left\{ \psi_A^i : K_A^i \in \chi_{BA}(K_B^j) \right\} &\leq \overline{\psi_A^j} \leq \max \left\{ \psi_A^i : K_A^i \in \chi_{BA}(K_B^j) \right\} \quad \forall K_B^j \in \tau_B. \end{aligned} \quad (3.14)$$

Una condición suficiente para satisfacer el requerimiento de interpolación acotada es que la sumatoria

de los pesos de interpolación sumen la unidad siendo estos números positivos:

$$\begin{aligned}
\sum_{K_B^j \in \chi_{AB}^i} w_B^{i,j} &= 1 \quad \forall K_A^i \in \tau_A \\
\sum_{K_A^i \in \chi_{BA}^j} w_A^{j,i} &= 1 \quad \forall K_B^j \in \tau_B \\
w_B^{i,j} &\geq 0 \quad \forall i, j \\
w_A^{i,j} &\geq 0 \quad \forall i, j.
\end{aligned} \tag{3.15}$$

De forma matricial, este último requerimiento se puede expresar como,

$$\begin{aligned}
\mathbf{1}^m \cdot \mathbf{w}_A^T &= \mathbf{1}^n \\
\mathbf{1}^n \cdot \mathbf{w}_B^T &= \mathbf{1}^m \\
\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{w}_A \cdot \mathbf{e}_j &\geq 0 \quad \forall i \quad \forall j \\
\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{w}_B \cdot \mathbf{e}_j &\geq 0 \quad \forall i \quad \forall j.
\end{aligned} \tag{3.16}$$

Estas propiedades de los pesos de interpolación implican que los flujos elementales están acotados por los flujos parciales correspondientes de la interfaz opuesta, es decir:

$$\begin{aligned}
0 &\leq \phi_{BA}^{j,i} \leq \phi_{AA}^i \\
0 &\leq \phi_{AB}^{i,j} \leq \phi_{BB}^j
\end{aligned} \tag{3.17}$$

3.3.3. Expresiones generales para el acople numérico en interfaces

A partir del desarrollo realizado en los párrafos precedentes se llega a un conjunto de expresiones que son condiciones necesarias y suficientes para que una técnica de acople numérico entre interfaces sea conservativa local y acotada:

Lema 1. *Dado el par de interfaces τ_A y τ_B con m y n caras respectivamente, con sus matrices de coeficientes $\mathbf{A}_{AA} \in \mathcal{R}^{m \times m}$, $\mathbf{A}_{AB} \in \mathcal{R}^{m \times m}$, $\mathbf{A}_{BA} \in \mathcal{R}^{n \times n}$ y $\mathbf{A}_{BB} \in \mathcal{R}^{n \times n}$ y el par de matrices de pesos de interpolación $\mathbf{w}_A \in \mathcal{R}^{n \times m}$ y $\mathbf{w}_B \in \mathcal{R}^{m \times n}$, la definición de los flujos de interfaz por medio de la Ec. (3.6) genera un acople numérico conservativo de forma local y acotado si se satisfacen las*

siguientes relaciones:

$$\begin{aligned}
\mathbf{1}^m \cdot \mathbf{A}_{AA} &= -\mathbf{1}^n \cdot \mathbf{A}_{BA} \cdot \mathbf{w}_A \\
\mathbf{1}^m \cdot \mathbf{A}_{AB} \cdot \mathbf{w}_B &= -\mathbf{1}^n \cdot \mathbf{A}_{BB} \\
\mathbf{1}^m \cdot \mathbf{w}_A^T &= \mathbf{1}^n \\
\mathbf{1}^n \cdot \mathbf{w}_B^T &= \mathbf{1}^m \\
\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{w}_A \cdot \mathbf{e}_j &\geq 0 \quad \forall i \quad \forall j \\
\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{w}_B \cdot \mathbf{e}_j &\geq 0 \quad \forall i \quad \forall j.
\end{aligned} \tag{3.18}$$

3.4. Interfaz conservativa basada en proyección de coeficientes

De acuerdo a lo explicado en la sección previa, el diseño de un acople numérico entre interfaces conservativo requiere definir cuatro matrices con coeficientes de ensamble del sistema lineal de ecuaciones y dos matrices de pesos de interpolación que deben satisfacer el grupo de expresiones de la Ec. (3.18). El conjunto de condiciones planteado por la Ec. (3.18) admite infinitas soluciones posibles por lo que se debe definir una estrategia para resolver esta indeterminación. En este contexto se define a continuación un método de definición de las matrices y coeficientes de peso de forma tal de satisfacer las expresiones dadas en (3.18):

Definidas dos matrices diagonales cualesquiera $\mathbf{A}_{AA} \in \mathcal{R}^{m \times m}$ y $\mathbf{A}_{AB} \in \mathcal{R}^{m \times m}$ que contienen los coeficientes de ensamble respectivos a las caras de la interfaz τ_A , y además, la matriz de pesos de interpolación $\mathbf{w}_B \in \mathcal{R}^{m \times n}$, la cual satisface que,

$$\begin{aligned}
\mathbf{1}^n \cdot \mathbf{w}_B^T &= \mathbf{1}^m \\
\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{w}_B \cdot \mathbf{e}_j &\geq 0 \quad \forall i \quad \forall j,
\end{aligned} \tag{3.19}$$

entonces, la siguiente definición de las matrices diagonales $\mathbf{A}_{BA} \in \mathcal{R}^{n \times n}$ y $\mathbf{A}_{BB} \in \mathcal{R}^{n \times n}$ respectivas a la interfaz τ_B y de la matriz de pesos de interpolación $\mathbf{w}_A \in \mathcal{R}^{n \times m}$ satisface la Ec. (3.18):

$$\begin{aligned}
\mathbf{A}_{BB} &= -\text{diag} [D(\mathbf{A}_{AB}) \cdot \mathbf{w}_B], \\
\mathbf{A}_{BA} &= -\text{diag} [D(\mathbf{A}_{AA}) \cdot \mathbf{w}_B], \\
\mathbf{w}_A &= -\mathbf{A}_{BA}^{-1} \cdot \mathbf{w}_B^T \cdot \mathbf{A}_{AA},
\end{aligned} \tag{3.20}$$

donde el operador $\text{diag}[\mathbf{x}]$ devuelve la matriz diagonal que se construye a partir del vector \mathbf{x} . Por otro

lado, el operador $D(\mathbf{y})$ retorna como vector la diagonal de la matriz $\mathbf{y} \in \mathcal{R}^{m \times m}$,

$$\begin{aligned} D(\mathbf{y}) &= \sum_{i=1}^m \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{y} \\ \text{diag}(\mathbf{x}) &= \sum_{i=1}^m (\mathbf{x} \cdot \mathbf{e}_i) \mathbf{E}_{ii}, \end{aligned} \quad (3.21)$$

donde \mathbf{E}_{ii} es una matriz que contiene un 1 en la posición ii siendo nulos el resto de sus componentes. En resumen, este método parte de las matrices de coeficientes de una de las interfaces y sus pesos de interpolación para luego definir las cantidades respectivas de la interfaz opuesta por medio de la Ec. (3.20). Debido a que este método propone definir de forma independiente los coeficientes y pesos de un solo lado de la interfaz para luego definir los de la interfaz restante se lo define como un método de proyección de coeficientes. A continuación se demuestra que satisfacer las Ecs. (3.19) y (3.20) implica satisfacer el conjunto de expresiones de la Ec. (3.18). La demostración se divide en tres partes:

1. El cumplimiento de la primera expresión de la Ec. (3.20) implica satisfacer la segunda expresión de la Ec. (3.18): se aplica el operador diagonal en la primera expresión de la Ec. (3.20),

$$D(\mathbf{A}_{BB}) = -D(\mathbf{A}_{AB}) \cdot \mathbf{w}_B \quad (3.22)$$

y desarrollando los operadores en su versión matricial,

$$\mathbf{1}^n \cdot \mathbf{A}_{BB} = -\mathbf{1}^m \cdot \mathbf{A}_{AB} \cdot \mathbf{w}_B \quad (3.23)$$

que es la segunda expresión de la Ec. (3.18).

2. El cumplimiento de la la tercera expresión de la Ec. (3.20) en combinación con la Ec. (3.19) implica satisfacer la primer expresión de la Ec. (3.18): se premultiplica por $(\mathbf{1}^n \cdot \mathbf{A}_{BA})$ a la tercera expresión de la Ec. (3.20),

$$\begin{aligned} (\mathbf{1}^n \cdot \mathbf{A}_{BA}) \cdot \mathbf{w}_A &= -(\mathbf{1}^n \cdot \mathbf{A}_{BA}) \cdot \mathbf{A}_{BA}^{-1} \cdot \mathbf{w}_B^T \cdot \mathbf{A}_{AA} \\ \mathbf{1}^n \cdot \mathbf{A}_{BA} \cdot \mathbf{w}_A &= -\mathbf{1}^n \cdot \mathbf{w}_B^T \cdot \mathbf{A}_{AA}. \end{aligned} \quad (3.24)$$

Si se incluye el requisito pedido en la Ec. (3.19) entonces,

$$\mathbf{1}^n \cdot \mathbf{A}_{BA} \cdot \mathbf{w}_A = -\mathbf{1}^m \cdot \mathbf{A}_{AA}, \quad (3.25)$$

que es la primer expresión de la Ec. (3.18).

3. El cumplimiento de la segunda y tercera expresión de la Ec. (3.20) implica satisfacer la tercera expresión de la Ec. (3.18): se aplica el operador diagonal en la segunda expresión de la Ec. (3.20),

$$D(\mathbf{A}_{BA}) = -D(\mathbf{A}_{AA}) \cdot \mathbf{w}_B, \quad (3.26)$$

desarrollando por los operadores en su versión matricial,

$$\mathbf{1}^n \cdot \mathbf{A}_{BA} = -\mathbf{1}^m \cdot \mathbf{A}_{AA} \cdot \mathbf{w}_B. \quad (3.27)$$

La última ecuación se multiplica por la identidad expresada en el lado derecho como $\mathbf{A}_{BA}^{-1} \cdot \mathbf{A}_{BA}$,

$$\mathbf{1}^n \cdot \mathbf{A}_{BA} = -\mathbf{1}^m \cdot (\mathbf{A}_{AA} \cdot \mathbf{w}_B \cdot \mathbf{A}_{BA}^{-1}) \cdot \mathbf{A}_{BA}, \quad (3.28)$$

donde el término entre paréntesis es igual al negativo de la transpuesta de la matriz \mathbf{w}_A según se define en la tercera expresión de la Ec. (3.20). Reemplazando el término entre paréntesis por \mathbf{w}_A^T ,

$$\mathbf{1}^n \cdot \mathbf{A}_{BA} = \mathbf{1}^m \cdot \mathbf{w}_A^T \cdot \mathbf{A}_{BA}, \quad (3.29)$$

y multiplicando a ambos miembros por \mathbf{A}_{BA}^{-1} ,

$$\begin{aligned} \mathbf{1}^n \cdot \mathbf{A}_{BA} \cdot \mathbf{A}_{BA}^{-1} &= \mathbf{1}^m \cdot \mathbf{w}_A^T \cdot \mathbf{A}_{BA} \cdot \mathbf{A}_{BA}^{-1} \\ \mathbf{1}^n &= \mathbf{1}^m \cdot \mathbf{w}_A^T, \end{aligned} \quad (3.30)$$

que es la tercera expresión de la Ec. (3.18).

Teniendo en cuenta que la Ec. (3.19) es la cuarta expresión de la Ec. (3.18) quedan entonces demostrado que satisfacer las expresiones (3.19) y (3.20) implica satisfacer todos los requerimientos definidos en (3.18) por lo que se demuestra que el método de proyección de coeficientes es un método que satisface los criterios de conservación local e interpolación acotada.

3.4.1. Propiedades del método de proyección de coeficientes

Además de la conservación de flujos, existen otras dos propiedades que son importantes de cumplir en un método de interpolación a través de interfaces no conformes:

- Simetría del sistema de ecuaciones lineales.
- Cálculo correcto de la matriz transpuesta.

Simetría en interfaces no conformes

En el caso de tener un problema cuya matriz del sistema de ecuaciones lineales es simétrica, esto implica la igualdad de las matrices ensambladas en la interfaz, concretamente: $\mathbf{A}_{AA} = \mathbf{A}_{AB}$ y $\mathbf{A}_{BA} = \mathbf{A}_{BB}$. En el método de proyección propuesto es directo inducir que si $\mathbf{A}_{AA} = \mathbf{A}_{AB}$ entonces esto implica que $\mathbf{A}_{BA} = \mathbf{A}_{BB}$ a partir de las primeras dos expresiones de la Ec. (3.20).

Cálculo de la matriz transpuesta para interfaces no conformes

El sistema de ecuaciones lineales resultante del problema de volúmenes finitos se resuelven utilizando diferentes *solvers* lineales dependiendo de la característica de la matriz. En caso de que la matriz no sea simétrica, uno de los *solvers* lineales de uso común es el método del gradiente biconjugado [47] en donde se necesita computar la matriz transpuesta del sistema de ecuaciones. Esta operación matricial es trivial para el caso de un problema sin interfaces pero en el caso contrario se plantea una nueva restricción: la submatriz perteneciente al sistema global que resulta del ensamble de las caras de interfaz se define como \mathbf{A}_τ y está compuesta por la concatenación de las matrices \mathbf{A}_{AA} , \mathbf{A}_{AB} , \mathbf{A}_{BA} y \mathbf{A}_{BB} , en donde las matrices que afectan a los grados de libertad de la interfaz opuesta están proyectados con los pesos \mathbf{w}_A y \mathbf{w}_B ,

$$\mathbf{A}_\tau = \begin{Bmatrix} \mathbf{A}_{AA} & \mathbf{A}_{AB} \cdot \mathbf{w}_B \\ \mathbf{A}_{BA} \cdot \mathbf{w}_A & \mathbf{A}_{BB} \end{Bmatrix}. \quad (3.31)$$

De este modo, la matriz transpuesta \mathbf{A}_τ^T se expresa como,

$$\mathbf{A}_\tau^T = \begin{Bmatrix} \mathbf{A}_{AA} & \mathbf{w}_A^T \cdot \mathbf{A}_{BA} \\ \mathbf{w}_B^T \cdot \mathbf{A}_{AB} & \mathbf{A}_{BB} \end{Bmatrix}. \quad (3.32)$$

en donde la transpuesta de \mathbf{A}_{AB} y \mathbf{A}_{BA} es igual a estas matrices ya que son diagonales. A diferencia de la matriz original \mathbf{A}_τ en donde por cada fila se tienen los coeficientes pertenecientes a una misma interfaz, \mathbf{A}_{AA} , \mathbf{A}_{AB} del lado fuente y \mathbf{A}_{BA} , \mathbf{A}_{BB} del lado destino, el cálculo de la matriz \mathbf{A}_τ^T requiere en cada interfaz computar cantidades definidas en la interfaz opuesta, información de la que no se dispone totalmente. Por ejemplo, en el ensamble de las filas correspondientes a las celdas de la interfaz τ_A se requieren los coeficientes definidos sobre la interfaz τ_B , \mathbf{A}_{BA} . Esto impone una dificultad para la implementación del método ya que se requieren interpoladores distintos a los empleados para el caso de la matriz sin transponer. Por esta razón, es útil poder expresar las matrices $(\mathbf{w}_A^T \cdot \mathbf{A}_{BA})$ y $(\mathbf{w}_B^T \cdot \mathbf{A}_{AB})$ en función de \mathbf{A}_{AA} y \mathbf{A}_{BB} respectivamente. En este sentido se definen las siguientes expresiones equivalentes que permiten reemplazar los términos no diagonales de la matriz definida en la Ec. (3.32) por

matrices de coeficientes respectivos a su interfaz,

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_{AA} \cdot \mathbf{w}_B &= \mathbf{w}_A^T \cdot \mathbf{A}_{BA} \\ \mathbf{A}_{BB} \cdot \mathbf{w}_C &= \mathbf{w}_B^T \cdot \mathbf{A}_{AB}, \end{aligned} \quad (3.33)$$

en donde,

$$\mathbf{w}_C = \mathbf{A}_{BB}^{-1} \cdot \mathbf{w}_B^T \cdot \mathbf{A}_{AB}. \quad (3.34)$$

La primera expresión de la Ec. (3.33) se demuestra reemplazando \mathbf{w}_A por su definición en (3.20),

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_{AA} \cdot \mathbf{w}_B &= (\mathbf{A}_{BA}^{-1} \cdot \mathbf{w}_B^T \cdot \mathbf{A}_{AA})^T \cdot \mathbf{A}_{BA} \\ \mathbf{A}_{AA} \cdot \mathbf{w}_B &= \mathbf{A}_{AA} \cdot \mathbf{w}_B \cdot \mathbf{A}_{BA}^{-1} \cdot \mathbf{A}_{BA} \\ \mathbf{A}_{AA} \cdot \mathbf{w}_B &= \mathbf{A}_{AA} \cdot \mathbf{w}_B. \end{aligned} \quad (3.35)$$

Por su parte, la segunda expresión en (3.33) se demuestra incluyendo la definición de \mathbf{w}_C dada en (3.34)

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_{BB} \cdot (\mathbf{A}_{BB}^{-1} \cdot \mathbf{w}_B^T \cdot \mathbf{A}_{AB}) &= \mathbf{w}_B^T \cdot \mathbf{A}_{AB} \\ \mathbf{w}_B^T \cdot \mathbf{A}_{AB} &= \mathbf{w}_B^T \cdot \mathbf{A}_{AB} \end{aligned} \quad (3.36)$$

Por lo tanto, la definición de la matriz transpuesta de \mathbf{A}_τ expresada en función de los coeficientes respectivos a cada interfaz es:

$$\mathbf{A}_\tau^T = \left\{ \begin{array}{cc} \mathbf{A}_{AA} & \mathbf{A}_{AA} \cdot \mathbf{w}_B \\ \mathbf{A}_{BB} \cdot \mathbf{w}_C & \mathbf{A}_{BB} \end{array} \right\}. \quad (3.37)$$

3.4.2. Determinación de las cantidades independientes sobre una de las interfaces

El método de proyección de matrices y coeficientes definido en la Ec. (3.20) requiere definir inicialmente las matrices de coeficientes correspondientes a una de las interfaces τ_A o τ_B y su matriz de pesos de interpolación. A estas matrices se las denomina matrices independientes mientras que las restantes, definidas por medio de la Ec. (3.20), se las denomina matrices dependientes. Previamente se eligió a la interfaz τ_A como la interfaz con matrices independientes \mathbf{A}_{AA} , \mathbf{A}_{BA} y \mathbf{w}_B .

Las matrices de coeficientes \mathbf{A}_{AA} , \mathbf{A}_{BA} contienen coeficientes que resultan del ensamble de los operadores convectivos y difusivos de la ecuación de transporte. Su cómputo es función de campos en la interfaz y de cantidades geométricas como áreas y distancias. En una cara de interfaz estas cantidades se

calculan con valores definidos sobre ambas interfaces, en general:

$$\begin{aligned}\alpha_{AA}^i &= f_{AA} \left(K_A^i, K_B^j \right) \quad K_B^j \in \chi(K_A^i), \quad \forall K_A^i \in \tau_A \\ \alpha_{AB}^i &= f_{AB} \left(K_A^i, K_B^j \right) \quad K_B^j \in \chi(K_A^i), \quad \forall K_A^i \in \tau_A.\end{aligned}\quad (3.38)$$

Las cantidades definidas en la interfaz opuesta τ_B se interpolan utilizando los pesos w_B . Asimismo, cualquier cantidad γ_B^j definida sobre las caras $K_B^j \in \tau_B$ se proyectan sobre las caras $K_A^i \in \tau_A$ para definir el valor proyectado $\bar{\gamma}_B^i$ según:

$$\bar{\gamma}_B^i = \sum_j w_B^{i,j} \gamma_B^j \quad K_B^j \in \chi(K_A^i) \quad \forall K_A^i \in \tau_A. \quad (3.39)$$

Los pesos de interpolación w_B deben cumplir con las propiedades definidas en la Ec. (3.16) donde se exige que los coeficientes de interpolación estén definidos entre 0 y 1 y que además la suma de los coeficientes asociados a cualquier cara K_A^i debe ser la unidad. La alternativa elegida en este trabajo es utilizar pesos basados en áreas de solapamiento entre las caras de ambas interfaces,

$$w_B(K_A^i) = \left\{ w_B^{i,j} \in \mathcal{R} : w_B^{i,j} = \frac{A(K_A^i \cap K_B^j)}{A(K_A^i)} \quad \forall K_B^j \in \chi_{AB}(K_A^i) \right\}, \quad (3.40)$$

donde $A(K)$ es el área de la cara K . El algoritmo de cómputo de los pesos se realiza por medio de la técnica de supermalla local propuesta en el trabajo de Farres y Maddison [48]. Detalles adicionales de este procedimiento se presentarán en la Sección 4.2.3. Los pesos basados en áreas de solapamiento satisfacen los requerimientos de la Ec. (3.16) y además poseen la propiedad de conservar las integrales de superficie de las cantidades proyectadas. Dado un conjunto de valores de caras γ_B^j definidos sobre la interfaz τ_B y proyectando estos sobre las caras $K_A^i \in \tau_A$ por medio de la expresión (3.39) y pesos definidos por solapamiento de áreas según (3.40) entonces se satisface la integral de área sobre la interfaz de forma discreta,

$$\sum_{K_A^i \in \tau_A} \bar{\gamma}_B^i A(K_A^i) = \sum_{K_B^j \in \tau_B} \gamma_B^j A(K_B^j) \quad (3.41)$$

Ejemplo: discretización del término difusivo

El cómputo del flujo difusivo en una cara K requiere conocer la distancia entre los centroides de las celdas adyacentes a esta cara. También se debe calcular la difusividad en la cara a través de interpolación de los valores de las celdas adyacentes,

$$\phi_D(K) = \gamma_K [\nabla \psi(K) \cdot \mathbf{S}_f] = [f_x \gamma_A + (1 - f_x) \gamma_B] \frac{(\psi_B - \psi_A)}{\|d\|} A(K) \quad (3.42)$$

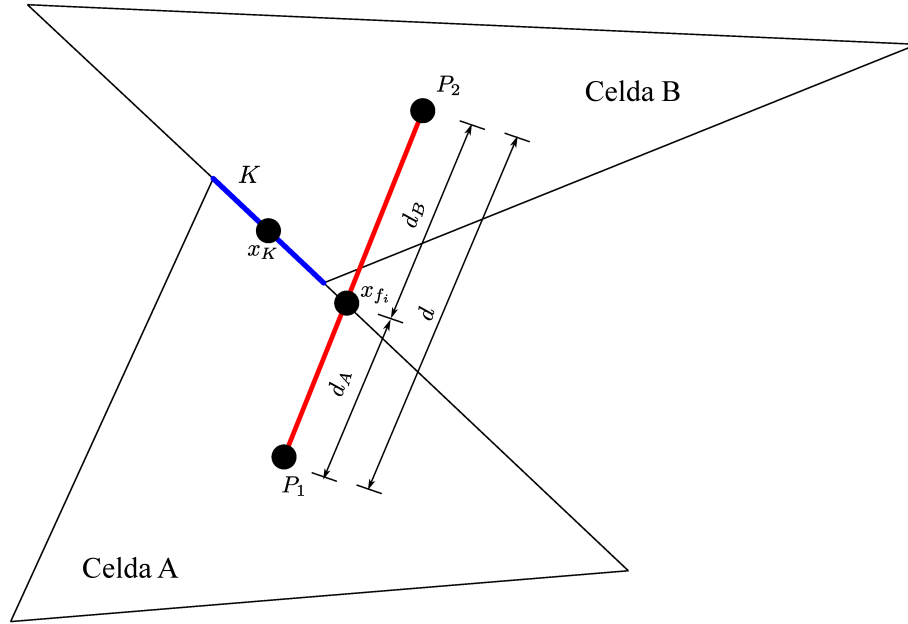


Figura 3.9: Definición del segmento que une los centroides de celdas separadas por la cara K . Las distancias parciales entre el centroide y el plano que contiene a la cara K se denominan d_A y d_B

donde d es la distancia entre las celdas P_1 y P_2 . Esta distancia se descompone como la suma entre d_A y d_B según se clarifica en la Fig. 3.9. El factor de interpolación f_x se calcula como,

$$f_x = \frac{d_A}{d}. \quad (3.43)$$

Si la cara K pertenece a la interfaz τ_B , entonces las cantidades definidas sobre la interfaz opuesta τ_B se calculan según la Ec. (3.39). Para el caso particular del ensamble del término difusivo se deben proyectar los valores de la difusividad γ_B y las distancias d_B a valores interpolados sobre la interfaz τ_A ,

$$\begin{aligned} \bar{\gamma}_B &= \sum_j w_B^{i,j} \gamma_B^j \quad K_B^j \in \chi(K_A^i) \quad \forall K_A^i \in \tau_A \\ \bar{d}_B &= \sum_j w_B^{i,j} d_B^j \quad K_B^j \in \chi(K_A^i) \quad \forall K_A^i \in \tau_A. \end{aligned} \quad (3.44)$$

Utilizando estas proyecciones el flujo difusivo para una cara $K_A \in \tau_A$ se escribe como,

$$\phi_D(K_A) = \left[\frac{d_A}{d_A + \bar{d}_B} \gamma_A + \left(1 - \frac{d_A}{d_A + \bar{d}_B} \right) \gamma_B \right] \frac{(\bar{\psi}_B - \psi_A)}{\|d_A + \bar{d}_B\|} A(K). \quad (3.45)$$

3.4.3. Comentarios sobre la implementación computacional

La implementación del método de proyección de coeficientes requiere computar las cantidades dependientes en una de las interfaces según las Ecs. (3.20). En problemas no lineales, como en un *solver*

de flujo, el cómputo de las Ecs. (3.20) se debe realizar en todos los pasos temporales ya que los coeficientes de ensamble independientes \mathbf{A}_{AA} y \mathbf{A}_{AB} varían continuamente. En la presente implementación, la proyección de coeficientes se realiza al comienzo de la resolución del sistema lineal de ecuaciones. En el caso particular de resolver los sistemas lineales con un *solver* del tipo multigrilla, cada interfaz se divide en subconjuntos de caras de acuerdo al nivel de refinamiento utilizado por el *solver* multigrilla. En cada nivel de refinamiento, se deben recomputar los coeficientes de ensamble y pesos de interpolación en ambas interfaces.

En particular de esta tesis, se implementa esta técnica sobre dos tipos de *solver* lineales: gradiente preconjugado para matrices simétricas y gradiente biconjugado para matrices no simétricas. En este último *solver* se adiciona al cómputo de las Ecs. (3.20) el cálculo de los pesos ω_c por medio de la Ec. (3.34) los cuales son necesarios en el cálculo de la matriz transpuesta.

3.5. Ejemplos de aplicación

En esta sección se muestran un par de ejemplos que tienen como objetivo probar la conservatividad del método de proyección de coeficientes contrastando los resultados con los correspondientes a un método de interpolación .

3.5.1. Problema difusivo puro

Se propone un problema difusivo para evaluar la propiedad de conservación del método de proyección de coeficientes. Se analiza el mezclado por medio de difusión de un trazador con una distribución inicial dentro de una cavidad. La definición del problema es la siguiente:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot [\gamma(\mathbf{x}) \nabla \psi] &= 0 \\
 \psi(\mathbf{x}, 0) &= 200 & \mathbf{x} \in \Omega_A \\
 \psi(\mathbf{x}, 0) &= 0 & \mathbf{x} \in \Omega_B \\
 \frac{\partial \psi}{\partial n}(\mathbf{x}, 0) &= 0 & \mathbf{x} \in \Gamma \\
 \gamma(\mathbf{x}) &= 1 + 10000 x^2 y^2 z^2
 \end{aligned} \tag{3.46}$$

donde ψ es la concentración del trazador, $\gamma(\mathbf{x})$ es el coeficiente de difusividad del mismo, Γ es la frontera del dominio y Ω_A y Ω_B sus subdominios. Estos se mullan con celdas hexaédricas utilizando diferente refinamiento para generar interfaces no conformes. El problema se presenta de forma esquemática en la Fig. 3.10. Se define una difusividad no homogénea para amplificar los potenciales problemas de conservación. En la Fig. 3.10 se detallan tres flechas que indican la dirección en la cual la difusividad aumenta.

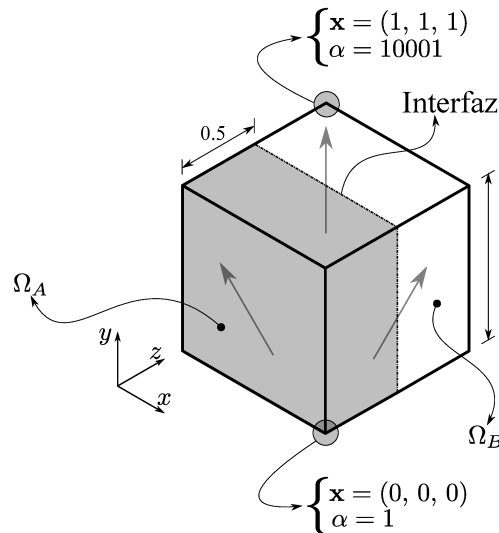


Figura 3.10: Cavidad cúbica con una interfaz localizada sobre el plano $z = 0,5$. Se define una difusividad no uniforme la cual tiene un valor mínimo y máximo sobre los puntos $\mathbf{x} = (0, 0, 0)$ y $\mathbf{x} = (1, 1, 1)$

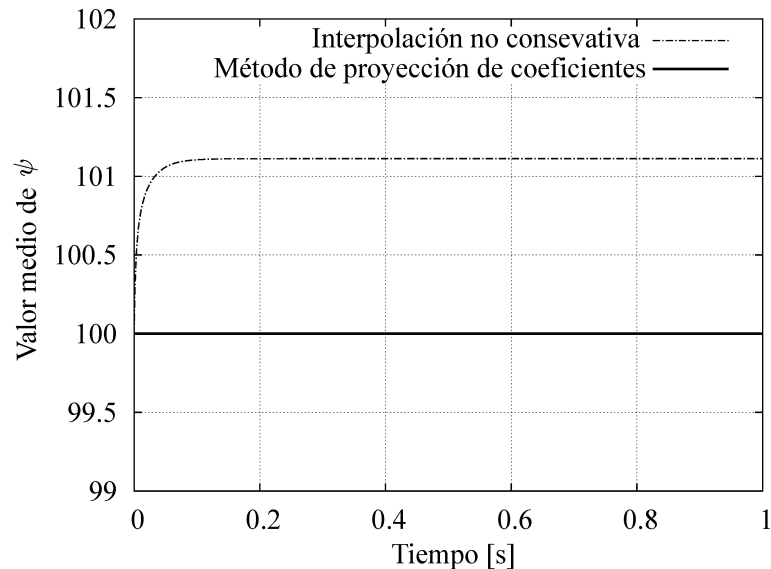


Figura 3.11: Promedio sobre todo el dominio de la cantidad ψ según el método de interpolación utilizado.

Además se presentan referencias a los valores mínimos y máximos localizados en los nodos $(0, 0, 0)$ y $(1, 1, 1)$ respectivamente. El problema se resuelve con un *solver* difusivo transitorio en el cual se discretiza el operador Laplaciano con un esquema lineal y el término temporal por medio del esquema Euler implícito respectivamente. El tiempo total de simulación se configura en 1 s y el paso temporal se define en 0,001 s.

El promedio global de la función marcador se grafica a lo largo del tiempo en la Fig. (3.11). La evolución del promedio global de ψ para el método de proyección de coeficientes demuestra conservación a lo largo de todo el tiempo de simulación. También se incluyen los resultados correspondientes al método

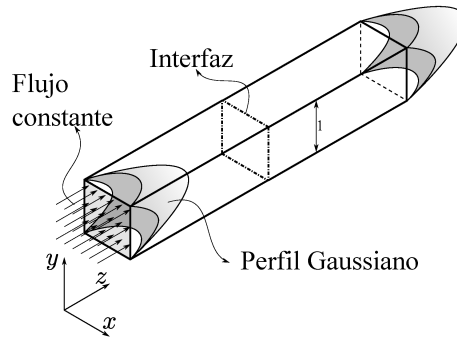


Figura 3.12: Un perfil Gaussiano se transporta a lo largo de un conducto de sección cuadrada el cual contiene una interfaz no conforme en la mitad del trayecto.

basado en interpolaciones por áreas de solapamiento. Para este método se aprecian problemas de conservación ya que la cantidad inicial de la función marcadora se incrementa de forma errónea en el orden del 1%. Este incremento en la cantidad total de ψ se produce en el comienzo de la simulación cuando el gradiente de ψ en la interfaz posee un valor máximo.

3.5.2. Problema de flujo con transporte escalar

En este ejemplo se propone resolver un problema de Navier-Stokes al cual se le incorpora una ecuación de transporte para resolver la convección pura de una función trazadora. El dominio propuesto es un tubo rectangular de dimensiones $[1\text{m} \times 1\text{m} \times 6\text{m}]$ en donde se impone al flujo una condición de velocidad constante de 1 m/s a la entrada. Sobre el mismo borde, se define un perfil Gaussiano como condición de entrada para la función trazadora,

$$\psi(\mathbf{x}) = 1 - (x^2 + y^2) \quad \forall \mathbf{x} \in \Gamma_E, \quad (3.47)$$

donde Γ_E es el borde de entrada. El trazador ψ se transporta a lo largo del tubo por el campo de velocidades resultantes del problema de flujo tal cual se esquematiza en el Fig. 3.12. El tubo rectangular se divide a la mitad de su eje longitudinal generando dos subdominios separados por interfaces. Ambos subdominios se discretizan con celdas hexaédricas pero utilizando diferentes números de divisiones en sus ejes coordenadas: $[9 \times 9 \times 24]$ y $[10 \times 10 \times 24]$ para los subdominios de entrada y salida respectivamente. De esta forma se generan interfaces con mallas de superficie no conformes. El problema numérico se discretiza con un esquema implícito de primer orden para la integración temporal, esquemas de primer orden para la convección y un esquema lineal de segundo orden para el término difusivo y el cálculo de los gradientes. El paso de tiempo utilizado para esta simulación es de $\Delta t = 0,1$ s con un tiempo total de 100 s para lograr que el flujo se desarrolle por toda la extensión del conducto, alcanzando el estado

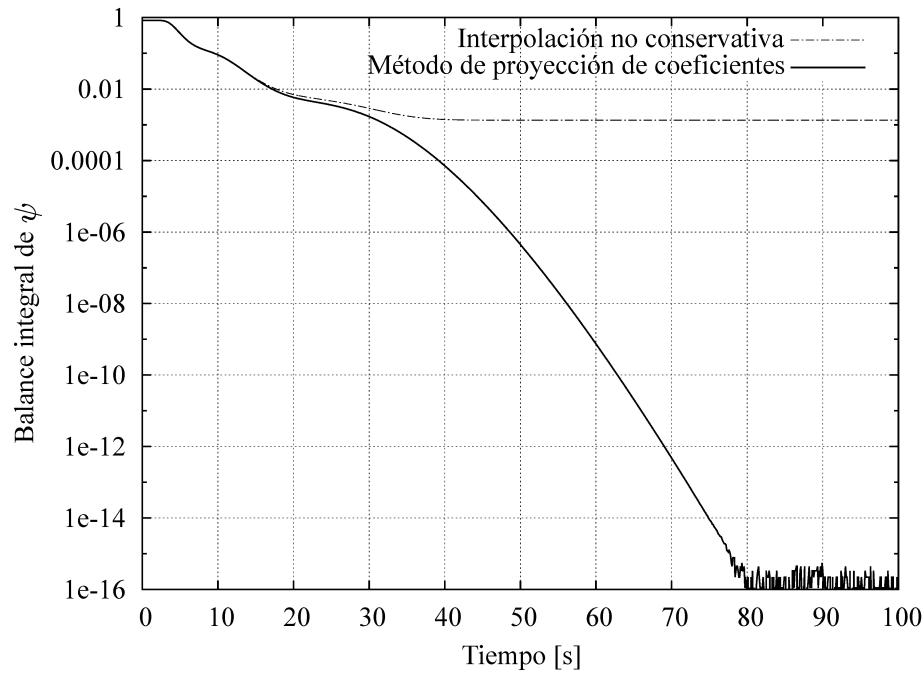


Figura 3.13: Balance total de la función trazadora en el tubo rectangular a lo largo del tiempo de simulación para el método de proyección de coeficientes y un método basado en pesos de áreas de solapamiento.

estacionario.

Para lograr la conservación del trazador se requiere resolver los problemas de flujo y transporte de manera conservativa. En el estado estacionario, la cantidad total del trazador que ingresa en el dominio debe ser exactamente igual a la que egresa. En este contexto, la Fig. 3.13 muestra el desbalance total entre el trazador que ingresa y egresa utilizando el método de proyección de coeficientes y un método basado en pesos de solapamiento de áreas en función del tiempo. En esta figura se aprecia un desbalance inicial para ambos métodos que se corresponde con que el frente de avance del trazador no ha alcanzado la salida del dominio. Ya superada la primera mitad de simulación se aprecia que el desbalance para el método de proyección de coeficientes converge hacia un valor de precisión de máquina ($1e^{-16}$). De forma contraria, los resultados del método no conservativo convergen en un desbalance de la función trazadora del orden de ($1e^{-3}$) lo cual deja en evidencia la no conservación de las cantidades de balance de este método de interpolación.

3.6. Notas finales

En este capítulo se hizo un estudio teórico sobre el tratamiento numérico en interfaces de superficie no conformes. El análisis comienza a partir de exigir la propiedad telescópica sobre un subdominio compuesto exclusivamente por las celdas adyacentes a las interfaces. A partir de un desarrollo matricial, se

llegó a un conjunto de relaciones entre los coeficientes de ensamble del sistema lineal de ecuaciones y los pesos de interpolación que aseguran conservación global y local del acople numérico de las interfaces no conformes. Dentro de este marco, se propuso un método de interfaz que define los coeficientes de ensamble y pesos de interpolación sobre solamente una de las interfaces para luego proyectar estas cantidades sobre la interfaz opuesta por medio de ciertas expresiones. Las cantidades resultantes de este método de proyección satisfacen los criterios de conservación local y global según se verifica en un desarrollo matemático. El método se implementa computacionalmente y se lo prueba resolviendo dos problemas de flujo con transporte de un escalar verificándose la propiedad de conservación.

Las expresiones generales expuestas en la Ec. (3.18) son valiosas desde el punto de vista teórico ya que permiten verificar de forma general las propiedades de conservación de cualquier método numérico de acople entre interfaces. Por otro lado, se identificaron dos propiedades importantes en un método de interfaz: conservación de la simetría de los sistemas lineales y el cálculo correcto de matrices transpuestas. A partir de estos conceptos se concluye que los métodos de acople no conservativos interfieren sobre la simetría de los sistemas lineales introduciendo flujos convectivos espurios. Además, en los métodos no conservativos se realiza un cómputo incorrecto de la matriz transpuesta lo que puede afectar la estabilidad de aquellos *solvers* lineales basados en esa operación matemática.

Capítulo 4

Acople conservativo entre interfaces no conformes basado en intersección de mallas

4.1. Introducción

En el capítulo anterior se desarrollaron los conceptos teóricos sobre la conservación de flujos en interfaces no conformes por medio del método de los volúmenes finitos. Se llegó a un conjunto de expresiones definidas en la Ec. (3.18) que determinan relaciones entre los coeficientes ensamblados en la matriz del sistema lineal de ecuaciones y los pesos de interpolación de forma de asegurar conservación global y local de los flujos en las interfaces. Estas expresiones son generales y se aplican para cualquier problema de volúmenes finitos que utilice interfaces no conformes. Dado un par de interfaces cualesquiera, existen infinitas posibilidades para definir las matrices de coeficientes y pesos de interpolación de forma de satisfacer la Ec. (3.18). En este contexto, se precisó un método en particular que se basa en la proyección de coeficientes de una interfaz a la otra tal como se definió en la Ec. (3.20). En este método se propuso utilizar pesos basados en área para la matriz w_B aunque es posible elegir cualquier otro esquema teniendo en cuenta que los pesos deben ser acotados.

En este capítulo se describe una nueva alternativa para resolver el acople conservativo entre interfaces a través de una interfaz auxiliar denominada como supermalla (*supermesh*, en inglés). Una supermalla es la combinación de las interfaces no conformes en una única interfaz que contiene los elementos de ambas interfaces. A raíz de esto, es posible asociar cada cara de la supermalla con un único elemento de las interfaces originales lo que da lugar a una relación “uno-a-uno” entre las celdas adyacentes a las interfaces. El concepto de supermalla es propuesto en primera instancia por Farrel *et al.* [26] quienes

formalizan el concepto de supermalla para realizar interpolaciones conservativas entre mallas no estructuradas. En un trabajo posterior, Farrel y Maddison extienden el concepto de supermalla para mallas volumétricas [48] y además, se propone un algoritmo computacionalmente eficiente para la construcción de la supermalla denominado como supermalla local (*local supermeshing*). Esta técnica ha sido adoptada en trabajos subsecuentes caracterizados por interpolar campos entre mallas aprovechando sus ventajas de conservatividad y eficiencia computacional [49, 50]. El concepto de supermalla es aplicado al método de los volúmenes finitos en el trabajo de Menon y Schmidt [51] en donde se resuelve el traspaso de campos entre mallas poliédricas arbitrarias con una precisión de segundo orden. Esta última técnica es aplicada, por ejemplo, para resolver problemas de mallas dinámicas en motores de combustión interna en [52].

4.1.1. Definición de supermalla

Se define a la supermalla τ_C construida a partir de interfaces originales τ_A y τ_B de la siguiente manera,

$$\begin{aligned} \mathcal{N}_C &\supseteq \mathcal{N}_A \cup \mathcal{N}_B, \\ A(K_C^k \cap K) &\in \{0, A(K_C^k)\} \forall K_C^k \in \tau_C, K \in \tau, \tau \in \{\tau_A, \tau_B\}, \end{aligned} \quad (4.1)$$

donde \mathcal{N}_C , \mathcal{N}_A and \mathcal{N}_B son los conjuntos que contienen los nodos de las interfaces τ_C , τ_B y τ_A respectivamente. La primer expresión en (4.1) afirma que la supermalla τ_C contiene la totalidad de los nodos de las interfaces originales τ_A y τ_B . Por otro lado, la segunda ecuación en (4.1) indica que cada cara perteneciente a la supermalla está totalmente incluida en alguna de las caras de las interfaces originales. Esta definición es válida para el caso de interfaces totalmente acopladas. La definición correspondiente al caso parcialmente acoplado se describirá en la Sección 4.3.

4.1.2. Ventajas y desventajas de la supermalla

El concepto clave de una supermalla es que permite realizar una conectividad de pares trivial entre las celdas adyacentes a la interfaz sustituyendo a las interfaces no conformes. De esta forma, la supermalla es equivalente a un conjunto de caras internas que comunica las celdas adyacentes de las interfaces originales. Debido a esto, la conservación de flujos se garantiza a partir de la propiedad telescópica del método de los volúmenes finitos.

Si bien desde el aspecto numérico el uso de una supermalla simplifica el proceso de acople conservativo entre interfaces, su construcción tiene desventajas desde el punto de vista computacional. La principal dificultad es determinar cada una de las caras resultantes de interceptar los elementos de las interfaces originales. Cada cara de supermalla puede ser un polígono arbitrario que debe ser definido en base a una lista ordenada de puntos. Luego, este nuevo elemento de supermalla debe ser introducido en la malla del

problema computacional. Esto conduce a agregar nuevos puntos, caras y conectividades a la estructura de datos de la malla. Además, se deben remover de la malla las interfaces originales pero, no obstante, estas se deben almacenar en memoria para ser recuperadas al momento de redefinir un nuevo estado de supermalla en problemas de malla dinámica. Todas estas tareas insumen recursos computacionales lo cual es un inconveniente en problemas dinámicos ya que la supermalla se debe actualizar constantemente. En resumen se listan los principales pasos necesarios para definir una supermalla,

1. Determinar los pares de elementos de las interfaces originales que se solapan o intersectan
2. Para cada par de elementos intersectados determinar la lista ordenada de puntos que define al polígono intersección
3. Remover las caras y los puntos de las interfaces originales
4. Agregar los nuevos puntos y caras de la supermalla dentro de la estructura de datos de la malla. Asignar las nuevas conectividades

4.2. Una estrategia simplificada: la pseudo-supermalla

Con el objetivo de disminuir los costos computacionales devenidos de la construcción de la supermalla se propone el uso de una versión simplificada denominada pseudo-supermalla. Esta estrategia surge a partir de considerar la siguiente propiedad: el método de volúmenes finitos de segundo orden de precisión solo requiere conocer el área y la posición del baricentro o centroide de las caras de la malla. Entonces, una definición precisa de la geometría de las caras no es necesaria, siendo solamente requerido sus áreas y centroides. En este sentido, la estrategia de pseudo-supermalla propone redefinir la cantidad de caras de las interfaces originales para lograr una conectividad uno-a-uno entre ellas. Luego, a cada cara de la pseudo-supermalla se le asigna el área y el centroide correspondiente al sector intersección que esta representa. La principal ventaja de este método radica en que no es necesario determinar el polígono intersección evitando agregar nuevos nodos o vértices y nuevas caras en la malla. Además, no se necesita ordenar el conjunto de nodos que determinan el polígono ya que el área y el centroide del mismo se pueden obtener a partir de una triangulación arbitraria de los nodos desordenados que resultan del sector intersección.

4.2.1. Definición de pseudo-supermallas

La estrategia de pseudo-supermalla se basa en redefinir el número de caras de las interfaces fuente τ_A y destino τ_B con el objetivo de construir nuevas interfaces con una conectividad trivial, o bien, uno-a-uno. Para esto, cada cara $K_A \in \tau_A$ ($K_B \in \tau_B$) se duplica o multiplica “n” veces de acuerdo a la

conectividad con su interfaz opuesta la cual esta determinada por la lista de conectividades $\chi_{AB}(\chi_{BA})$. Las caras generadas son copia de las caras originales por lo que comparten sus mismos nodos (los nodos no se replican). Estas se almacenan en nuevas interfaces τ_{C_A} y τ_{C_B} denominadas interfaces de pseudo-supermallas. La definición formal de las pseudo-supermallas se describe a continuación:

Lado fuente: la pseudo-supermallas τ_{C_A} que nace a partir de τ_A con caras $K_{C_A}^{i,j}$ es una malla de superficie $\tau_{C_A} \in \mathcal{R}^3$ con elementos planos $K_{C_A}^{i,j} \in \mathcal{R}^2$ tal que:

- $\mathcal{N}_{C_A} = \mathcal{N}_A$
- $\forall K_A^i \in \tau_A \quad \wedge \quad \forall K_B^j \in \chi_{AB}(K_A^i) \quad \exists! K_{C_A}^{i,j} \in \tau_{C_A} : A(K_{C_A}^{i,j}) = A(K_A^i \cap K_B^j) \quad \wedge$
 $C(K_{C_A}^{i,j}) = C(K_A^i \cap K_B^j) \quad \wedge \quad \mathcal{N}_{K_{C_A}^{i,j}} = \mathcal{N}_{K_A^i}$

Lado destino: la pseudo-supermallas τ_{C_B} que nace a partir de τ_B con caras $K_{C_B}^{j,i}$ es una malla de superficie $\tau_{C_B} \in \mathcal{R}^3$ con elementos planos $K_{C_B}^{j,i} \in \mathcal{R}^2$ tal que:

- $\mathcal{N}_{C_B} = \mathcal{N}_B$
- $\forall K_B^j \in \tau_B \quad \wedge \quad \forall K_A^i \in \chi_{BA}(K_B^j) \quad \exists! K_{C_B}^{j,i} \in \tau_{C_B} : A(K_{C_B}^{j,i}) = A(K_A^i \cap K_B^j) \quad \wedge$
 $C(K_{C_B}^{j,i}) = C(K_A^i \cap K_B^j) \quad \wedge \quad \mathcal{N}_{K_{C_B}^{j,i}} = \mathcal{N}_{K_B^j}$

donde \mathcal{N}_K es el conjunto de nodos de la cara K . La primera igualdad afirma que los nodos de cada interfaz de pseudo-supermallas son los mismos que sus respectivas interfaces originales. Por su lado, la segunda proposición describe que para cada par de caras originales interconectadas existe una y solo una cara en cada pseudo-supermallas. El área y centroide de las caras de pseudo-supermallas son iguales a las correspondientes del sector intersección. Además, los nodos que forman las caras de pseudo-supermallas son iguales a los de sus caras padres.

Un ejemplo gráfico de interfaces de pseudo-supermallas se muestra en la Fig. 4.1. En esta figura se muestran dos subdominios: el subdominio ubicado a la izquierda posee la interfaz τ_A discretizada con caras cuadradas. Por otro lado, el dominio ubicado a la derecha contiene la interfaz τ_B discretizada con caras triangulares. Delante de cada una de las interfaces se muestran cada una de las caras de las interfaces de pseudo-supermallas τ_{C_A} y τ_{C_B} las cuales surgen como replica de las caras originales. Las caras de pseudo-supermallas de ambas interfaces se conectan de a pares con un esquema uno-a-uno emulando una supermallas la cual se esquematiza en la parte central de la figura.

4.2.2. Conectividad de las pseudo-supermallas

Para cada cara de una interfaz original (τ_A o τ_B) existen “ n ” caras idénticas en las interfaces de pseudo-supermallas (τ_{C_A} y τ_{C_B}) respectivamente. La cantidad “ n ” depende del número de caras del lado opuesto

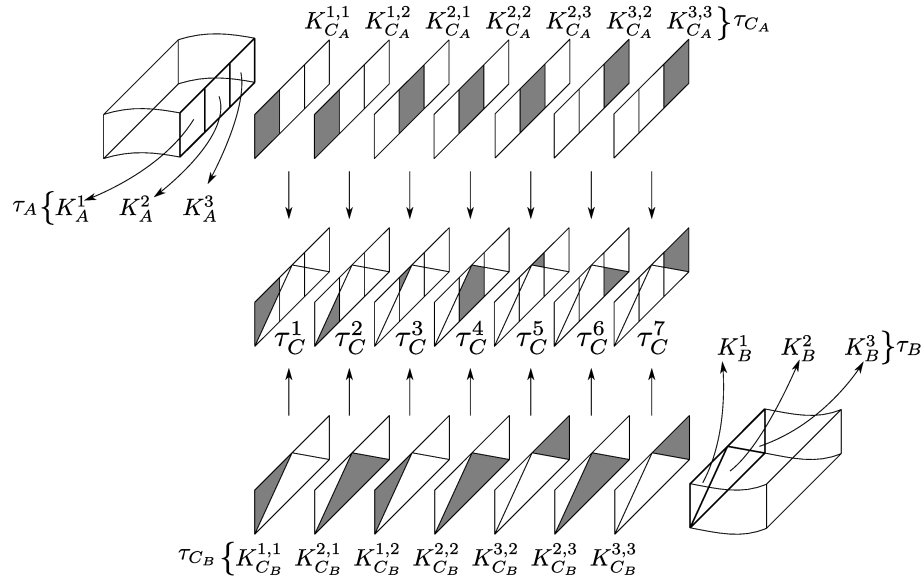


Figura 4.1: Ejemplo de pseudo-supermallas.

que solapan a la cara padre. Debido que para cada conexión entre un par de caras originales existe una sola cara en cada interfaz de pseudo-supermalla, la conectividad entre τ_{C_A} y τ_{C_B} es uno-a-uno. En este sentido, se definen dos nuevas listas de conectividades. La lista $\chi_{C_A C_B}$ contiene para cara del lado fuente $K_{C_A}^{i,j} \in \tau_{C_A}$ la correspondiente cara en el lado destino $K_{C_B}^{j,i} \in \tau_{C_B}$,

$$\chi_{C_A C_B}(K_{C_A}^{i,j}) = K_{C_B}^{j,i} \in \tau_{C_B} \quad \forall K_{C_A}^{i,j} \in \tau_{C_A}, \quad (4.2)$$

análogamente,

$$\chi_{C_B C_A}(K_{C_B}^{j,i}) = K_{C_A}^{i,j} \in \tau_{C_A} \quad \forall K_{C_B}^{j,i} \in \tau_{C_B}. \quad (4.3)$$

Siguiendo la definición de las interfaces de pseudo-supermalla, la conectividad entre las caras originales y las de pseudo-supermalla son definidas de forma directa. En este contexto, se define la lista χ_{AC_A} la cual relaciona todas las caras de pseudo-supermalla $K_{C_A}^{i,j}$ que nacen a partir de cada cara $K_A^i \in \tau_A$,

$$\chi_{AC_A}(K_A^i) = \left\{ K_{C_A}^{i,j} \in \tau_{C_A} : K_B^j \in \chi_{AB}(K_A^i) \right\} \quad \forall K_A^i \in \tau_A, \quad (4.4)$$

de la misma forma para la interfaz destino se tiene la lista χ_{BC_B} ,

$$\chi_{BC_B}(K_B^j) = \left\{ K_{C_B}^{j,i} \in \tau_{C_B} : K_A^i \in \chi_{BA}(K_B^j) \right\} \quad \forall K_B^j \in \tau_B. \quad (4.5)$$

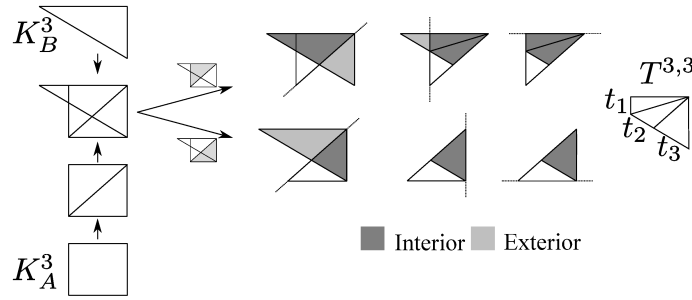


Figura 4.2: Triangulación del sector intersección mediante sucesivos recortes entre pares de triángulos.

4.2.3. Supermalla local

Tal como se explicó anteriormente, las caras de pseudo-supermalla comparten el área y el centroide del sector intersección que están representando. Por lo tanto, es necesario determinar estas cantidades geométricas a partir de las caras originales en τ_A y τ_B . En este trabajo se utiliza la técnica de supermalla local propuesta en el trabajo de Farres y Maddison [48]. La técnica de supermalla local se basa en triangular la región intersección de cada par de caras solapadas inmediatamente después de haber sido identificado. La identificación de cada par de caras que se intersecan se realiza mediante un algoritmo denominado “frente de avance”. En esta técnica, las caras de ambas interfaces se alocan inicialmente en una árbol-R basado en cajas envolventes. Cuando se identifica un par de caras que se solapan, se continúa evaluando una de las caras solapadas con los vecinos de la restante. Este método se desarrolla de forma secuencial hasta que no se encuentre un solapamiento exitoso. En este caso, se vuelve a encontrar una semilla de intersección mediante una búsqueda por árbol para luego iniciar nuevamente el algoritmo de búsqueda basado en vecindades. Tal como se dijo anteriormente, la característica principal del algoritmo de supermalla local consiste en que una vez determinado cada par de caras en intersección se procede al cálculo del área y del centroide de la región intersecada. Para esto se propone dividir el sector de intersección $K_A^i \cap K_B^j$ en una triangulación $T^{i,j}$ compuesta por un conjunto de triángulos $t_n \in T^{i,j}$. La triangulación del sector solapado se realiza adoptando el método de Eberly [53] el cual procede en triangular cada una de las caras intersecadas para luego evaluar la intersección entre todos los triángulos. La intersección de un par de triángulos se realiza mediante el recorte de uno de ellos mediante los lados del restante. Esto genera un nuevo polígono el cual es triangulado nuevamente. El algoritmo continúa hasta que el sector solapado quede totalmente triangulado. Un ejemplo de este algoritmo se muestra en la Fig. 4.2. Una vez determinado el conjunto de triángulos t_n el área y centroide del sector intersección se computan de forma directa. El área se computa como la suma de las áreas de cada triángulo $t_n \in T^{i,j}$,

$$A(K_A^i \cap K_B^j) = \sum_{t_n \in T^{i,j}} A(t_n), \quad (4.6)$$

y el centroide del sector intersección se calcula como el promedio pesado por área de los centroides de cada triángulo $t_n \in T^{i,j}$, a saber:

$$\mathbf{x}_c(K_A^i \cap K_B^j) = \frac{\sum_{t_n \in T^{i,j}} A(t_n) \mathbf{x}_c(t_n)}{\sum_{t_n \in T^{i,j}} A(t_n)}. \quad (4.7)$$

4.2.4. Ejemplos de aplicación

Convección pura de un perfil Gaussiano

En este ejemplo se propone transportar un perfil Gaussiano por medio de un flujo constante (flujo “pistón”) a lo largo de un conducto de sección cuadrada. El dominio Ω se divide en dos partes, Ω_A y Ω_B a partir de seccionarlo mediante un plano normal a la dirección del flujo. Ambos subdominios se discretizan de forma independiente para generar una interfaz no conforme la cual se resuelve mediante la estrategia de pseudo-supermalla. El dominio utilizado se presentó en un problema similar en el capítulo 3 por medio de la Fig. 3.12. La definición matemática del problema se presenta a continuación,

$$\begin{aligned} \nabla \cdot [\mathbf{U}(\mathbf{x}) \psi] &= 0, \\ \mathbf{U}(\mathbf{x}) &= (0, 0, 1) \quad \mathbf{x} \in \Omega, \\ \psi(\mathbf{x}) &= \exp[-10(x^2 + y^2)] \quad \mathbf{x} \in \Gamma_D, \end{aligned} \quad (4.8)$$

donde $\mathbf{U}(\mathbf{x})$ es la velocidad del flujo, $\psi(\mathbf{x})$ es el escalar transportado y Γ_D es el borde de entrada. La solución de este problema es el transporte completo de la condición inicial a lo largo del dominio generando un perfil constante en la dirección dada por eje z ,

$$\psi(\mathbf{x}) = \exp[-10(x^2 + y^2)] \quad \mathbf{x} \in \Omega. \quad (4.9)$$

Ambos subdominios se discretizan con una malla estructurada de hexaedros las cuales tienen un diferente número de divisiones para lograr interfaces no conformes. Concretamente, las interfaces se mallan con un esquema de $[n \times n]$ y $[(n+1) \times (n+1)]$ divisiones por lado donde el parámetro n se varia desde $n = 4$ hasta $n = 512$ para realizar un estudio de convergencia del error. El problema se resuelve utilizando un *solver* transitorio partiendo de una condición inicial $\psi(\mathbf{x}) = 0$. La simulación finaliza cuando se alcanza el estado estacionario. El término convectivo se discretiza mediante el esquema *up-wind* de segundo orden. El error cuadrático medio del perfil de salida resultante se grafica en la Fig. 4.3 en función del tamaño de la discretización. En la misma gráfica se presentan los resultados que se obtienen utilizando mallas compuestas por una sola región, es decir, sin interfaces. Los resultados demuestran una convergencia de segundo orden del error. No se presentan diferencias con respecto a los resultados utilizando mallas conformes lo que prueba para esta caso de convección pura que las interfaces de

pseudo-supermallas no introducen error adicional en comparación con un caso sin interfaces.

Problema de difusión pura

En este ejemplo se propone un problema manufacturado utilizando un dominio cúbico. El principal objetivo es evaluar el orden de convergencia del método de pseudo-supermallas en un problema difusivo analizando, en particular, la influencia sobre el error de las correcciones no ortogonales [32].

La definición del problema es la siguiente,

$$\begin{aligned}
 \nabla \cdot [\nabla \psi(\mathbf{x})] &= 6 & \mathbf{x} \in \Omega \\
 \psi(\mathbf{x}) &= 1 + x + y + x^2 + y^2 & \mathbf{x} \in \Gamma_A = \{\mathbf{x} \in \Gamma : z = 0\} \\
 \psi(\mathbf{x}) &= 3 + x + y + xy + x^2 + y^2 & \mathbf{x} \in \Gamma_B = \{\mathbf{x} \in \Gamma : z = 1\} \\
 \psi(\mathbf{x}) &= 1 + y + z + y^2 + z^2 & \mathbf{x} \in \Gamma_C = \{\mathbf{x} \in \Gamma : x = 0\} \quad , \quad (4.10) \\
 \psi(\mathbf{x}) &= 3 + y + z + yz + y^2 + z^2 & \mathbf{x} \in \Gamma_D = \{\mathbf{x} \in \Gamma : x = 1\} \\
 \psi(\mathbf{x}) &= 1 + x + z + x^2 + z^2 & \mathbf{x} \in \Gamma_E = \{\mathbf{x} \in \Gamma : y = 0\} \\
 \psi(\mathbf{x}) &= 3 + x + z + xz + x^2 + z^2 & \mathbf{x} \in \Gamma_F = \{\mathbf{x} \in \Gamma : y = 1\}
 \end{aligned}$$

donde $\psi(\mathbf{x})$ es la cantidad a transportar en el dominio Ω con frontera Γ la cual se divide en los bordes $\Gamma_A \dots \Gamma_F$ correspondientes a cada una de las caras del cubo. El problema tiene solución analítica:

$$\psi(\mathbf{x}) = 1 + x + y + z + xyz + x^2 + y^2 + z^2 \quad \mathbf{x} \in \Omega. \quad (4.11)$$

El dominio Ω es una cavidad cúbica de un metro por lado en donde la interfaz se localiza en el plano

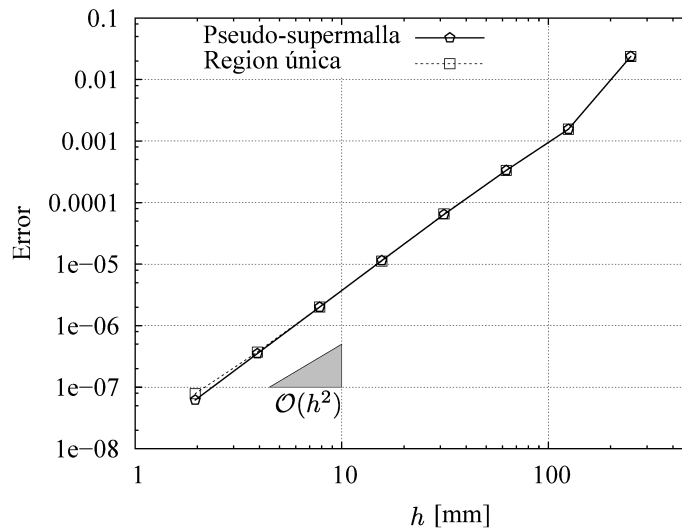


Figura 4.3: Convergencia del error en el problema de convección pura.

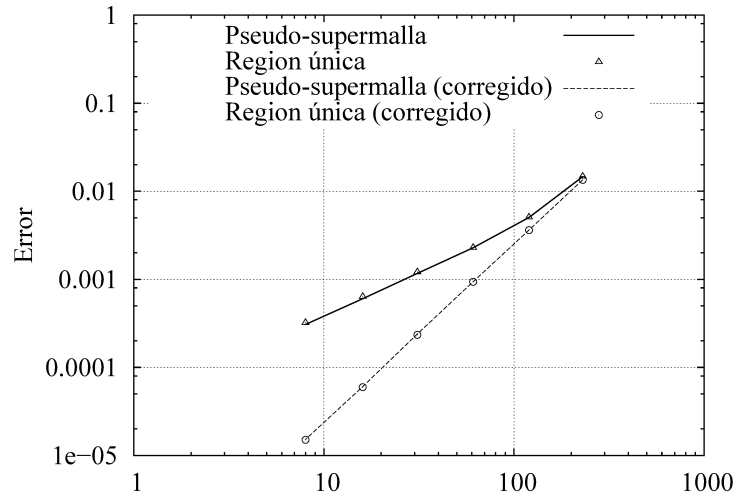


Figura 4.4: Convergencia del error en un problema manufacturado puramente difusivo.

$z = 0,5$. Para realizar un estudio de convergencia del error, el problema definido en Ec. (4.10) se resuelve utilizando diferentes discretizaciones en cada uno de los subdominios generando interfaces no conformes. Los resultados presentados en la Fig. 4.4 muestran concordancia con aquellos provenientes de utilizar una sola región de malla tanto para el caso con corrección ortogonal como sin ella. Las correcciones no ortogonales mejoran la precisión del método a segundo orden en el espacio.

Conservación en un problema de transporte

Se resuelve un problema de Navier-Stokes transitorio en una cavidad cuadrada de un metro de lado. En una mitad del dominio se configura una función marcadora con un valor de $\psi = 200$, mientras que en el sector restante se la define en $\psi = 0$. El flujo está en reposo a tiempo inicial y comienza a moverse debido a una velocidad paralela al eje z la cual se impone en el borde superior de la cavidad. La viscosidad cinemática del fluido ν tiene un valor de $0,01 \text{ m}^2/\text{s}$ y la velocidad del borde superior tiene una magnitud de 10 m/s definiendo un número de Reynolds igual a 1000 . El tiempo total de simulación es de 50 s . Una representación esquemática del problema se muestra en la Fig. 4.5 y su definición matemática es,

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial [\mathbf{U}(\mathbf{x}, t)]}{\partial t} + \nabla \cdot [\mathbf{U}(\mathbf{x}, t) \mathbf{U}(\mathbf{x}, t)] &= \frac{-\nabla p(\mathbf{x}, t)}{\rho} + \nu \Delta [\mathbf{U}(\mathbf{x}, t)] & \mathbf{x} \in \Omega \\
 \nabla \cdot [\mathbf{U}(\mathbf{x}, t)] &= 0 & \mathbf{x} \in \Omega \\
 \mathbf{U}(\mathbf{x}, t) &= (0, 0, u_z) & \mathbf{x} \in \Gamma_D \\
 \mathbf{U}(\mathbf{x}, t) &= (0, 0, 0) & \mathbf{x} \in \{\Gamma - \Gamma_D\} \\
 \mathbf{U}(\mathbf{x}, 0) &= (0, 0, 0) & \mathbf{x} \in \Omega,
 \end{aligned} \tag{4.12}$$

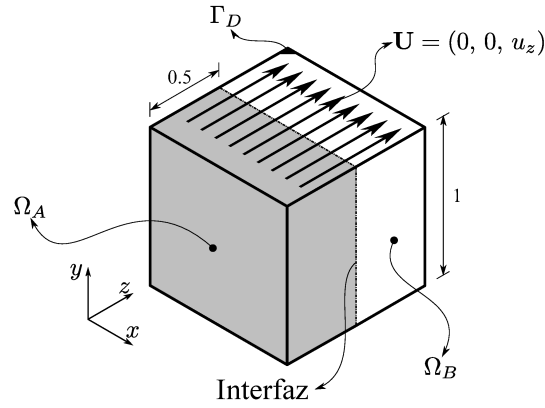


Figura 4.5: Descripción del problema de convección de un trazador de un flujo en una cavidad cuadrada. El dominio está subdividido en dos regiones que separan las zonas con y sin trazador al inicio del problema.

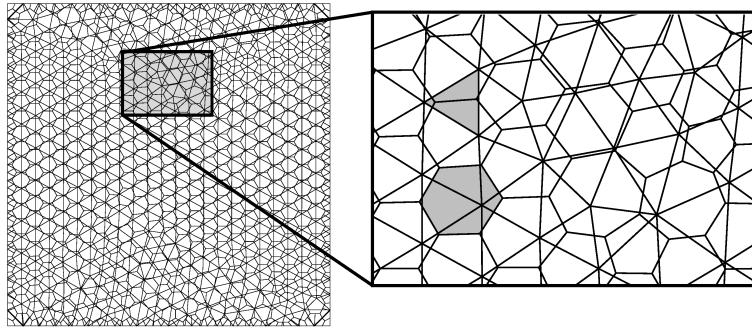


Figura 4.6: Interfaces triangulares y hexagonales utilizadas en el problema de transporte del trazador en una cavidad cuadrada.

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot [\mathbf{U}(\mathbf{x}, t) \psi(\mathbf{x}, t)] &= 0 & \mathbf{x} \in \Omega \\
 \psi(\mathbf{x}, 0) &= 200 & \mathbf{x} \in \Omega_A \\
 \psi(\mathbf{x}, 0) &= 0 & \mathbf{x} \in \Omega_B \\
 \frac{\partial \psi}{\partial n}(\mathbf{x}, t) &= 0 & \mathbf{x} \in \Gamma,
 \end{aligned}
 \tag{4.13}$$

donde $\mathbf{U}(\mathbf{x}, t)$ es la velocidad del fluido, p es la presión, ρ es la densidad del fluido asumida como constante con un valor de 1 kg/m^3 , Ω_A y Ω_B son los subdominios que se separan mediante la interfaz, Γ_D es el borde superior del tubo y Γ es la frontera del dominio. Los subdominios Ω_A y Ω_B se discretizan con diferentes patrones para generar una interfaz no conforme. En detalle, el primer subdominio se malla con celdas tetraédricas (21173 celdas) y el subdominio restante con poliedros generales (6831 celdas). Estas discretizaciones generan interfaces triangulares y de polígonos (hexágonos) como se muestra en la Fig. 4.6.

El problema se resuelve utilizando el algoritmo combinado SIMPLE-PISO. El paso temporal se confi-

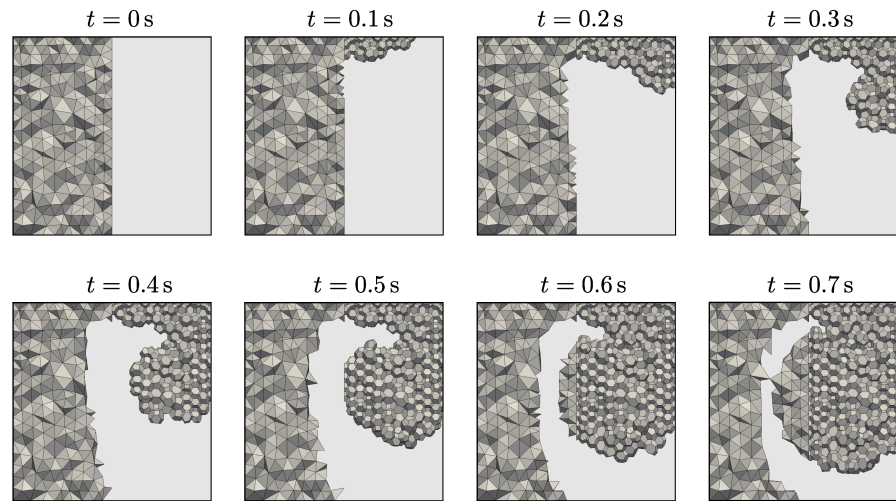


Figura 4.7: Plano transversal $x = 0,5$ mostrando para los primeros instantes de la simulación aquellas celdas del dominio cuyo valor de la función trazadora es $\phi \geq 50$.

gura con un valor de 0.01 s definiendo un número de Courant máximo de $Co \approx 14$. Para la discretización temporal se utiliza el esquema de segundo orden basado en diferencias hacia atrás. Por otro lado, para la convección se utilizan esquemas de convección del tipo aguas arriba o *upwind*. Los términos difusivos se discretizan con un esquema lineal.

En este problema la dinámica del flujo mezcla la función trazadora a lo largo de todo el dominio como se observa en la Fig. 4.7 donde la función marcadora junto con el flujo atraviesan la interfaz de forma continua. Teniendo en cuenta esto, es necesario resolver el problema de flujo y la función trazadora de forma correcta para conservar la cantidad total del escalar transportado. El problema se resuelve también utilizando una técnica que utiliza coeficientes de interpolación basados en áreas de solapamiento entre las caras. Todos los resultados se presentan en la Fig. 4.6 que muestra la cantidad total del escalar a lo largo del tiempo. La técnica de pseudo-supermalla demuestra conservación a precisión de máquina (10^{-16}) de la cantidad total del marcador a lo largo del tiempo de simulación. Por otro lado, la técnica basada en interpolaciones tiene problemas de conservación no despreciables. Para esta solución, el promedio global del escalar crece indefinidamente en el tiempo indicando problemas de estabilidad. La desviación estándar del trazador se evalúa como un indicador de mezclado. Como referencia de este parámetro se simula el problema utilizando una malla de una sola región. Aquí se utiliza una discretización equivalente al caso con interfaces pero convirtiendo las caras de las interfaces en caras internas por medio de una unión topológica de estas.

La evolución de la desviación estándar a lo largo del tiempo se grafica en la Fig. 4.8. La desviación estándar de ψ para la técnica de pseudo-supermalla es equivalente a los resultados del dominio con una sola región. En contraste a esto, los resultados del método no conservativo muestran un comportamiento

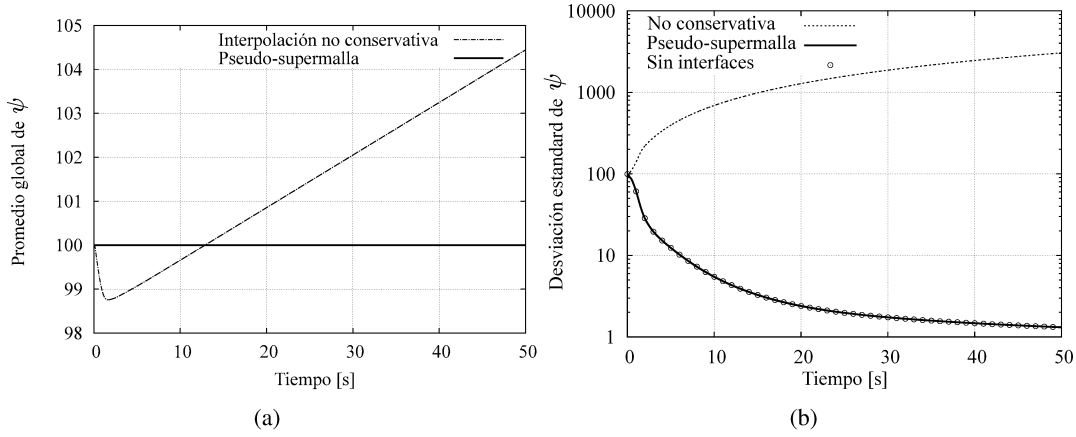


Figura 4.8: Resultados utilizando pseudo-supermallas y un método basado en interpolaciones; (a) evolución temporal de la integral de ψ sobre todo el dominio; (b) evolución temporal de la desviación estándar de ψ .

no físico de la desviación estándar.

Transporte de un vórtice

En los problemas previos, las discretizaciones advectivas y difusivas sobre las interfaces de pseudo-supermalla se evaluaron de forma independiente. En este ejemplo, ambos operadores se combinan resolviendo un problema de Navier-Stokes que consiste en el transporte de un vórtice a través de las interfaces por medio de un flujo constante. La condición inicial de velocidad $\mathbf{U} = (u, v)$ es:

$$u(x, y, 0) = U_0 - \frac{\Gamma}{R_c^2} (y - y_c) \exp\left(\frac{-r^2}{2R_c^2}\right), \quad v(x, y, 0) = \frac{\Gamma}{R_c^2} (x - x_c) \exp\left(\frac{-r^2}{2R_c^2}\right), \quad (4.14)$$

donde x_c y y_c son las coordenadas del centro del vórtice, $r = \sqrt{(x - x_c)^2 + (y - y_c)^2}$ es la distancia al centro del vórtice, Γ es la intensidad del vórtice, R_c es el radio del vórtice y U_0 es la magnitud del flujo medio. Este problema tiene la siguiente solución analítica,

$$u(x, y, t) = U_0 - \frac{\Gamma}{R_c^2} \frac{(y - y_c)}{\alpha^2} \exp\left(\frac{-r^2}{2\alpha R_c^2}\right), \quad v(x, y, t) = \frac{\Gamma}{R_c^2} \frac{(x - x_c)}{\alpha^2} \exp\left(\frac{-r^2}{2\alpha R_c^2}\right), \quad (4.15)$$

donde α se define como,

$$\alpha = 1 + \frac{2\nu t}{R_c^2} \quad (4.16)$$

siendo ν la viscosidad cinemática. La configuración del problema se basa en el trabajo de Wang *et al.* [54]: la intensidad del vórtice se define en $\Gamma = 0,036$, su radio es $R_c = 0,01556$ m y la velocidad media del flujo es $U_0 = 1$ m/s. Un esquema gráfico del problema se muestra en la Fig 4.9. A tiempo inicial, el vórtice se posiciona en las coordenadas $(x_c, y_c) = (-3R_c, 0)$ y se advecta hasta alcanzar

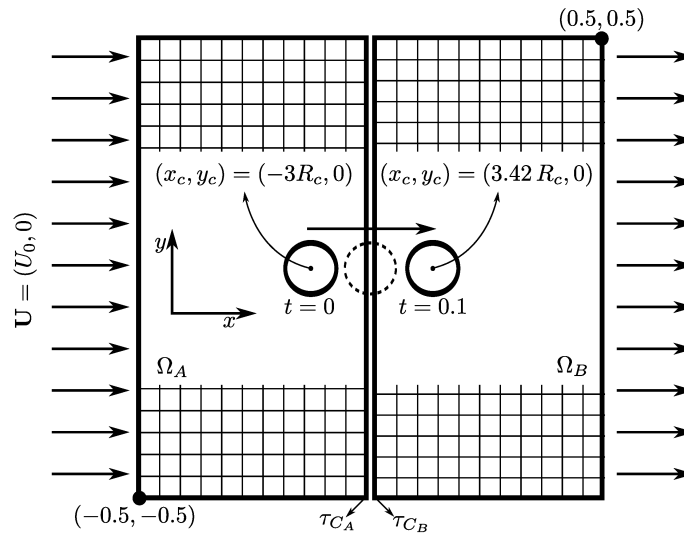


Figura 4.9: Convección de una estructura de vórtice a través de interfaces de pseudo-supermalla. Los puntos iniciales y finales del vórtice (x_c, y_c) se indican en la figura.

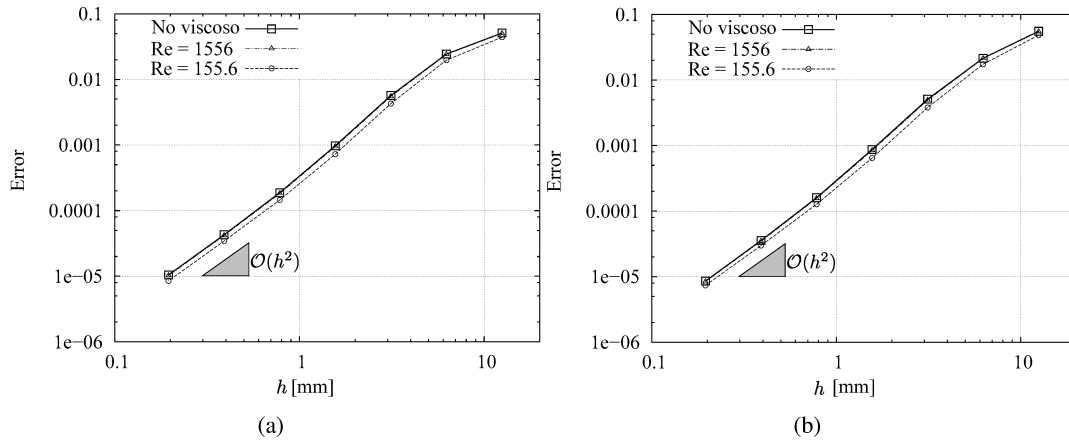


Figura 4.10: Error en media cuadrática de la velocidad; (a) componente horizontal u y (b) componente vertical v .

la posición $(x_c, y_c) \approx (3,42R_c, 0)$ en el tiempo $t = 0,1$ s. Los subdominios Ω_A y Ω_B se malla con diferentes divisiones en la dirección y : N_y y $(N_y + 1)$ para las interfaces de pseudo-supermalla τ_{C_A} y τ_{C_B} respectivamente. El acople velocidad-presión se resuelve utilizando el algoritmo SIMPLE-PISO. Las fronteras del dominio se posicionan lo suficientemente alejadas del vórtice de forma que la solución analítica evaluada sobre ellas esté por debajo del valor de precisión de máquina (10^{-16}). Con este criterio, en las fronteras se configura una velocidad media del flujo igual a U_0 y la presión se fija en la salida con un valor $p = 0$. Por otro lado, se configura una condición de gradiente nulo para p sobre el resto del dominio. El problema se resuelve utilizando diferentes refinamientos de malla. Específicamente, se varía el número de divisiones desde $N_y = 40$ a $N_y = 640$, modificando el paso temporal de forma acorde para definir un máximo número de Courant $Co \approx 0,95$. Se simulan tres casos utilizando diferentes valores de

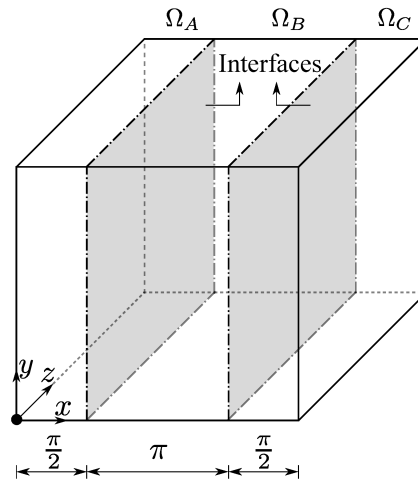


Figura 4.11: Cavidad cúbica dividida en tres subdominios a lo largo del eje- x definiendo dos pares de interfaces.

la viscosidad cinemática: $\nu_1 = 0$, $\nu_2 = 10^{-5}$ y $\nu_3 = 10^{-4}$ m²/s los cuales definen el caso no viscoso y problemas viscosos con $Re = 1556$ y $Re = 155,6$ respectivamente donde el número de Reynolds se define como $Re = U_0 Rc/\nu$. El término convectivo se discretiza con un esquema *upwind* de segundo orden y para el término difusivo se utiliza un esquema lineal utilizando correcciones no-ortogonales. Por otro lado, el término temporal se discretiza con un esquema de diferencias descentradas hacia atrás de segundo orden.

El error medio cuadrático de las simulaciones se grafica en la Fig. 4.10 como función del tamaño de las celdas de malla para ambas componentes de la velocidad. El valor de h es aquel correspondiente al tamaño de celda del subdominio perteneciente al lado izquierdo. Los resultados demuestran que la técnica de pseudo-supermallas no altera el orden de precisión de los esquemas de discretización utilizados resultando en una precisión de segundo orden.

Vórtice de Taylor-Green tridimensional

Finalmente se resuelve el problema del vórtice de Taylor-Green en tres dimensiones [55] utilizando pseudo-supermallas. El problema consiste en una estructura de vórtices que evoluciona hasta la condición de flujo en reposo por medio de un transitorio turbulento con disipación viscosa. El objetivo de este test es evaluar la capacidad de la estrategia de pseudo-supermallas para reproducir la evolución física del flujo sin introducir error adicional en comparación con un caso sin interfaces que es utilizado como herramienta de comparación. Como referencia se incluye además una solución obtenida a través de un método pseudo-espectral [56]. El dominio de estudio es un cubo de lado igual a 2π . En particular, el dominio se divide en tres subdominios: Ω_A , Ω_B and Ω_C . De esta forma se generan dos pares de interfaces de pseudo-supermalla las cuales son planos normales al eje- x tal cual se muestran en la Fig. 4.11.

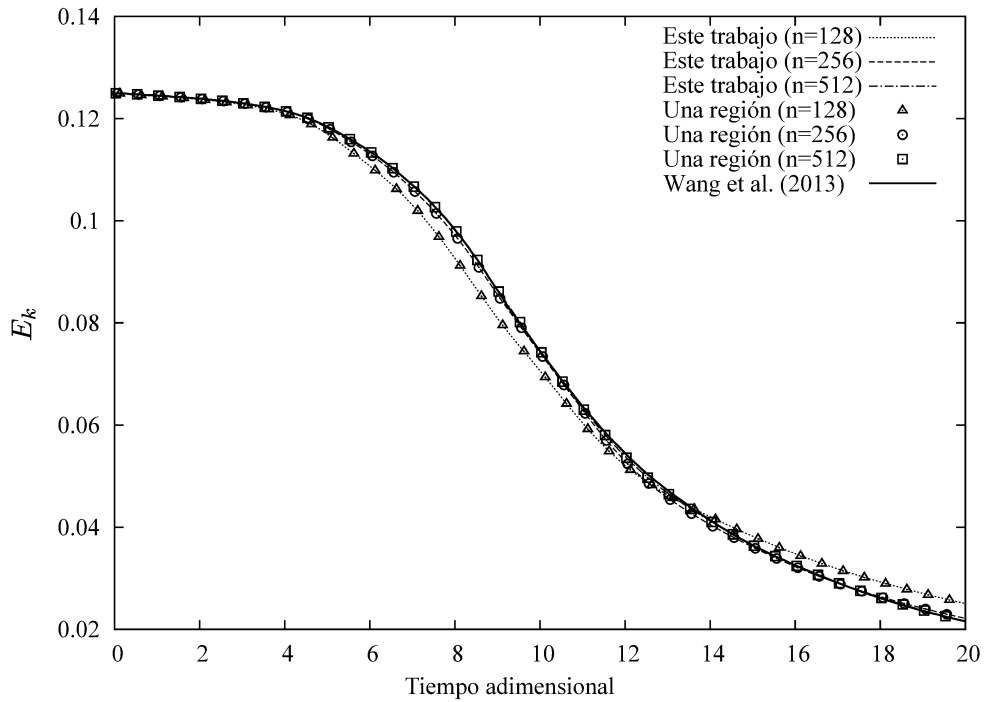


Figura 4.12: Evolución temporal de la energía cinética.

El problema está definido por medio de un flujo periódico que comienza con la siguiente condición inicial para las componentes de la velocidad y la presión,

$$\begin{aligned}
 u(x, y, z, t = 0) &= V_0 \sin\left(\frac{x}{L}\right) \cos\left(\frac{y}{L}\right) \cos\left(\frac{z}{L}\right), \\
 v(x, y, z, t = 0) &= -V_0 \cos\left(\frac{x}{L}\right) \sin\left(\frac{y}{L}\right) \cos\left(\frac{z}{L}\right), \\
 w(x, y, z, t = 0) &= 0, \\
 p(x, y, z, t = 0) &= p_0 + \frac{\rho_0 V_0^2}{16} \left[\cos\left(\frac{2x}{L}\right) + \cos\left(\frac{2y}{L}\right) \right] \left[\cos\left(\frac{2z}{L}\right) + 2 \right],
 \end{aligned} \tag{4.17}$$

donde la velocidad V_0 , la longitud característica L y la densidad de referencia ρ_0 se definen en un valor unitario y la presión con un valor nulo respectivamente. La viscosidad se configura de forma de definir un número de Reynolds igual a 1600 ($\text{Re} = V_0 L / \nu$). Se estudia la evolución temporal de la energía cinética E_k y su derivada $-dE_k/dt$ la cual representa su tasa de disipación. La energía cinética se computa según:

$$E_k = \frac{1}{\rho_0 \Omega} \int_{\Omega} \frac{1}{2} (\mathbf{U} \cdot \mathbf{U}) d\Omega, \tag{4.18}$$

siendo $\mathbf{U} = (u, v, w)$ la velocidad.

Se realiza un estudio de convergencia en malla donde los subdominios Ω_A y Ω_C se discretizan con $[n/4 \times n \times n]$ puntos por lado mientras que el sector intermedio Ω_B con $[(n/2) \times (n+1) \times (n+1)]$

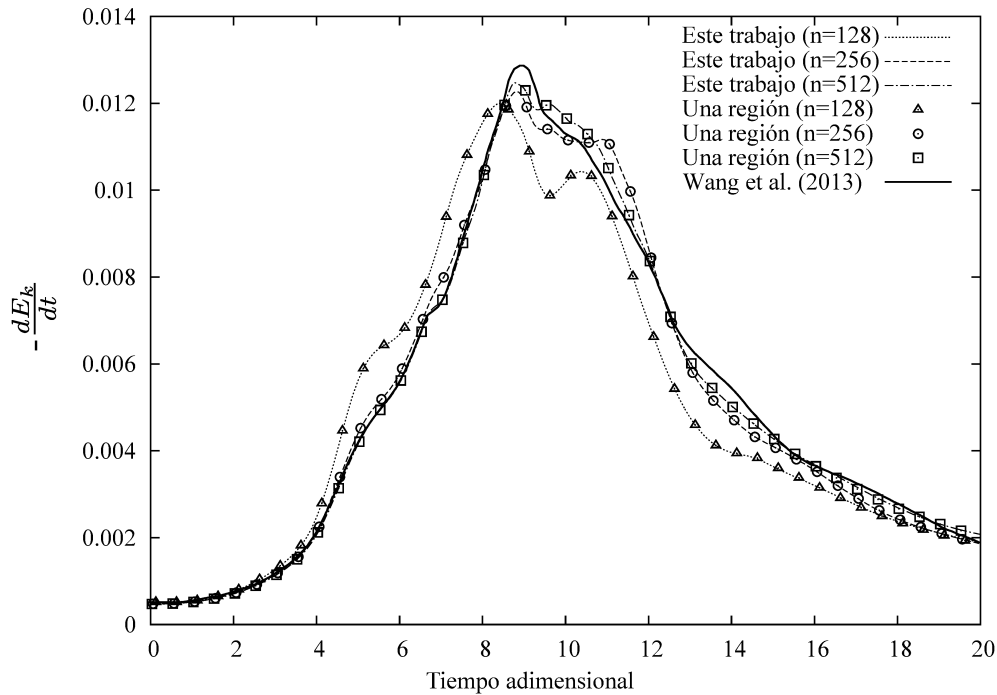


Figura 4.13: Evolución temporal de la tasa de disipación de energía cinética.

respectivamente generando mallas de superficie no conformes. De forma análoga, el problema resuelto sin interfaces se discretiza con $[n \times n \times n]$ nodos por lado. Se utiliza la misma configuración numérica utilizada en el problema de transporte del vórtice con esquemas de discretización de segundo orden para los operadores convectivos, difusivos y temporales. El valor del paso temporal Δt usado se corresponde con un número de Courant igual a 6. El problema se resuelve utilizando tres resoluciones de malla correspondientes a los valores ($n = 128$; $n = 256$ y $n = 512$). La evolución temporal de E_k y $-dE_k/dt$ se presentan en la Fig 4.12 y Fig. 4.13 respectivamente. A partir de los resultados se concluye que las interfaces de pseudo-supermalla no introducen error numérico en comparación con el problema resuelto sin interfaces (una región). Por otro lado, los resultados obtenidos demuestran un ajuste aceptable con la solución obtenida a través de un método pseudo-espectral.

4.3. Pseudo-supermallas con solapamiento parcial

La técnica de pseudo-supermalla explicada en la sección anterior está concebida para interfaces con solapamiento total en donde todas las caras de las interfaces originales se encuentran completamente solapadas por las caras de su interfaz opuesta. Para el caso de interfaces con solapamiento parcial, sus caras se clasifican en: totalmente solapadas, parcialmente solapadas y sin solapamiento. Los sectores de las interfaces que están solapados se definen como sectores acoplados. Por otro lado, los sectores sin conexión con su interfaz opuesta se denominan como sectores no acoplados. Un ejemplo con interfaces

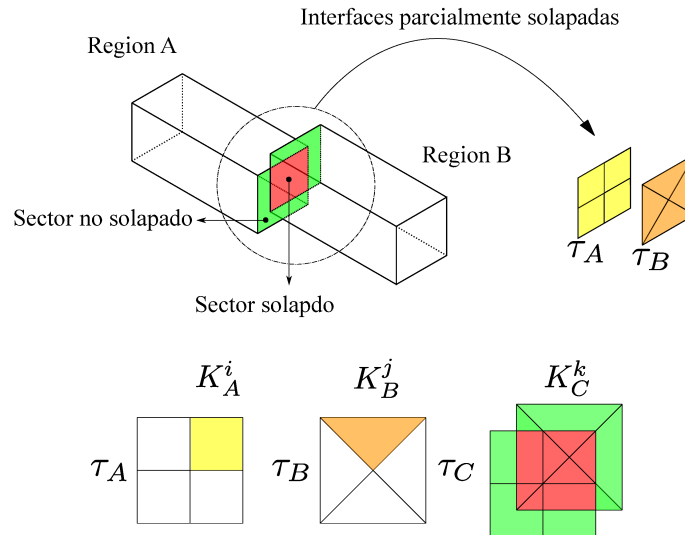


Figura 4.14: Detalle de dos subdominios con acoplamiento parcial diferenciando las zonas acopladas de las zonas no acopladas.

parcialmente solapadas se muestra en la Fig. 4.14 en donde se detalla la discretización de cada interfaz original indicando el sector acoplado y no acoplado de las interfaces.

La estrategia adoptada en este trabajo para gestionar interfaces con solapamiento parcial se basa en el método de Interfaz de Malla Acoplada Arbitraria (ACMI, por sus siglas en inglés) el cual está implementado dentro de la suite OpenFOAM(R) [57]. En esta estrategia se considera a cada una de las interfaces por medio de dos bordes que son el resultado de duplicar esa frontera. En este sentido, uno de los bordes duplicados se destina para la zona acoplada y el borde restante se utiliza para definir la condición de borde correspondiente al sector no acoplado. A estos bordes se los denomina borde “acoplado” y borde “barrera” respectivamente. En la Fig. 4.15 se muestra la definición de estos bordes para el ejemplo de la Fig. 4.14. En este sentido, las interfaces originales τ_A y τ_B se duplican respectivamente para generar las interfaces acopladas τ_{A_c} y τ_{B_c} y las interfaces barrera τ_{A_b} y τ_{B_b} .

En la propuesta de esta tesis, los bordes acoplados de la técnica de ACMI se reemplazan por interfaces de pseudo-supermalla. Conforme a esto, los bordes τ_{A_c} y τ_{B_c} se convierten en interfaces de pseudo-supermalla denominadas τ_{C_A} y τ_{C_B} respectivamente. Las definiciones de la pseudo-supermalla es solo válida para el sector acoplado donde cada cara se replica de acuerdo a su conectividad con la interfaz opuesta siendo las áreas de estas igual al área respectiva del par de caras en intersección. Por su parte, las caras de pseudo-supermalla localizadas en el sector no acoplado se configuran con área nula y no son replicadas ya que carecen de conectividad con la interfaz opuesta. A estas caras se las denomina caras de pseudo-supermalla pasivas.

El sector no acoplado es representado por las interfaces barrera las cuales se definen de la siguiente

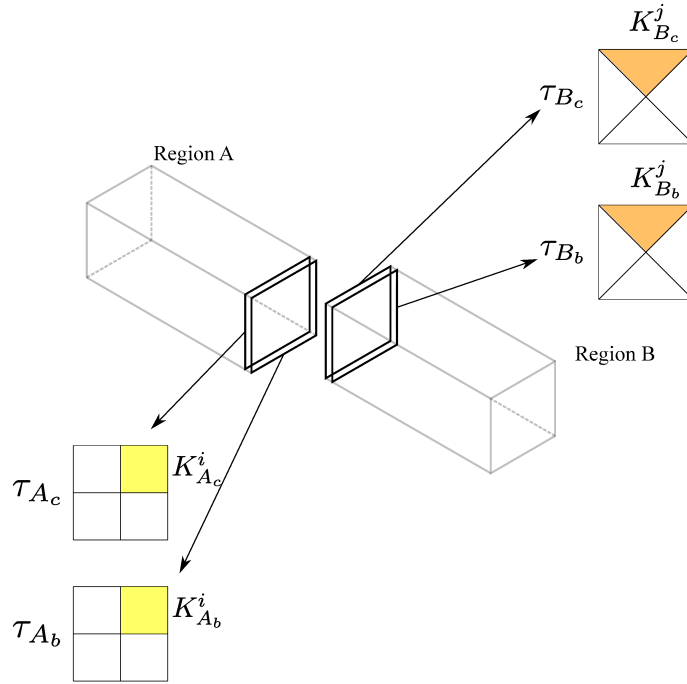


Figura 4.15: Definición dual de los bordes para resolver interfaces parcialmente acopladas.

forma:

Lado fuente: la interfaz barrera τ_{A_b} que nace a partir de $\tau_A \in \mathcal{R}^2$ con caras $K_{A_b}^i$ es una malla tal que:

- $\mathcal{N}_{A_b} = \mathcal{N}_A$
- $\forall K_A^i \in \tau_A \quad \exists! K_{A_b}^i \in \tau_{A_b} : A(K_{A_b}^i) = A(K_A^i) - \sum_j K_{C_A}^{i,j}$

Lado destino: la interfaz barrera τ_{B_b} que nace a partir de $\tau_B \in \mathcal{R}^2$ con caras $K_{B_b}^j$ es una malla tal que:

- $\mathcal{N}_{B_b} = \mathcal{N}_B$
- $\forall K_B^j \in \tau_B \quad \exists! K_{B_b}^j \in \tau_{B_b} : A(K_{B_b}^j) = A(K_B^j) - \sum_i K_{C_B}^{j,i}$

La primera igualdad afirma que los nodos de la interfaz barrera son iguales a su interfaz original. Por su lado, la segunda proposición define que para cada cara de las interfaces originales existe una única cara en la interfaz barrera siendo su área igual a la diferencia entre el área de la cara original y la suma de las áreas de las caras de pseudo-supermallas hijas de esta cara, suma que representa el sector acoplado de la cara original, o bien, el área de una cara barrera es equivalente al área del sector no acoplado de su cara original. Esto significa que si la cara del borde barrera se encuentra dentro de una zona acoplada, su área es nula siendo esta una cara de barrera pasiva. De forma contraria, si la cara de barrera de encuentra

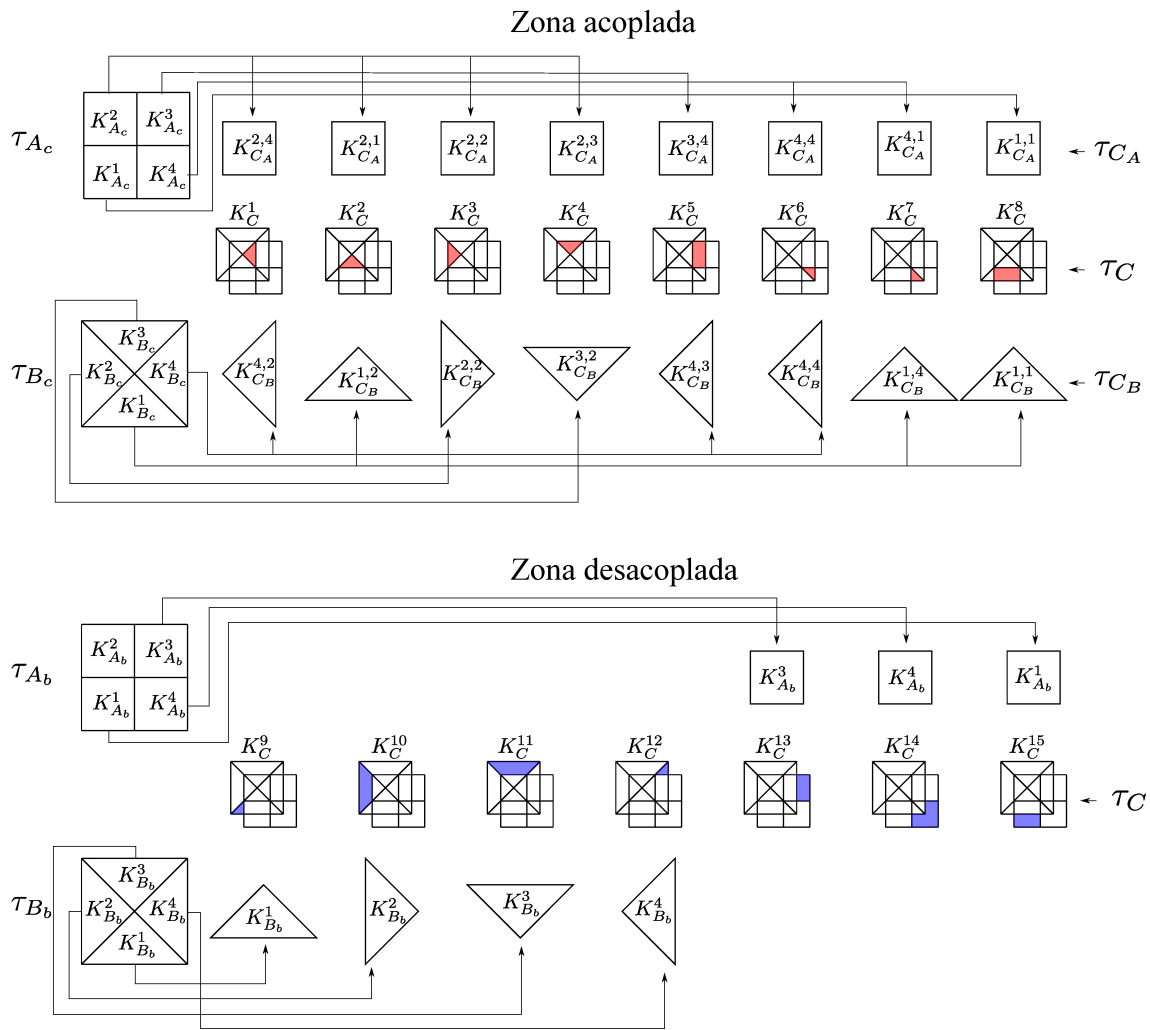


Figura 4.16: Esquema mostrando las caras de pseudo-supermalla para un par de interfaces parcialmente solapadas. En la parte superior se definen las caras de pseudo-supermalla correspondientes a la zona acoplada. En la parte inferior se muestran las caras de las interfaces barrera correspondientes al sector no acoplado.

completamente dentro de una zona no acoplada, su área es igual al área geométrica de la cara original. El caso intermedio sucede si la cara se localiza en ambas zonas siendo su área igual al sector no solapado.

Un ejemplo gráfico que muestra las interfaces de pseudo-supermalla y los bordes barrera se presenta en la Fig. 4.16 donde se detalla la técnica de pseudo-supermalla con solapamiento parcial aplicado sobre el ejemplo mostrado en la Fig. 4.14. En la Fig. 4.16 se aprecia que la intersección de las interfaces originales genera una supermalla compuesta por 15 caras de las cuales 8 (K_C^1 a K_C^8) se corresponden al sector acoplado y las restantes 7 caras (K_C^9 a K_C^{15}) se corresponden con el sector no acoplado. El grupo de caras acopladas se representan por las interfaces de pseudo-supermalla τ_{C_A} y τ_{C_B} y el restante grupo de caras no acopladas por los bordes barrera τ_{A_b} y τ_{B_b} . Es importante remarcar, que en el sector acoplado cada cara de supermalla es considerada por un par de caras de pseudo-supermalla. A diferencia de esto,

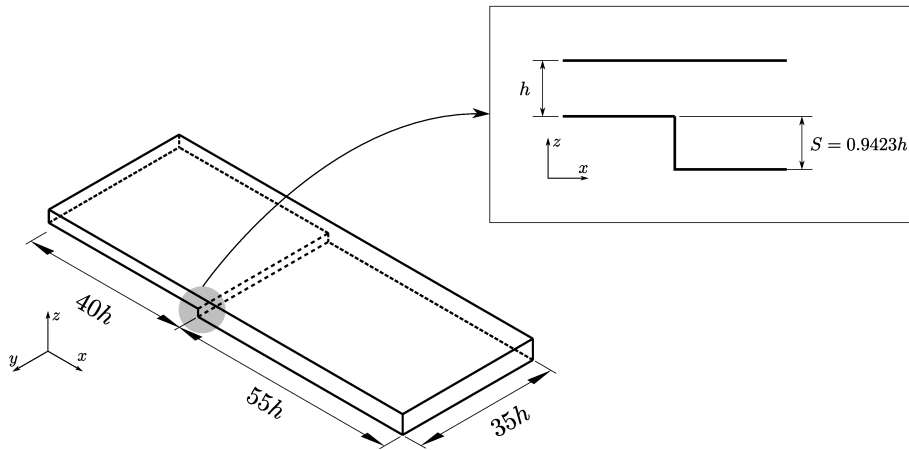


Figura 4.17: Geometría del problema del escalón descendente con sus respectivas dimensiones.

las caras de supermalla del sector no acoplado son representadas por una única cara de los bordes barrera.

4.3.1. Caso de prueba con flujo laminar

Se realiza un test de flujo laminar con separación para evaluar la técnica de pseudo-supermalla aplicada a un caso con solapamiento parcial de las interfaces. En este test, se simula el flujo en un canal que tiene un escalón descendente. Este problema fue estudiado teóricamente y experimentalmente por Armaly *et al.* [58] y a partir de este trabajo, se han contrastado múltiples soluciones numéricas con sus resultados. Algunos ejemplos son los trabajos de Chiang y Sheu [59] y Márquez y Nigro [60] los cuales son utilizados como referencia para definir la configuración del presente caso. Las dimensiones relativas de la geometría son similares a aquellas que se definen en el experimento de Armaly *et al.* especificando la longitud $h = 1$ tal como se muestra en la Fig. 4.17. La región de entrada del canal se configura con una longitud de $40h$ para asegurar que el flujo llegue totalmente desarrollado al escalón.

La interfaz se localiza en el sector del escalón separando el dominio en dos regiones. La región A incluye el sector previo al escalón el cual tiene una altura constante e igual a h . Por su lado, el sector localizado aguas abajo del escalón está comprendido por la región B, siendo su altura igual a $S + h$ (ver la Fig. 4.17). La interfaz separa ambos subdominios generando mallas de superficie no conformes con zonas acopladas y no acopladas. Esta característica se muestra en la Fig. 4.18 apreciándose un plano de corte paralelo al eje longitudinal del dominio. Los parámetros utilizados en la discretización se basan en el trabajo de Chiang y Sheu. En este test en particular se modifica el número de divisiones a lo largo de los ejes y y z con el objetivo de generar una interfaz no conforme entre los subdominios. Se define un número de Reynolds de $Re = (u_{\text{mean}} 2h/\nu) = 389$ donde $2h$ es la longitud característica, u_{mean} es la velocidad promedio de entrada y ν es la viscosidad cinemática. La configuración numérica del problema se define a continuación: el algoritmo SIMPLE propuesto por Patankar [30] se adopta para ejecutar el

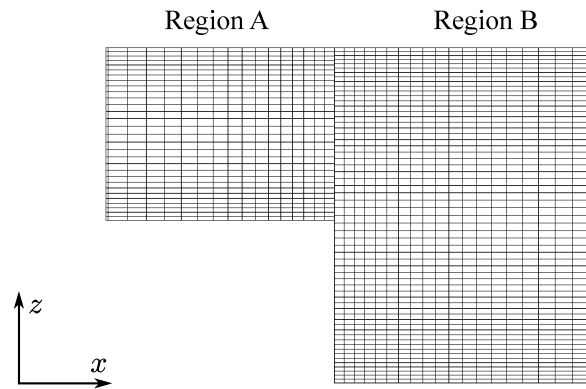


Figura 4.18: Detalle de la discretización utilizada por medio de un plano transversal al eje x centrado en la posición de la interfaz.

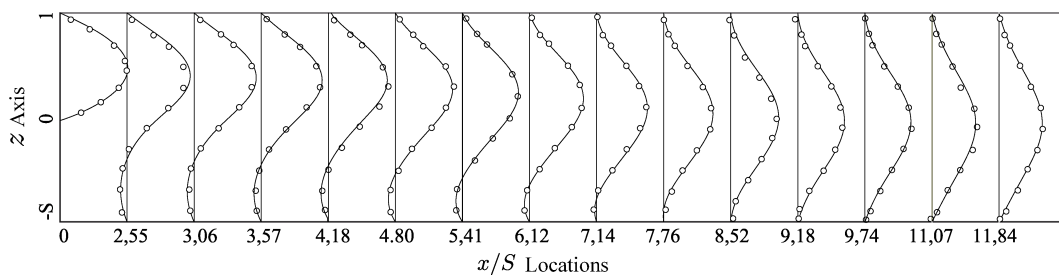


Figura 4.19: Comparación entre los resultados de la simulación (línea continua) y los datos experimentales (círculos) para un corte longitudinal del dominio coincidente con su centro geométrico. La sección transversal en $x = 0$ se ubica en el escalón coincidente con la interfaz.

acople presión-velocidad con factores de relajación 0,3 para la presión y 0,7 para la velocidad. Los términos difusivos se discretizan utilizando un esquema lineal. Para el término convectivo se emplea el método *upwind* de segundo orden [61, 62]. El gradiente de presión en la ecuación de momento se calcula con un esquema de interpolación lineal.

Para reproducir correctamente la dinámica del flujo es necesario realizar un acople preciso en la interfaz. El escalón genera gradientes de presión y recirculación del flujo que condicionan el desarrollo del problema aguas abajo. En este sentido, las interfaces de pseudo-supermallas parcialmente solapadas reproducen la característica del escalón por medio de la definición de las interfaces del tipo acoplado y barrera. El sector acoplado se representa con pseudo-supermallas que comunican físicamente ambos subdominios. Por otro lado, los bordes barrera imponen la condición de borde de pared necesaria para el escalón. Los resultados obtenidos se comparan con las mediciones experimentales presentadas por Armaly *et al.* en la Fig. 4.19. Aquí se muestran los resultados de la componente x de la velocidad evaluada en un conjunto de secciones transversales dispuestas a lo largo del eje x según las coordenadas indicadas en el sector inferior de la figura. Cada perfil se evalúa en un plano normal al eje y ubicado en el centro del dominio.

Algoritmo 2 Construcción de la pseudo-superficie τ_{C_A}

```

 $\tau_{C_A} \leftarrow \emptyset$  ▷ La interfaz de pseudo-superficie nace vacía
for  $K_A^i \in \tau_A$  do ▷ Bucle sobre todas las caras originales
  for  $K_B^j \in \chi_{AB}(K_A^i)$  do ▷ Bucle sobre cada cara en conexión con  $K_A^i$ 
     $K_{C_A}^{i,j} \leftarrow K_A^i$  ▷ Se genera una nueva cara de pseudo-superficie como copia de la cara original
     $\tau_{C_A} \leftarrow \tau_{C_A} \cup \{K_{C_A}^{i,j}\}$  ▷ Introducir la nueva cara dentro de la pseudo-superficie
  end for
end for

```

La comparación con los datos experimentales indican un buen desempeño de los resultados de la simulación. El ajuste obtenido a los perfiles de velocidad experimentales es comparable a lo reportado por Márquez Damián y Nigro [60], los cuales utilizaron una malla de una sola región. Otro punto positivo es la muy buena estabilidad y convergencia del *solver* en general la cual es comparable con un problema sin interfaces. La diferencia entre los caudales de entrada y salida son del orden de magnitud de precisión de máquina lo que prueba la conservatividad del presente método de pseudo-superficies con partes acopladas y no acopladas. Estas características diferencian a la presente estrategia del método de ACMI original con el cual se observan inestabilidades numéricas y problemas de conservación.

4.4. Implementación

En esta sección, se describen los conceptos más importantes relacionados con la implementación de la técnica de pseudo-superficie y su paralelización. También se presenta una serie de evaluaciones que demuestran la eficiencia computacional y escalabilidad de esta técnica.

4.4.1. Construcción y remoción de las pseudo-superficies

Una de las ventajas de la técnica de pseudo-superficie es su simplicidad. Las acciones principales a realizar en este método se basan en procedimientos simples que pueden ser realizados de forma independiente por cada procesador involucrado en la simulación. En particular, el proceso de generación de una pseudo-superficie consiste en replicar cada una de las caras de una interfaz un número de veces determinado por la conectividad de esta cara con las caras de la interfaz opuesta. De esta forma, se generan tantas copias de cada cara original según el número de caras de la interfaz opuesta que estén en intersección geométrica. El procedimiento de generación de caras de una pseudo-superficie se sintetiza en el Algoritmo 2. Por otro lado, el proceso de remoción de una pseudo-superficie consiste en retirar o remover de la malla cada cara que se encuentre repetida (caras generadas en el Algoritmo 2) según se sintetiza en el Algoritmo 3.

Algoritmo 3 Remoción de la pseudo-supermallla τ_{C_A}

```

 $\tau_A \leftarrow \tau_{C_A}$ 
 $\mathcal{R}_{C_A} \leftarrow \emptyset$   $\triangleright \mathcal{R}_{C_A}$  es un conjunto utilizado para aloca las caras que no se removerán
for  $K_{C_A}^{i,j} \in \tau_{C_A}$  do  $\triangleright$  Bucle por todas las caras de la pseudo-supermallla
  if  $K_{C_A}^{i,j} \notin \mathcal{R}_{C_A}$  then
     $\mathcal{R}_{C_A} \leftarrow \mathcal{R}_{C_A} \cup K_{C_A}^i$   $\triangleright$  Si la cara de turno no ha sido procesada se la introduce en  $\mathcal{R}_{C_A}$ 
  else
     $\tau_A \leftarrow \tau_A - \{K_{C_A}^{i,j}\}$   $\triangleright$  Si la cara en cuestión se encuentra presente en  $\mathcal{R}_{C_A}$ , se la elimina de la
    malla
  end if
end for

```

4.4.2. Interfaces de pseudo-supermallla en mallas dinámicas

Cuando se resuelve un problema con malla dinámica, la actualización de la malla se realiza al comienzo de cada paso de temporal para luego resolver el problema numérico sobre la malla actualizada. El listado de tareas a realizar a lo largo de la iteración se describe a continuación:

1. Se construye la supermallla local sobre las interfaces originales τ_A y τ_B para generar la lista de conectividades χ_{AB} , χ_{BA} y las áreas y centroides de las caras de la pseudo-supermallla.
2. De acuerdo a las conectividades dadas por χ_{AB} y χ_{BA} , se crean las nuevas caras de pseudo-supermallla K_{C_A} y K_{C_B} generando las interfaces τ_{C_A} y τ_{C_B} .
3. Se generan las nuevas listas de conectividades $\chi_{C_A C_B}$, $\chi_{C_B C_A}$ y $\chi_{A C_A}$, $\chi_{B C_B}$.
4. Se corrigen las áreas y centroides de las nuevas caras de pseudo-supermallla para los bordes acoplado y barrera de acuerdo a los sectores geométricos de intersección de las caras originales.
5. Se resuelve el problema numérico.
6. Se remueven las caras replicadas de las interfaces de pseudo-supermallla recuperando de esta forma las interfaces originales τ_A y τ_B .
7. Se actualiza la malla generando un nuevo estado de las interfaces originales definidos como τ'_A y τ'_B .
8. El algoritmo comienza nuevamente desde el primer paso partiendo con las nuevas interfaces. ($\tau'_A \rightarrow \tau_A$ and $\tau'_B \rightarrow \tau_B$).

Este algoritmo se explica gráficamente en la Fig. 4.20.

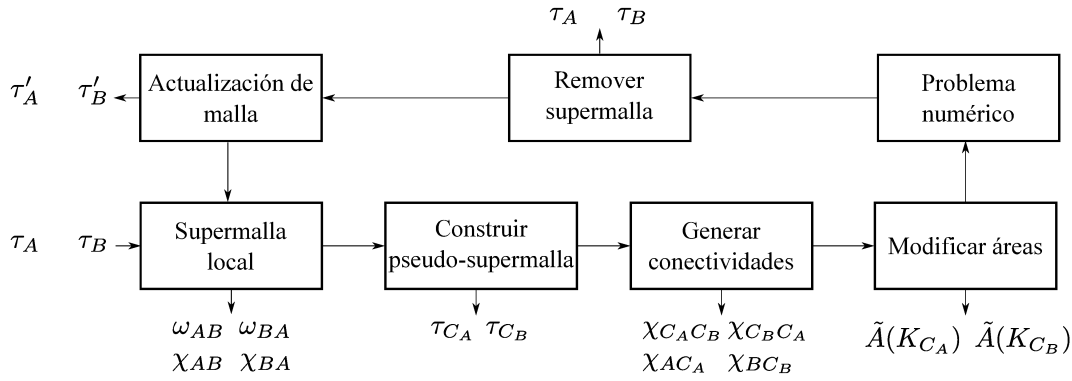


Figura 4.20: Pasos a realizar en una simulación de con mallas dinámicas aplicando la técnica de pseudo-supermalla.

4.4.3. La técnica de pseudo-supermalla en paralelo

La estrategia de pseudo-supermalla se implementa en paralelo por medio de una arquitectura de memoria distribuida por medio del protocolo MPI (*Message Passing Interface*).

Uno de los objetivos de cualquier implementación en paralelo es evitar cualquier restricción geométrica que dificulte el proceso de descomposición de dominios. En esta implementación se tiene la libertad de que las interfaces fuente y destino puedan pertenecer a un mismo procesador o no, y además, cada interfaz de pseudo-supermalla (cada lado) se puede distribuir en múltiples procesadores.

Es valioso aclarar que en la simulación de turbomaquinarias es necesario que la técnica de interfaz admita que las caras de ambas interfaces estén distribuidas en diferentes procesadores, ya que el movimiento de rotación de estas máquinas generará variación de la conectividad entre rotor y estator. Por otro lado, si la interfaz se aloca en un único procesador se inducirá un desbalance de carga.

En la Fig. 4.21 se presentan dos ejemplos en donde un dominio se particiona en ocho procesadores utilizando diferentes esquemas respectivamente. En el ejemplo (a), la pseudo-supermalla se divide en ocho partes con la particularidad de que cada procesador posee una porción de las interfaces fuente y destino. En este caso, la construcción de las pseudo-supermallas y el acople numérico entre ellas se realiza sin comunicación entre los procesadores. Por otro lado, en el ejemplo (b), la interfaz se divide en cuatro porciones donde cada procesador contiene la interfaz destino o bien, la interfaz fuente. En consecuencia, es necesario realizar comunicaciones entre los procesadores de forma de ejecutar el algoritmo de supermalla local, construir las pseudo-supermallas y realizar el acople numérico. Ambos ejemplos representan los casos extremos de mínima y máxima comunicación entre procesadores.

Para evaluar la escalabilidad de la implementación en paralelo se realiza una prueba en donde se mide el tiempo requerido para construir y remover las interfaces de pseudo-supermalla. Se utilizan dos esquemas los cuales se muestran en la Fig. 4.21. El caso (b) de esta figura puede minimizar la comunicación

entre procesadores dependiendo de la relación de aspecto del dominio. El tiempo de cómputo resultante se grafica contra el número de procesadores utilizados en la Fig. 4.22. Los resultados muestran una eficiencia del cómputo en paralelo superior al 80 %.

Implementación

A continuación se presentan los pasos más importantes involucrados en la implementación en paralelo de la estrategia de pseudo-supermalla. Los pasos aquí descritos solo se refieren a la construcción de la interfaz de pseudo-supermalla. El manejo paralelizado de la malla y la resolución de las ecuaciones de gobierno están excluidos de la siguiente lista:

1. Cada procesador remueve sus caras de pseudo-supermalla recuperando de esta forma la configuración original de las interfaces (remoción de las pseudo-supermallas).
2. Cada procesador recibe de los restantes procesadores aquellas caras destino que están ubicadas dentro de los límites determinados por sus caras fuente (comunicación de las caras destino).
3. Aquellos procesadores que contienen caras fuente (y caras destino debido al paso anterior) ejecutan el proceso de supermalla local definiendo listas locales de conectividad y áreas y centroides de la supermalla. Los procesadores que no contienen caras fuente están ociosos en este paso (supermalla local).
4. Las listas de conectividades y la información geométrica de áreas y centroides se envían a todos los procesadores. Se crean mapas que relacionan los procesadores con el fin de efectuar futuras comunicaciones (comunicación de supermalla local).
5. Cada procesador crea e introduce dentro de la malla sus nuevas caras de pseudo-supermalla. Se

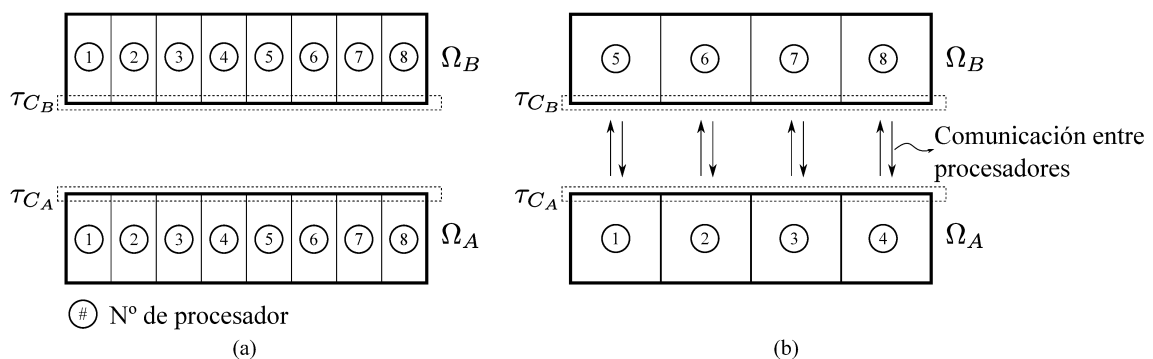


Figura 4.21: Dos esquemas de particionamiento del dominio. Ambos casos están descompuestos en ocho subdominios pero mediante diferentes esquemas; (a) particionamiento sin comunicación entre procesadores; (b) particionamiento con un máximo requerimiento de comunicación entre procesadores.

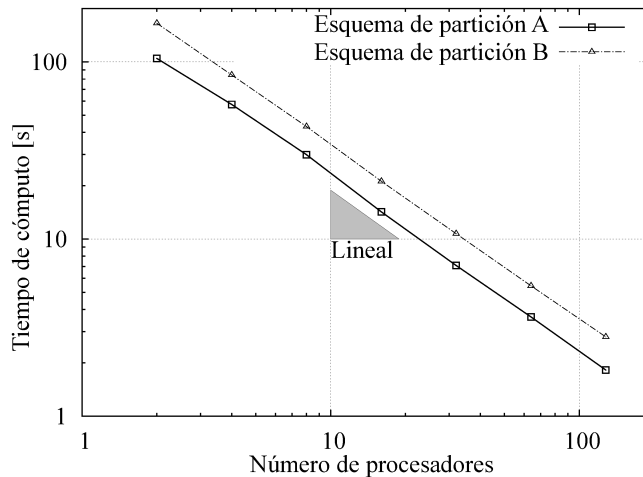


Figura 4.22: Evaluación de las interfaces de pseudo-supermalla en cómputo paralelo. Se grafica el tiempo de cómputo de dos esquemas de particionamiento con mínima (esquema A) y máxima (esquema B) comunicación entre procesadores según el número de procesadores. Las pruebas se realizan con un clúster compuesto por procesadores Intel(R) Xeon(R) E5-1620 v2 conectados con una red infiniband QDR.

crean mapas que relacionan las nuevas caras con las caras originales (construcción de las pseudo-supermallas).

6. Los mapas entre índices de caras determinados en el paso anterior se envían a todos los procesadores (comunicación de mapas).
7. Cada procesador genera sus nuevas listas de conectividades relacionando las conectividades originales mediante los mapas de caras (conectividad de pseudo-supermalla).
8. Las nuevas conectividades y la información geométrica se envían a todos los procesadores. Se actualizan los nuevos mapas de conectividades para futuras comunicaciones (comunicación de pseudo-supermalla).

Los pasos 1,3,5 y 7 se paralelizan de forma trivial sin necesidad de realizar comunicaciones entre procesadores. Por el contrario, los pasos 2,3,6 y 8 requieren comunicación y no son necesarios cuando se simula con un solo procesador (modo serial). Sin embargo, el total del tiempo consumido por estos pasos es de menor orden de magnitud tal como se muestra en la Tabla 4.1 la cual muestra el tiempo relativo que consume cada paso de la implementación en paralelo. De la Tabla 4.1 se concluye que los pasos 1,3,5 y 7 consumen el 90,4 por ciento del tiempo total. Un detalle importante es que la supermalla local (etapa 3) se computa solamente con los procesadores que poseen caras fuentes. Bajo este concepto, es recomendable distribuir el total de las caras fuente sobre todos los procesadores para balancear de forma óptima el algoritmo. La incidencia de este punto se aprecia claramente en la Fig. 4.22 donde el esquema de particionamiento A tiene mejor rendimiento que el esquema B.

Etapa	Tiempo relativo [%]
(1) Remoción de las pseudo-supermallas	24,9
(2) Comunicación de las caras destino	2,6
(3) Supermalla local	39,9
(4) Comunicación de supermalla local	2,1
(5) Construcción de las pseudo-supermallas	24,5
(6) Comunicación de mapas	1,3
(7) Conectividad de pseudo-supermalla	1,4
(8) Comunicación de pseudo-supermalla	3,3

Cuadro 4.1: Tiempo relativo que requiere cada etapa de la implementación en paralelo utilizando el esquema de particionamiento A y dos procesadores.

4.4.4. Eficiencia computacional

Se realiza un ensayo para evaluar el costo computacional del algoritmo propuesto en función del número total de caras de las interfaces originales. Se definen dos pruebas: la primera consiste en medir el tiempo computacional requerido para acoplar y desacoplar dos interfaces planas y estáticas las cuales se malla con interfaces no conformes. Por otro lado, en el segundo ensayo se desarrolla una simulación de malla dinámica en donde se tienen interfaces cilíndricas propias de una configuración rotor-estator. En este caso se analiza el tiempo computacional requerido para completar una revolución completa del rotor la cual se discretiza utilizando 10 pasos temporales. En cada paso de tiempo, las interfaces se acoplan y desacoplan. Una descripción gráfica de los ensayos y sus respectivos resultados se muestran en la Figs 4.23 y 4.24 respectivamente. Como referencia, se evalúa una implementación particular del método de “Sliding Interfaces” [10, 21, 11].¹ La eficiencia del método de pseudo-supermalla escala linealmente con el tamaño de la interfaz. En este contexto, se mantiene el orden original del algoritmo de supermalla local. Además, cuando las interfaces tienen un elevado número de caras, la implementación de pseudo-supermalla es un orden de magnitud más rápido que la respectiva del método utilizado como referencia. Es necesario aclarar que en el caso de las interfaces cilíndricas, las normales de ambas interfaces asociadas a cada conexión uno-a-uno de las caras son iguales. Por lo tanto, si bien la discretización de las interfaces originales presentan diferentes normales para un mismo punto de la interfaz cilíndrica, las caras de pseudo-supermalla comparten los vectores de área.

4.4.5. Ventajas del método de pseudo-supermalla

En referencia a la eficiencia computacional, la principal ventaja de la estrategia de pseudo-supermalla es que los nodos y caras de las interfaces originales se conservan en cada evento de construcción de

¹La denominación “sliding interfaces” y “sliding meshes” son comúnmente utilizadas para describir el ámbito general de estas estrategias. Para este caso, “Sliding Interfaces” es el nombre de una técnica en particular la cual está incluida en este grupo de metodologías.

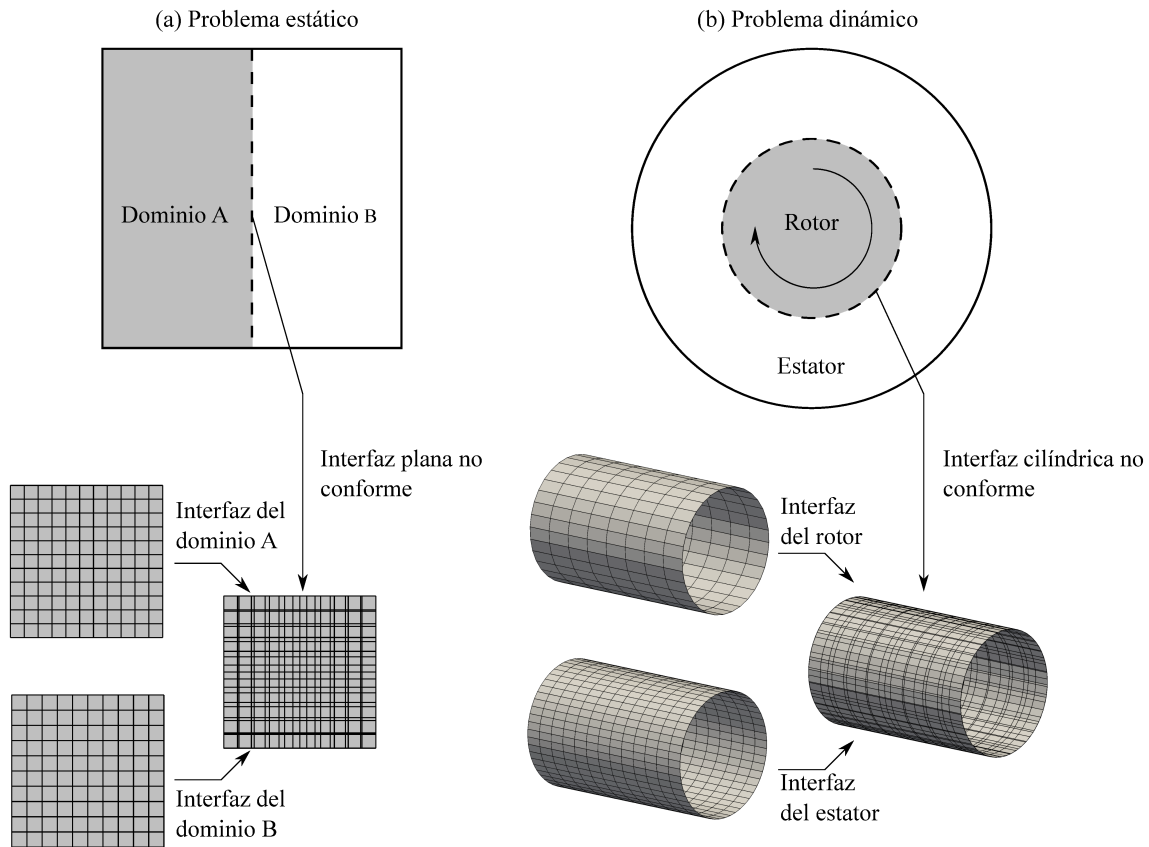


Figura 4.23: Descripción de los ejemplos usados para evaluar la eficiencia computacional: (a) ensayo estático con interfaces planas no conformes; (b) ensayo dinámico con interfaces cilíndricas no conformes.

las pseudo-supermallas. Esta característica es beneficiosa para optimizar el costo computacional y para ahorrar espacio en memoria. Con la estrategia de pseudo-supermallas se evita realizar muchos cálculos

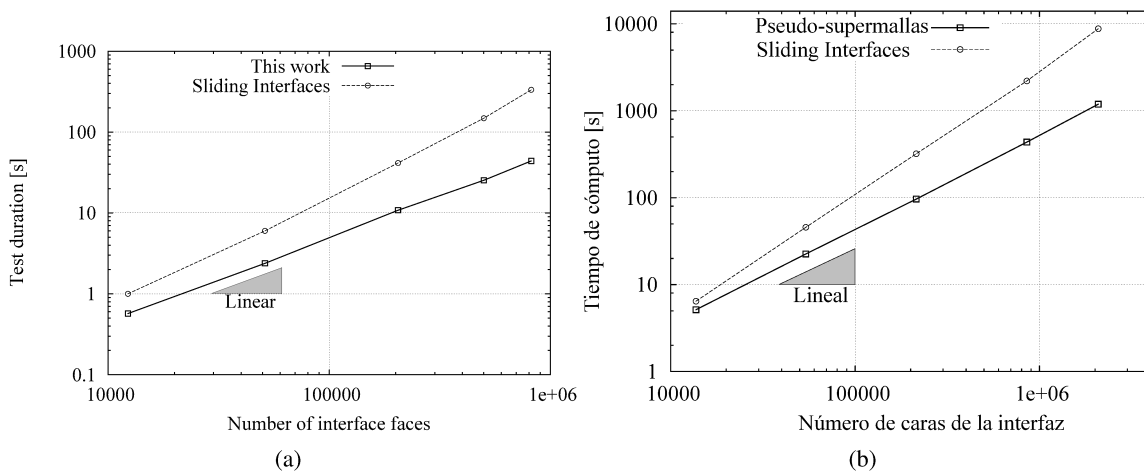


Figura 4.24: Tiempo de cómputo requerido para acoplar las interfaces en función del número de caras de la interfaz: (a) problema estático; (b) problema dinámico. Ambos problemas se resolvieron en modo serial utilizando un CPU modelo i7-3770K.

que sí son necesarios para definir una supermalla según la Ec. (4.1). En el caso de construir una supermalla completa, los nodos resultantes de la intersección de triángulos descrita en la Fig. (4.1) se deben ordenar apropiadamente para definir un polígono válido. Luego, los índices de los nodos de supermalla que existen en las interfaces originales se deben reindexar de acuerdo a la nueva conectividad. Por otro lado, los nuevos nodos que se introducen en la malla deben ser luego removidos al momento de recuperar las interfaces originales. Otro proceso necesario es que cada cara de la supermalla se debe definir explícitamente por medio de los nuevos nodos de malla lo cual implica modificar las caras originales. De manera contraria, el método de pseudo-supermalla reutiliza las caras originales como nuevas caras de la pseudo-supermalla sin necesidad de modificar su definición. Por ejemplo, la cantidad de caras que se reutilizan al momento de construir la pseudo-supermalla es del orden del 25 – 50 % dependiendo de la conectividad de la interfaz.

Adicionalmente a la comparación que se muestra en la Fig. 4.24, se realiza un nuevo ensayo con el fin de evaluar la eficiencia computacional del algoritmo de pseudo-supermalla. En este nuevo problema, se mide el tiempo computacional requerido para introducir nuevos nodos en la malla tal cual se realiza en el caso de construir una supermalla completa. En este sentido, se utiliza una versión modificada de la implementación de pseudo-supermalla la cual genera nuevos nodos de malla para cada cara replicada. Estos nodos se deben generar e introducir dentro de la malla y se los introduce en cada una de las caras que estos definen. En contraste con la comparación efectuada previamente, los métodos comparados en este análisis usan una implementación idéntica exceptuando aquella que genera nuevos nodos en vez de reutilizarlos.

Las características de la prueba son análogas al problema estático mostrado en la Fig. 4.24 (a). En este caso, ambas interfaces son de aproximadamente 3 millones de caras las cuales se acoplan y desacoplan. El resultado de la prueba indica que la implementación que introduce nuevos nodos en la malla tiene un requerimiento adicional de tiempo computacional de aproximadamente un 30 %. Si se consideran todos los pasos requeridos para construir una supermalla completa el test requerirá aún más tiempo en completarse.

Capítulo 5

Estrategia de remallado utilizando adición y remoción de capas

5.1. Introducción

Este capítulo estudia una técnica de remallado denominada *layering* la cual se utiliza en problemas con dominios que experimentan grandes deformaciones de volumen. La técnica está especialmente concebida para trabajar con geometrías logradas por medio de la extrusión de una figura bidimensional arbitraria a lo largo de un eje directriz. De forma similar, estos dominios se discretizan extruyendo una malla bidimensional y dividiéndola en una serie de capas o *layers* generando una malla estructurada en la dirección de extrusión. La Fig. 5.1 muestra de forma conceptual la generación de la geometría y correspondiente discretización de un problema de *layering*.

La técnica funciona removiendo o agregando nuevas capas sobre la malla a medida que el dominio se

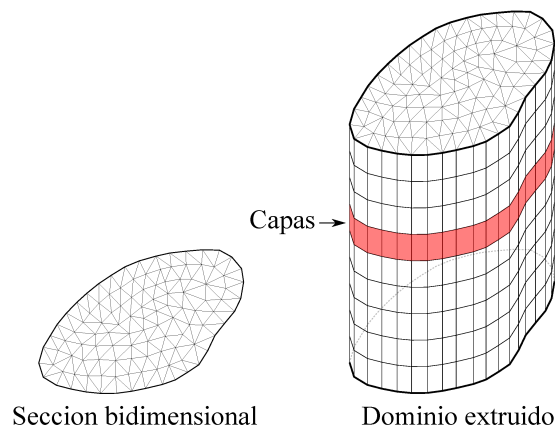


Figura 5.1: Extrusión de un dominio bidimensional y su discretización generando un dominio tridimensional discretizado con una sucesión de capas o *layers* de una malla bidimensional.

contrae o expande respectivamente. El movimiento se realiza mediante un conjunto de caras denominados como “frente de avance de *layering*” o simplemente “frente de avance”. Si bien este frente puede definirse sobre la frontera del dominio, en general se lo define sobre un grupo de caras internas comunes a dos capas de celdas. Una de estas capas se contrae o expande debido al movimiento del frente de avance mientras que la otra capa de celdas adyacentes se mueve de forma rígida acompañando al frente de avance. En consecuencia, el frente de avance separa el dominio en una zona de movimiento rígido o zona libre de *layering* y en otra zona donde se agregan o remueven capas de celdas, la cual se la denomina como zona de *layering*.

El agregado y remoción de una capa de celdas se decide a partir de evaluar la altura de la capa de celdas que se deforma. Su altura h se calcula como el cociente entre el volumen de una de sus celdas V y el área de la cara perteneciente al frente de avance A , $h = V/A$. Si esta altura h es menor a un valor admisible, la capa se remueve, por otro lado, si la altura h es superior al tamaño admisible, entonces se agrega una nueva capa de celdas en la malla. Los tamaños admisibles se definen por medio de tolerancias de remoción y tolerancias de adición. En particular, para el caso de la adición se tiene un parámetro adicional que es el tamaño que define la nueva capa.

La técnica de *layering* es utilizada principalmente en problemas relacionados a ICE. Ejemplos de aplicación se pueden encontrar en los trabajos de maestrías de Vissers, Johnsson y Gundmalm [63, 64, 65]. También existen aplicaciones de esta técnica sobre diversos problemas ajenos al ámbito de los ICE. Una de ellas se presenta en el trabajo de Huang *et al.* [66] en donde se resuelve el flujo de aire en un túnel que reduce su volumen debido al avance de un tren. Otra aplicación de esta técnica es descripta en el paper de Jia y Zhang [67] en donde se resuelve la deformación de una burbuja por medio de la adición y remoción de capas para representar su decrecimiento o crecimiento. Finalmente se menciona el trabajo de Qin y Zhang [68] quienes resuelven el viaje de un proyectil dentro de una vaina utilizando *layering*.

5.2. Formulación ALE en dominios con cambios topológicos

La ley de conservación del espacio se satisface de forma directa en problemas dinámicos donde la topología de la malla es constante, es decir, donde el número de puntos, caras y celdas y su conectividad permanecen constantes. En estos casos, lo único que se modifica en la malla son las coordenadas de sus nodos lo que provoca cambios de geometría en caras y celdas. En este contexto, la conservación del espacio definida en la Ec. (2.42) se satisface de forma natural ya que la sumatoria del volumen barrido por las caras de una celda es igual a la variación del volumen de esta. En problemas con cambios topológicos de malla, el número de celdas y caras es variable en el tiempo por lo cual no se pueden computar de forma directa los cambios en los volúmenes de las celdas y los volúmenes barridos por las caras. Por

lo tanto, es necesario realizar un mapeo de cantidades geométricas de forma de obtener los volúmenes y flujos de malla necesarios para un correcto balance dentro de una formulación ALE. A continuación se representa de forma simbólica la evolución temporal de un problema de malla dinámica en donde un dominio Ω_I se transforma en otro con diferente topología Ω_{II} entre los pasos temporales $t^{(n-1)}$ y $t^{(n)}$,

$$\Omega_I^{n-2} \rightarrow \Omega_I^{n-1} \rightarrow \Omega_{II}^n. \quad (5.1)$$

Para resolver cualquier balance por el método de los volúmenes finitos es necesario trabajar sobre la misma topología en todos los instantes temporales. De esta forma, se pueden discretizar las derivadas temporales sobre los mismos volúmenes de control. En tal sentido, suponiendo un esquema de discretización temporal de primer orden se debe realizar una transformación de topología en la evolución temporal definida por la Ec. (5.1),

$$\Omega_I^{n-2} \rightarrow \Omega_I^{n-1} \leftrightarrow \Omega_{II}^{n-1} \rightarrow \Omega_{II}^n. \quad (5.2)$$

En esta última ecuación se define una transformación topológica del dominio denotada como $\Omega_I^{n-1} \leftrightarrow \Omega_{II}^{n-1}$. Para esta transformación se plantean ecuaciones de conservación del volumen total del dominio y de todas las cantidades extensivas definidas sobre este,

$$\begin{aligned} \sum_{P \in \Omega_I^{n-1}} V_P^{n-1} &= \sum_{P \in \Omega_{II}^{n-1}} V_P^{n-1} \\ \sum_{P \in \Omega_I^{n-1}} \psi_P^{n-1} V_P^{n-1} &= \sum_{P \in \Omega_{II}^{n-1}} \psi_P^{n-1} V_P^{n-1}, \end{aligned} \quad (5.3)$$

donde ψ representa cualquier variable intensiva arbitraria. Una vez realizada el traspaso de volúmenes y campos entre ambas topologías se debe realizar la transformación $\Omega_{II}^n \rightarrow \Omega_I^{n-1}$ mediante movimientos de los nodos de la malla de forma de poder calcular los flujos de malla. A continuación se explica la aplicación de los mapeos definidos en la Ec. (5.3) para los casos de adición y remoción de capas de celdas en la técnica de *layering*.

5.2.1. Remoción de capas

Un ejemplo de remoción se presenta en la Fig. (5.2) donde el dominio sufre la remoción de una capa de celdas en la transformación $\Omega_I^{n-1} \rightarrow \Omega_{II}^n$. Teniendo en cuenta lo expuesto anteriormente, se debe representar el dominio Ω^{n-1} con una capa de celdas menos. Existen infinitas posibilidades para realizar esta transformación. En particular, en la presente implementación, se considera que la remoción de la capa de celdas es equivalente a fusionar dos capas de celdas adyacentes al frente móvil dejando

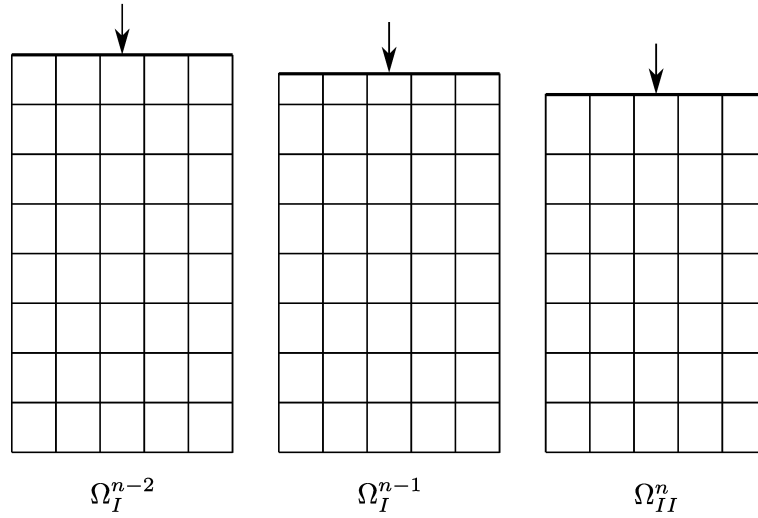


Figura 5.2: Ejemplo de remoción de una capa de celdas

el resto de las capas sin modificaciones. En estos casos, el dominio se puede dividir en dos grupos de celdas. Por un lado se define el grupo de celdas que permanecen inalteradas en el proceso de remoción el cual se denomina como $\Omega_U \in \Omega$, y por otro lado se define el grupo de celdas modificadas como $\Omega_M \in \Omega$, verificándose $\Omega_U \cup \Omega_M = \Omega$. Para realizar traspaso de cantidades dado en la Ec. (5.3) se definen dos mapas que relacionan las celdas entre los dominios con topologías diferentes. El primer mapa denominado \mathcal{R}_A relaciona las celdas de ambos dominios que no se modifican,

$$\mathcal{R}_A(P_{II}) = \{P_I \in \Omega_I : P_I = P_{II}\}. \quad \forall P_{II} \in \Omega_{U_{II}}. \quad (5.4)$$

Por otro lado, el segundo mapa \mathcal{R}_B relaciona las celdas de Ω_{II} con el par correspondiente en Ω_I tal que haya intersección volumétrica entre ellas,

$$\mathcal{R}_B(P_{II}) = \{P_I \in \Omega_I : V_{P_{II}} \cap V_{P_I} = V_{P_I}\} \quad \forall P_{II} \in \Omega_{M_{II}}. \quad (5.5)$$

La transformación de topología del dominio con sus respectivos mapas se muestran en la Fig. 5.3 donde se clarifica el grupo de celdas que se mantiene constante y el par de capas adyacentes que se fusionan. Usando estas definiciones, las ecuaciones de conservación planteadas en (5.3) se satisfacen de forma trivial para aquellas capas que no se modifican,

$$\begin{aligned} V_{P_{II}} &= V_{P_I} \Big|_{P_I \in \mathcal{R}_A(P_{II})} \quad \forall P_{II} \in \Omega_U \\ \psi_{P_{II}} &= \psi_{P_I} \Big|_{P_I \in \mathcal{R}_A(P_{II})} \quad \forall P_{II} \in \Omega_U, \end{aligned} \quad (5.6)$$

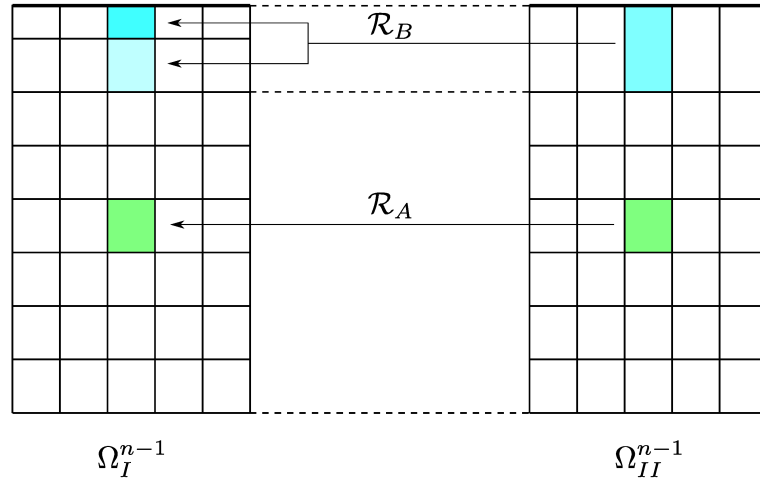


Figura 5.3: Explicación de los mapas para el caso de remoción de una capa de celdas.

y para la capa de celdas adyacente al frente móvil se consideran los valores respectivos al par de capas fusionadas,

$$\begin{aligned}
 V_{P_{II}} &= \sum_{P_I \in \mathcal{R}_B(P_{II})} V_{P_I} \quad \forall P_{II} \in \Omega_M \\
 \psi_{P_{II}} &= \frac{\sum_{P_I \in \mathcal{R}_A(P_{II})} \psi_{P_I} V_{P_I}}{V_{P_{II}}} \quad \forall P_{II} \in \Omega_M.
 \end{aligned} \tag{5.7}$$

Se debe notar que las relaciones planteadas en las ecuaciones (5.6) y (5.7) satisfacen de forma local la conservación de volumen y cantidades extensivas para la transformación $\Omega_I \rightarrow \Omega_{II}$ por lo que son una condición suficiente para satisfacer la conservación global definida en la Ec. (5.3).

Flujos de malla: En el caso de la remoción de una capa de celdas, todas las caras del dominio Ω_{II} existen en el estado previo Ω_I . Esta relación uno a uno entre las caras de los dominios se define mediante el mapa \mathcal{R}_C ,

$$\mathcal{R}_C(K_{II}) = \{K_I \in \Omega_I : K_I = K_{II}\} \quad \forall K_{II} \in \Omega_{II} \tag{5.8}$$

Por lo tanto, los flujos de mallas definidos sobre las caras del dominio Ω_I se traspasan de forma trivial sobre las caras del dominio Ω_{II} ,

$$\varphi_{K_{II}} = \varphi_{K_I}|_{K_I \in \mathcal{R}_C(K_{II})} \tag{5.9}$$

5.2.2. Adición de capas

Un ejemplo de adición se presenta en la Fig 5.4 donde el dominio del problema experimenta la adición de una nueva capa de celdas en la transformación $\Omega_I^{n-1} \rightarrow \Omega_{II}^n$. De la misma forma que se planteó para el caso de remoción, el dominio se divide por medio de dos grupos de celdas: Ω_U , que contiene las

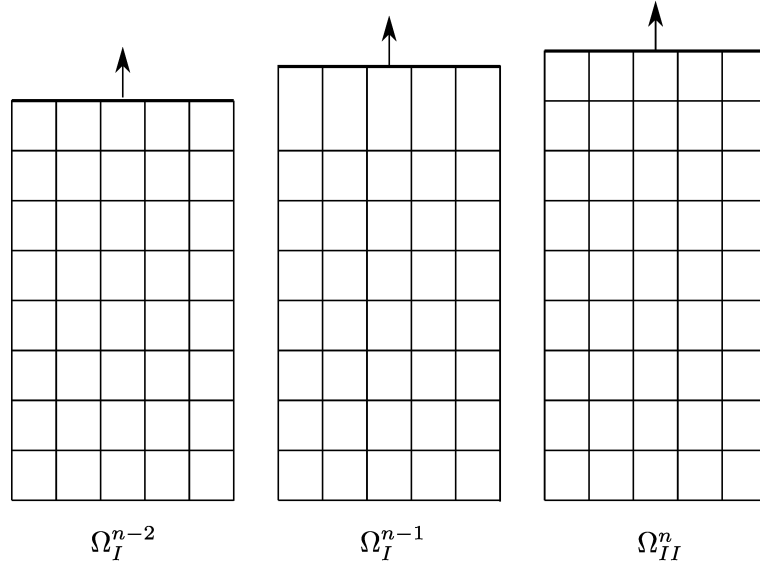


Figura 5.4: Ejemplo de adición de una capa de celdas

celdas que no se modifican en la transformación topológica y Ω_M , que contiene a las celdas de la nueva capa. Se debe representar el estado Ω^{n-1} con una nueva capa de celdas. En la presente técnica, la nueva capa de celdas se inserta en el dominio Ω^{n-1} como un grupo de celdas con volumen nulo. Es decir, la adición de la nueva capa de celdas se construye duplicando las caras del frente de avance lo que genera una capa de celdas sin espesor. Debido a esto, todas las celdas existentes permanecen inalteradas en la transformación las cuales se vinculan por el mapa trivial \mathcal{A}_A ,

$$\mathcal{A}_A(P_{II}) = \{P_I \in \Omega_I : P_{II} = P_I\} \quad \forall P_{II} \in \Omega_{U_{II}}. \quad (5.10)$$

Por otro lado, se considera un segundo mapa \mathcal{A}_B el cual es vacío ya que las celdas P_{II} con volumen nulo en la topología Ω_{II} no existían en la Ω_I ,

$$\mathcal{A}_B(P_{II}) = \{\} \quad \forall P_{II} \in \Omega_{M_{II}}. \quad (5.11)$$

En la Fig 5.5 se esquematiza la conversión topológica para el caso de la adición de una capa de celdas. Teniendo en cuenta las celdas que permanecen inalteradas las expresiones dadas en (5.3) se satisfacen de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} V_{P_{II}} &= V_{P_I} |_{P_I \in \mathcal{A}_A(P_{II})} \quad \forall P_{II} \in \Omega_U \\ \psi_{P_{II}} &= \psi_{P_I} |_{P_I \in \mathcal{A}_A(P_{II})} \quad \forall P_{II} \in \Omega_U, \end{aligned} \quad (5.12)$$

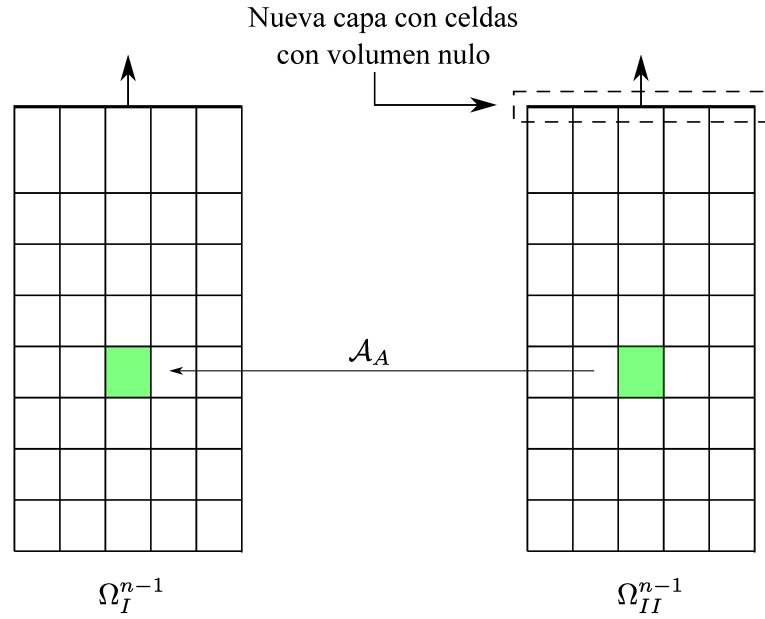


Figura 5.5: Explicación gráfica del mapa \mathcal{A}_A para el caso de la adición de una nueva capa de celdas.

por otro lado las celdas que nacen con volumen nulo ($V_{P_{II}} = 0$) y la definición del valor de $\psi_{P_{II}}$ en ellas es irrelevante debido a que las cantidades extensivas en esas celdas es nula debido a su volumen nulo.

Mapeo de los flujos de malla Cuando se adiciona una nueva capa de celdas, el dominio contiene un nuevo grupo de caras. A su vez, este grupo de caras se subdivide en dos subgrupos los cuales se los define en los conjuntos $K_N \in \mathcal{F}_N$ y $K_S \in \mathcal{F}_S$ que representan las caras normales y tangentes a la dirección del movimiento respectivamente. Por otro lado, el resto de las caras permanece sin modificaciones. Las caras pertenecientes al frente de avance de *layering* se agrupan en el conjunto $K_L \in \mathcal{F}_L$ mientras que el resto de las caras se agrupan en el grupo $K_U \in \mathcal{F}_U$. Para más claridad, la subdivisión de caras propuesta se presenta en la Fig. 5.6.

Las caras del conjunto \mathcal{F}_N se ubican en la misma posición que las caras del frente de avance \mathcal{F}_L pero orientadas de forma opuesta generando celdas con volumen nulo. Durante la transformación $\Omega_{II}^{(n-1)} \rightarrow \Omega_{II}^{(n)}$ se considera que las caras K_N se mueven de forma idéntica a las caras K_L y por lo tanto, las celdas con volumen nulo se mueven de forma rígida. La determinación del flujo de malla para las caras K_N se define mediante el mapa \mathcal{A}_C que relaciona cada cara del conjunto \mathcal{F}_N con su equivalente en el frente de avance \mathcal{F}_L .

$$\mathcal{A}_C(K_{N_{II}}) = \{K_{L_I} \in \mathcal{F}_{L_I} : K_{L_I} = -K_{N_{II}}\}, \quad \forall K_{N_{II}} \in \mathcal{F}_{N_{II}} \quad (5.13)$$

en donde el signo negativo significa que las caras están determinadas por los mismos puntos pero orientados de forma opuesta. A la denominación de las caras y conjuntos se les agrega el subíndice I o II

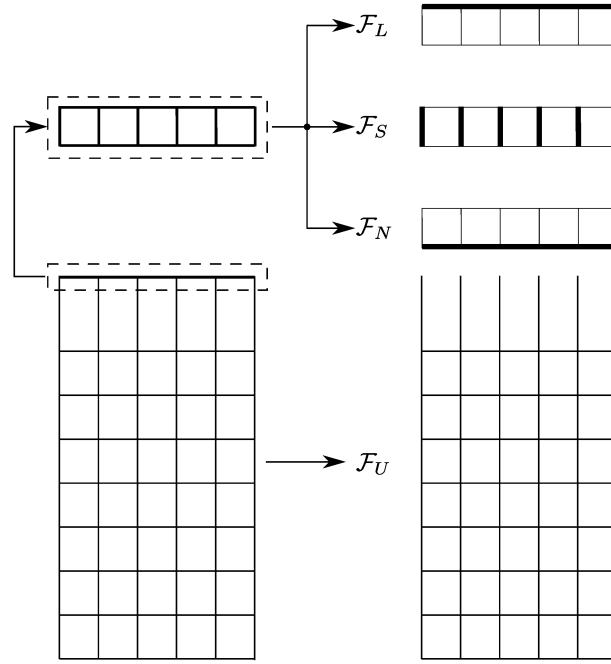


Figura 5.6: Clasificación en grupos de las caras para el caso de adición de una capa de celdas.

indicando la topología correspondiente. Por otro lado, el grupo de caras pertenecientes al grupo \mathcal{F}_U permanecen sin modificaciones en la transformación $\Omega_I \rightarrow \Omega_{II}$. Para estas caras existe una relación uno a uno representada por el mapa \mathcal{A}_D ,

$$\mathcal{A}_D(K_{U_{II}}) = \{K_{U_I} \in \mathcal{F}_{U_I} : K_{U_I} = K_{U_{II}}\} \quad \forall K_{U_{II}} \in \mathcal{F}_{U_{II}} \quad (5.14)$$

Por otro lado, las caras nuevas K_S que son tangentes a la dirección del movimiento no tienen relación con caras del dominio anterior por lo que definen un mapa vacío,

$$\mathcal{A}_E = \{\} \quad (5.15)$$

Utilizando los mapas definidos previamente, se describe el mapeo de los flujo de malla para la transformación $\Omega_I \rightarrow \Omega_{II}$ en la cual se adiciona una nueva capa de celdas,

$$\begin{aligned} \varphi(K_{N_{II}}) &= -\varphi(K_{L_I})|_{K_{L_I} \in \mathcal{A}_C(K_{N_{II}})} \quad \forall K_{N_{II}} \in \mathcal{F}_{N_{II}} \\ \varphi(K_{U_{II}}) &= \varphi(K_{U_I})|_{K_{U_I} \in \mathcal{A}_D(K_{U_{II}})} \quad \forall K_{U_{II}} \in \mathcal{F}_{U_{II}} \\ \varphi(K_{S_{II}}) &= 0 \quad \forall K_{S_{II}} \in \mathcal{F}_{S_{II}} \end{aligned} \quad (5.16)$$

Proceso de inflación Una vez realizada el traspaso de topologías entre los dominios $\Omega_I \rightarrow \Omega_{II}$ el próximo paso, es actualizar el dominio desde el instante $\Omega_{II}^{(n-1)}$ al instante $\Omega_{II}^{(n)}$ por medio de movimiento

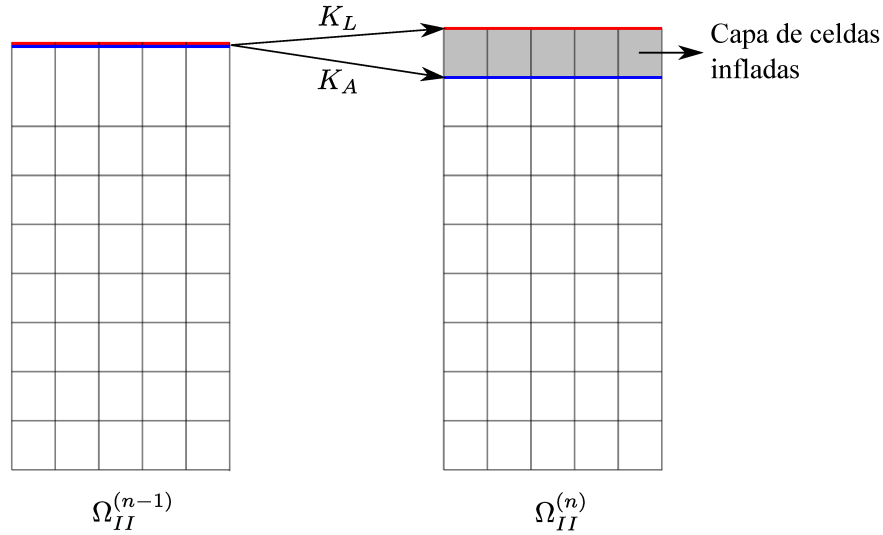


Figura 5.7: Inflación de una capa de celdas.

de nodos. En esta acción, el grupo de celdas con volumen nulo adquieren su tamaño final mediante un movimiento con direcciones opuestas de las caras K_N y K_L según se muestra en la Fig. 5.7. A este proceso se lo conoce como “inflación”.

5.3. Discretización temporal de alto orden en dominios con cambios topológicos

Cuando se utilizan discretizaciones temporales de alto orden es necesario, dependiendo del esquema, utilizar valores en instantes temporales previos al instante pasado $t^{(n-1)}$. Por ejemplo, el esquema de diferencias descentradas hacia atrás de segundo orden necesita definir las variables en los instantes $t^{(n-1)}$ y $t^{(n-2)}$. Tal como se explicó en la sección previa, la discretización ALE necesita que el historial temporal del dominio a un dado tiempo $t^{(n)}$ esté representado por la misma topología. Por ejemplo, para un esquema de diferencia descentradas hacia atrás, si el dominio modifica su topología en todos los instantes temporales entonces se tiene la transformación $\Omega_I^{n-2} \rightarrow \Omega_{II}^{n-1} \rightarrow \Omega_{II}^n$. Para explicar como se realiza la transformación de topologías para este último caso se utiliza un mapa temporal con dos ejes. Un eje representa la evolución temporal del dominio $(t^{(n-3)}, t^{(n-2)}, t^{(n-1)}, t^{(n)})$ y el restante representa a los tiempos relativos o pasados de cada paso de tiempo denominados como $t^{(--)}, t^{(-)}, t$. Dentro de este par de ejes coordenados se definen los dominios indicando sus respectivas topologías. En la Fig. 5.8 se aprecia que la discretización temporal para cada instante $t^{(n)}$ se corresponde con dominios que tienen la misma topología. Para el esquema mostrado, se necesitan realizar dos transformaciones topológicas para cada paso temporal. Por ejemplo, en el instante $t^{(n)}$ se realizan las siguientes transformaciones

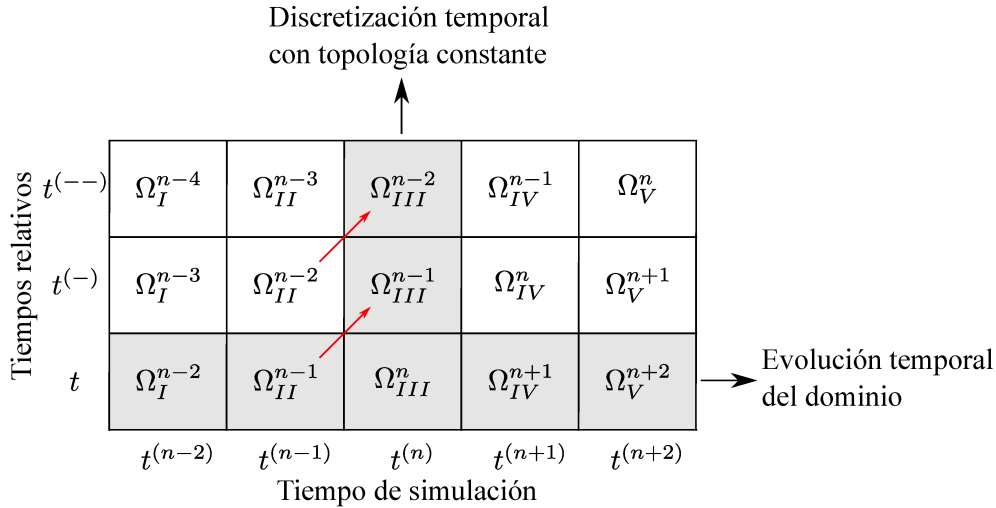


Figura 5.8: Mapa temporal en donde la topología del dominio cambia en todos los pasos temporales. Sin embargo, la historia temporal en cada paso de tiempo tiene dominios con topología constante.

(ver Fig. 5.8): $\Omega_I^{n-2} \rightarrow \Omega_{II}^{n-1}$ y $\Omega_{II}^{n-1} \rightarrow \Omega_{III}^n$. Es importante hacer notar que a tiempo $t^{(n)}$ no fue necesario transformar la topología correspondiente al tiempo $t^{(n-2)}$ debido a que ya fue transformada en el paso temporal $t^{(n-1)}$: $\Omega_I^{(n-2)} \rightarrow \Omega_{II}^{(n-1)}$. Esta secuencia del algoritmo simplifica el manejo de datos en la implementación computacional ya que en cada paso temporal solo se requiere información de dos topologías en vez de las tres involucradas en la evolución temporal del dominio.

5.3.1. Diferencias descentradas hacia atrás y Crank-Nicolson

En los esquemas de segundo orden descritos en el capítulo 2, se necesita tener definidos a tiempo $t^{(n)}$ el valor de todos los campos en los tiempos relativos $t^{(n-1)}$ y $t^{(n-2)}$. En el caso de existir un cambio topológico, por ejemplo, $\Omega_I \rightarrow \Omega_{II}$ en el paso temporal $t^{(n)}$ se deberá entonces realizar las conversiones de dominio de los tiempos pasado y doble pasado, es decir: $\Omega_I^{n-2} \rightarrow \Omega_{II}^{n-2}$ y $\Omega_I^{n-1} \rightarrow \Omega_{II}^{n-1}$ respectivamente. En estas conversiones se deben satisfacer las expresiones definidas en la Ec. (5.3) para el par de pasos temporales $t^{(n-1)}$ y $t^{(n-2)}$. De esta forma, se aplican para cada transformación topológica las conversiones detalladas en las Ecs. (5.6) y (5.7) para el caso de la remoción y las Ec. (5.12) para el caso de la adición.

5.3.2. Ejemplos de validación

Se resuelven tres ejemplos numéricos que tienen como objetivo evaluar la implementación de los métodos de integración temporal de diferencias descentradas hacia atrás de segundo orden y Crank-Nicolson en combinación con la técnica de *layering*. En estos problemas se utiliza un dominio cilíndrico al cual se le define una transformación temporal de un sistema biela-manivela tal cual se muestra en la

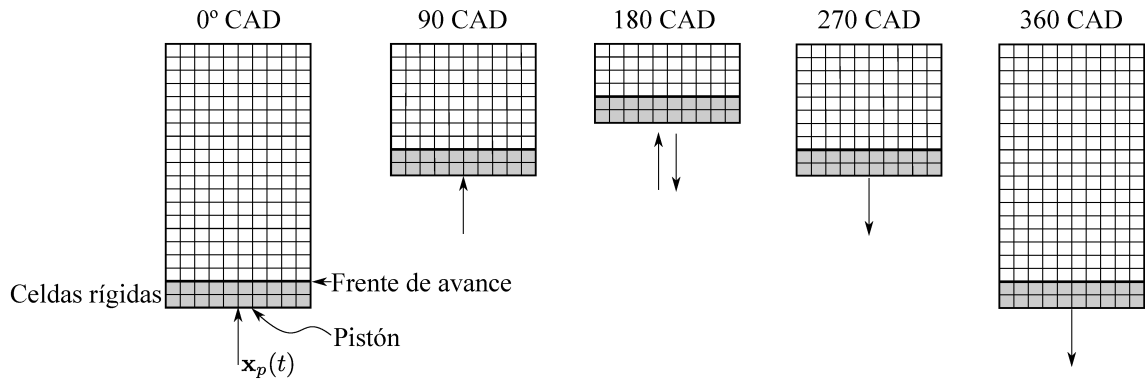


Figura 5.9: Descripción del dominio cilíndrico utilizado en los problemas de validación y su evolución temporal correspondiente a un sistema biela-manivela.

Fig. 5.9. La función de movimiento impuesta al bloque rígido de celdas es,

$$x_p(t) = r \left[1 - \cos \left(\frac{2\pi}{T} t \right) \right] + L \left\{ 1 - \sqrt{1 - \left[\frac{r}{L} \sin \left(\frac{2\pi}{T} t \right) \right]^2} \right\}, \quad (5.17)$$

donde r es el radio de la manivela, L es la longitud de la biela y T es el periodo del ciclo. Estos parámetros se configuran con los siguientes valores: $r = 45$ mm, $L = 140$ mm y $T = 0,03$ s.

Conservación del espacio

El primer ejemplo consiste en resolver la ley de conservación del espacio. La cantidad que representa al espacio se la denomina ζ la cual se resuelve una cantidad intensiva, es decir, ζ representa a la densidad volumétrica del espacio. El balance de ζ se expresa como,

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega(t)} \zeta \, d\Omega + \int_{\Gamma(t)} \varphi \zeta \, d\Gamma = 0. \quad (5.18)$$

Si el balance se resuelve de forma correcta, ζ debe ser igual a la unidad en todo lugar y para todo instante:

$$\zeta(\mathbf{x}, t) = 1 \quad \mathbf{x} \in \Omega, \quad \forall t. \quad (5.19)$$

La derivada temporal de la Ec. (5.18) se discretiza con los esquemas de diferencias descentradas hacia atrás de segundo orden y Crank-Nicolson. En ambos casos se verifica que la cantidad espacial ζ es igual a la unidad en todo el dominio y en todos los pasos temporales según se grafica en la Fig. 5.10.

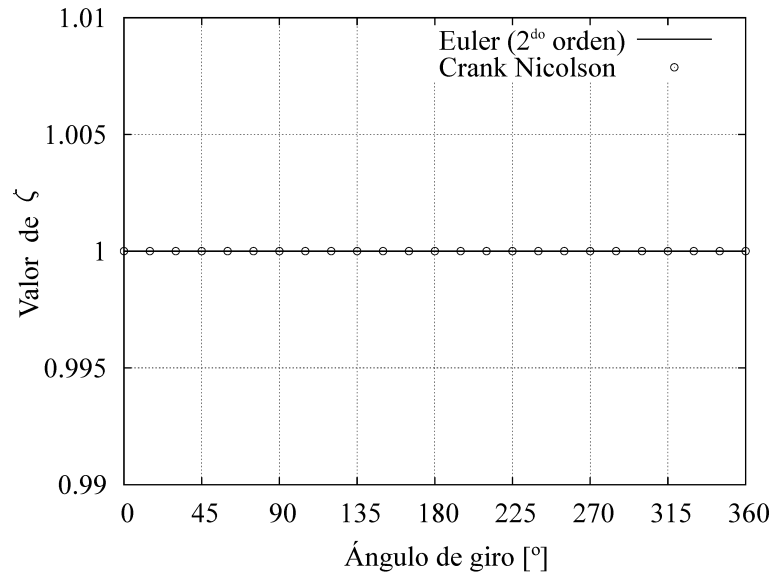


Figura 5.10: Valor de ζ según el tiempo expresado como ángulo de giro de la manivela para dos métodos de integración temporal.

Conservación de un escalar

En este ejemplo se resuelve el problema de conservación global de una cantidad escalar ψ dentro del dominio cilíndrico sujeto a la transformación expresada en la Ec. (5.17). El problema de transporte se simplifica asumiendo velocidad nula del medio fluido y viscosidad nula. De esta manera, la ecuación de conservación para ψ en Ω es,

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \psi dV + \int_{\Gamma(t)} \psi (\mathbf{v}_{\Gamma} \cdot \mathbf{d}\Gamma) = 0. \quad (5.20)$$

Se define una distribución inicial de $\psi(\mathbf{x})$ en el dominio según la siguiente expresión:

$$\psi(\mathbf{x}, 0) = 10^5 z \quad (5.21)$$

donde z es la coordenada del eje axial del cilindro. La resolución del problema por ambos métodos de discretización temporal conserva la cantidad inicial definida sobre el dominio según se aprecia en la Fig. 5.11.

Convergencia del error en un problema reactivo

En este caso se plantea un problema reactivo con el objetivo de evaluar la precisión de la discretización temporal. El problema es similar al presentado en la Ec. (5.20) al cual se le agrega un término reactivo

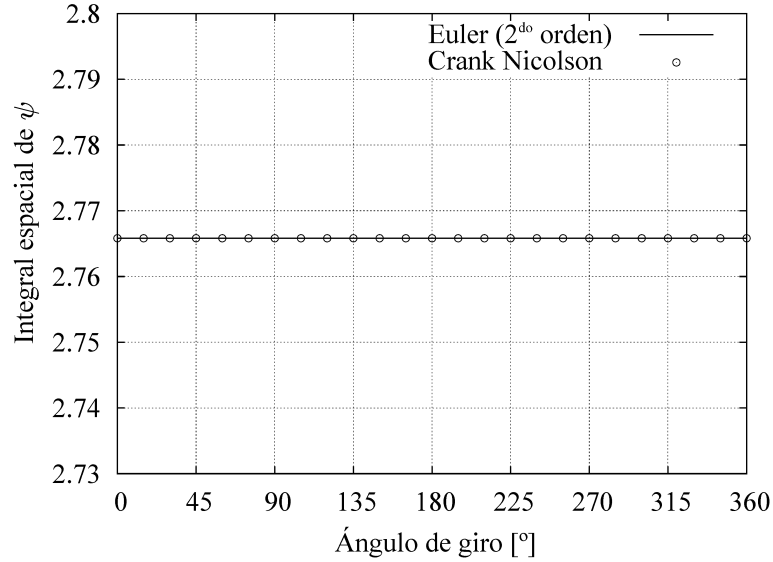


Figura 5.11: Valor integral de ψ dentro del cilindro según el ángulo de giro de la manivela.

lineal,

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \psi dV + \int_{\Gamma(t)} \psi (\mathbf{v}_{\Gamma} \cdot \mathbf{d}\Gamma) + \int_{\Omega} r \psi d\Omega = 0 \quad (5.22)$$

donde r es la tasa de reacción. Este problema tiene solución analítica para la cantidad global de ψ en el dominio,

$$\int_{\Omega} \psi dV = c e^{(-rt)}, \quad (5.23)$$

donde c se determina por medio de la condición inicial del problema,

$$c = \int_{\Omega} \psi dV \quad t = 0. \quad (5.24)$$

La condición inicial del problema es un campo homogéneo $\psi = 10^6$ y se utiliza una tasa de reacción de $r = 200$. Los resultados se grafican en la Fig. 5.12 en donde se aprecia convergencia del error con una tasa de segundo orden para ambos esquemas de discretización temporal.

Evaluación del error en un problema de Navier-Stokes con solución analítica

En este ejemplo, se hace un análisis del error numérico obtenido en un problema de flujo comparando los resultados con su solución analítica. El problema a resolver es el transporte de un vórtice el cual se definió previamente en la Ec. (4.14). La técnica de *layering* se incorpora al problema definiendo un bloque de celdas que se mueve de forma vertical atravesando al vórtice en su totalidad, a lo largo del tiempo de simulación. La posición relativa del bloque con respecto al vórtice en los instantes inicial y final de la simulación se muestra en la Fig. 5.13.

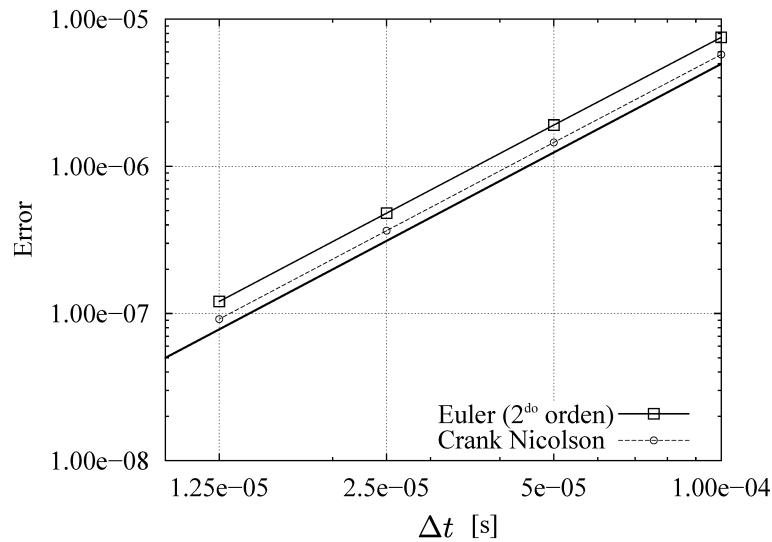


Figura 5.12: Error global del problema reactivo en función del paso temporal utilizado.

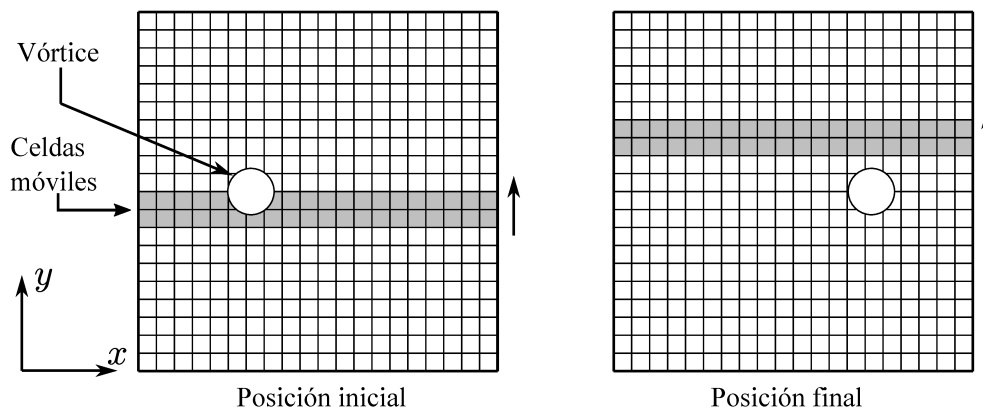


Figura 5.13: Convección de un vórtice resuelto en un contexto de malla dinámica: un grupo de celdas se desplaza con dirección normal al avance del vórtice atravesándolo completamente.

El problema se resuelve utilizando los esquemas de discretización temporal de segundo orden. El término convectivo se discretiza por medio del esquema *upwind* de segundo orden y para el término difusivo se utiliza un esquema lineal con correcciones no ortogonales. El problema se resuelve con la hipótesis de fluido ideal modificando el paso de malla y temporal para realizar un estudio de convergencia del error. En todas las simulaciones se mantiene un número de Courant máximo menor a la unidad. Los resultados de ambos esquemas de discretización temporal se presentan en las Figs. 5.14 y 5.15 que grafican el error en norma L_2 para las componentes x e y de velocidad respectivamente.

De los resultados se observa que el método de diferencias descentradas hacia atrás tiene una convergencia del error en las componentes de la velocidad de segundo orden. No obstante, en el método de Crank-Nicolson se observa una desviación de la línea de convergencia de segundo orden.

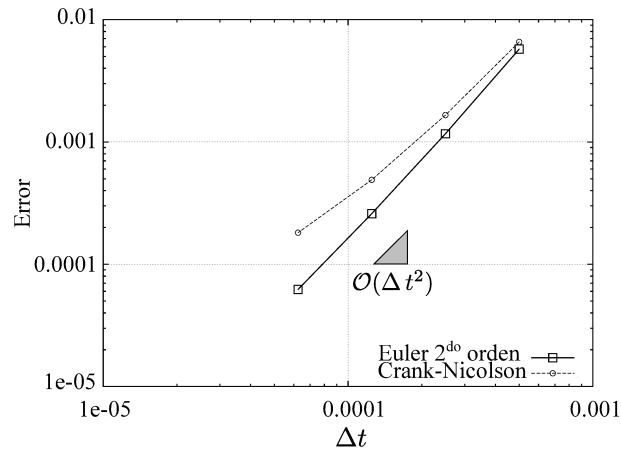


Figura 5.14: Convergencia del error de la componente x de la velocidad para los esquemas temporales Euler de segundo orden y Crank-Nicolson.

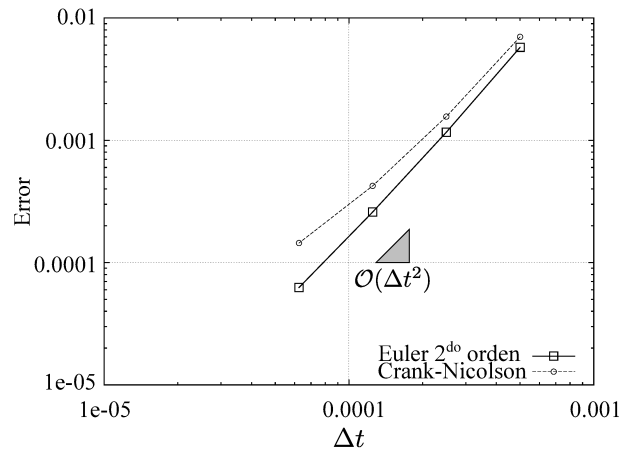


Figura 5.15: Convergencia del error de la componente y de la velocidad para los esquemas temporales Euler de segundo orden y Crank-Nicolson.

5.4. Gestión de la resolución de malla

En su versión más simple, la técnica de *layering* utiliza tolerancias de adición y remoción que son constantes en el tiempo y en el espacio. Además, es natural definir el tamaño de una nueva capa de celdas coincidente con el tamaño de las capas ya presentes en la malla. De esta forma, el tamaño (altura h) de la discretización inicial no se altera implicando una resolución constante a lo largo del tiempo. Si bien estas características son favorables en general, aparecen inconvenientes para casos con deformaciones extremas, como por ejemplo, problemas con variaciones de tamaño del orden de 50 veces. Para estos casos, las celdas deben ser lo suficientemente pequeñas para poder discretizar el dominio en su estado de mayor compresión. Si se conserva este tamaño de celdas cuando el dominio se expande se generará una excesiva resolución de malla. Por otro lado, si sus celdas son demasiado grandes, entonces el dominio

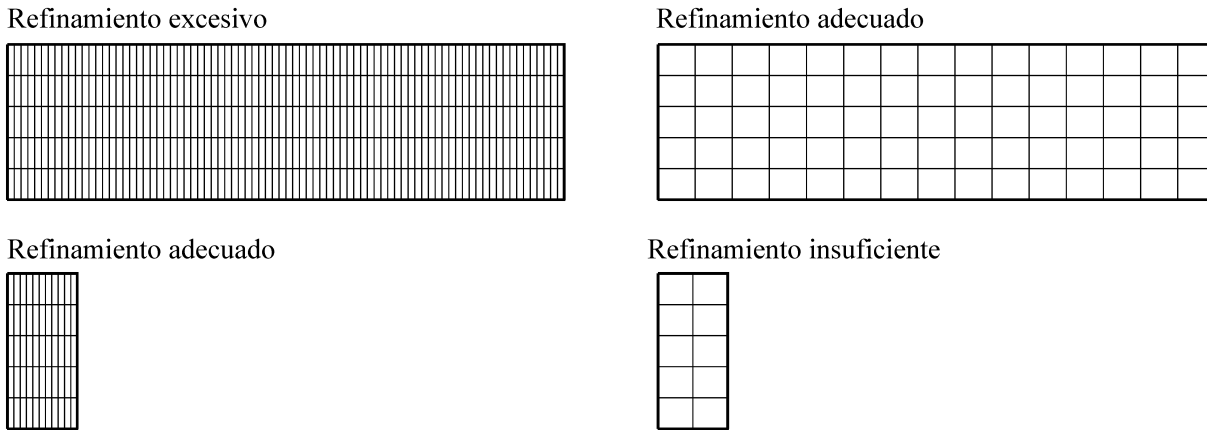


Figura 5.16: Inconvenientes al utilizar un tamaño de celdas constantes a lo largo de la transformación del dominio.

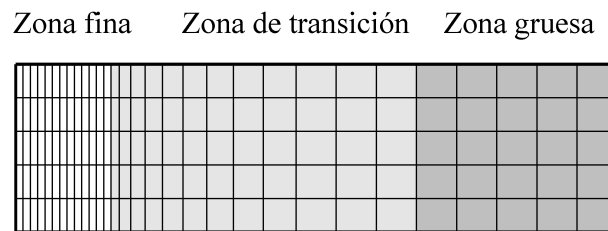


Figura 5.17: Dominio con capas de celdas de tamaño fino, intermedio y grueso.

no se podrá comprimir lo suficiente, ya que se removerían la totalidad de las celdas, o bien la resolución será insuficiente. Estas situaciones problemáticas se presentan de forma esquemática en la Fig. 5.16. Una solución simple a este problema es aplicar un esquema de tolerancias de forma tal de definir tamaños de celda dependientes con el espacio. Así se permite una resolución fina para el dominio en su estado de mínimo volumen y una resolución más gruesa para el caso de mayor tamaño. En la Fig 5.17 se muestra un ejemplo del uso de tolerancias variables con el espacio en donde el dominio se divide en tres partes comprendiendo una zona fina, una zona gruesa y una zona de transición [69].

El uso de tolerancias variables en el espacio permite realizar refinamientos localizados que pueden ser necesarios en ciertos problemas. Principalmente cuando el dominio extrudado esta en contacto con puertos de salida o entrada que son de un tamaño menor requiriendo mayor refinamiento en tal zona de contacto.

5.4.1. Deformación de malla y *layering*

En problemas de ICE el manejo de las resoluciones de malla se soluciona incorporando a la técnica de *layering* la estrategia de deformación de malla. El método funciona suspendiendo la remoción y adición

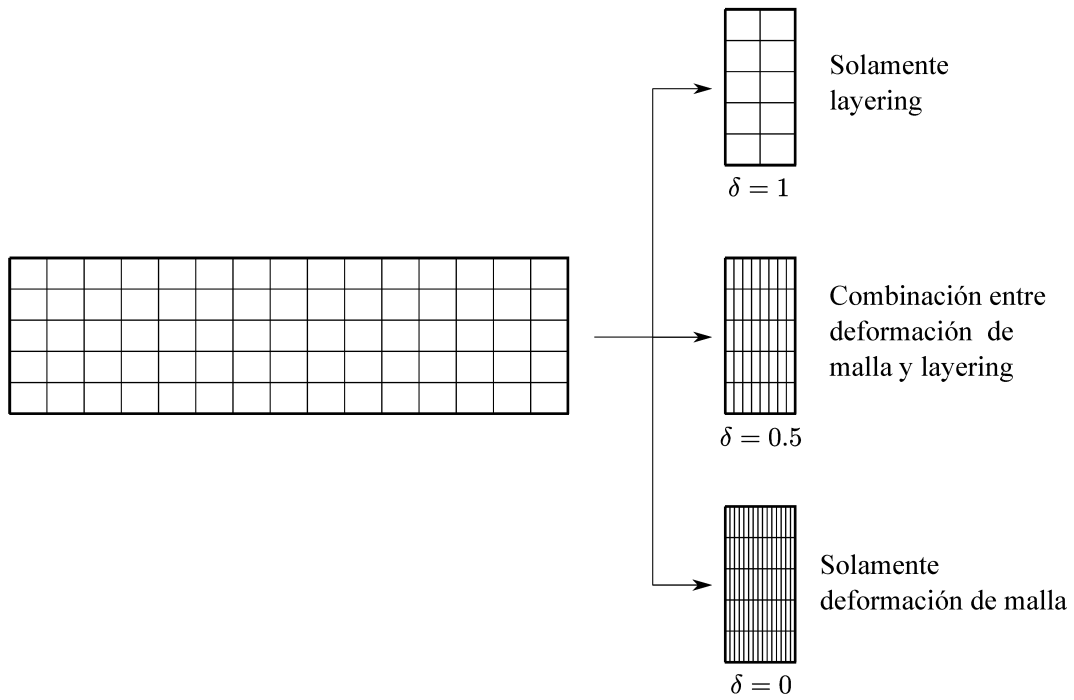


Figura 5.18: Influencia del factor de mezcla δ en la compresión de una malla.

de capas a partir que el cilindro reduce su tamaño por debajo de un valor predeterminado. A partir de ese momento, la malla se actualiza modificando las coordenadas de los nodos sin cambios topológicos. Una evolución de esta estrategia es utilizar deformación de malla y *layering* de forma simultánea. La ventaja principal de esta propuesta es redistribuir la deformación volumétrica del dominio sobre todas sus celdas en vez de sobre una única capa. Otra ventaja es la reducción de la frecuencia de adición y remoción de capas permitiendo alargar el paso temporal de las simulaciones.

La estrategia consiste en promediar los desplazamientos nodales de ambos métodos considerando que actúan de forma independiente. En este sentido, las coordenadas de nodales de la técnica de *layering* \mathcal{N}_L se promedian con las respectivas del problema de deformación \mathcal{N}_D generando un nuevo conjunto definido como \mathcal{N}_C ,

$$\mathcal{N}_C = \delta \mathcal{N}_D + (1 - \delta) \mathcal{N}_L \quad 0 \leq \delta \leq 1, \quad (5.25)$$

donde δ es el factor de promediado. Cuando este factor es $\delta = 0$, se trabaja con *layering* y cuando $\delta = 1$ el movimiento de mallas se ejecuta con deformación de malla. Valores de δ intermedios generan la acción simultánea de ambos métodos. La influencia de este factor sobre las mallas se ilustra en la Fig. 5.18.

En esta técnica híbrida se actualiza la malla por medio de desplazamiento nodales y eventualmente efectuando cambios topológicos. Los movimientos de deformación de malla y *layering* actúan sobre el dominio $\Omega^{(n-1)}$ generando nuevos estados $\Omega^{(n-1)} \rightarrow \Omega_D^{(n)}$ y $\Omega^{(n-1)} \rightarrow \Omega_L^{(n)}$ respectivamente. Sin embargo, en el caso de agregar una nueva capa de celdas, se reformula el proceso de inflación explicado

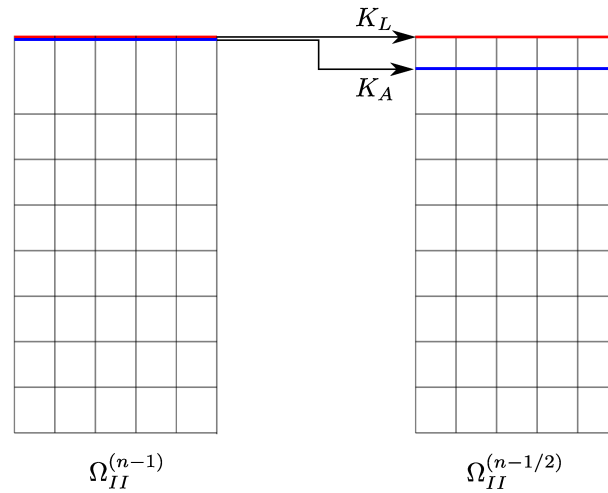


Figura 5.19: Estado intermedio del dominio necesario para agregar una nueva capa de celdas cuando se utiliza deformación de malla y layering simultáneamente.

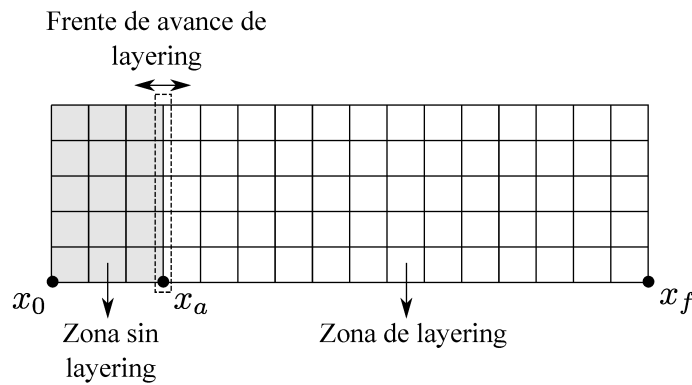


Figura 5.20: Dominio dividido en dos zonas separadas por el frente de avance de layering

en la Fig. 5.7 de la siguiente manera: se genera un estado intermedio entre los pasos de tiempo $\Omega^{(n-1)}$ y $\Omega^{(n)}$ denominado como $\Omega^{(n-1/2)}$. Este se determina a partir de actualizar la posición de las caras K_A dejando el grupo de caras K_L sin modificar según se explica en la Fig. 5.19. A partir de este estado, se efectúan los movimientos de deformación de malla y layering de forma independiente generando los dominios $\Omega_D^{(n)}$ y $\Omega_L^{(n)}$ respectivamente. En todos los casos, las coordenadas de los dominios $\Omega_D^{(n)}$ y $\Omega_L^{(n)}$ se promedian según (5.25) generando el conjunto de coordenadas que determinan el dominio final $\Omega^{(n)}$. El procedimiento combinado de deformación de malla y layering se resume en el Algoritmo 4.

5.4.2. Caso particular con dos zonas de deformación

En algunos problemas es necesario posicionar el frente de avance a una distancia determinada de las fronteras de dominio para evitar mapear campos en las zonas próximas a las paredes donde los gradientes pueden ser elevados. Para estas situaciones, el dominio se divide en dos zonas: la primer zona se localiza

Algoritmo 4 Etapas en la combinación de *layering* y deformación de malla

1. Cambios topológicos de *layering*
 - Con cambio topológico: $\Omega_I^{(n-1)} \rightarrow \Omega_{II}^{(n-1)}$
 - Sin cambio topológico: no se modifica el dominio
2. Movimiento de nodos por deformación de malla:
 - Sin cambio topológico: $\Omega_I^{(n-1)} \rightarrow \Omega_{ID}^{(n)}$
 - Remoción: $\Omega_{II}^{(n-1)} \rightarrow \Omega_{ID}^{(n)}$
 - Adición: $\Omega_{II}^{(n-1)} \rightarrow \Omega_{II}^{(n-1/2)} \rightarrow \Omega_{ID}^{(n)}$
3. Movimiento de nodos por *layering*:
 - Sin cambio topológico: $\Omega_I^{(n-1)} \rightarrow \Omega_{IL}^{(n)}$
 - Remoción: $\Omega_{II}^{(n-1)} \rightarrow \Omega_{IL}^{(n)}$
 - Adición: $\Omega_{II}^{(n-1)} \rightarrow \Omega_{II}^{(n-1/2)} \rightarrow \Omega_{IL}^{(n)}$
4. Combinación de coordenadas según la Ec. (5.25):
 - Sin cambio topológico $\{\Omega_{ID}^{(n)}, \Omega_{IL}^{(n)}\} \rightarrow \Omega_I^{(n)}$
 - Con cambio topológico $\{\Omega_{ID}^{(n)}, \Omega_{IL}^{(n)}\} \rightarrow \Omega_{II}^{(n)}$
5. Actualización de la malla:
 - Sin cambio topológico $\Omega_I^{(n-1)} \rightarrow \Omega_I^{(n)}$
 - Con cambio topológico: $\Omega_{II}^{(n-1)} \rightarrow \Omega_{II}^{(n)}$

sobre el lado que no es afectado por el frente de avance el cual se denomina como la zona de *no-layering*. De forma contraria, el frente de avance remueve y agrega celdas sobre el lado restante denominado como zona de *layering*. Un ejemplo gráfico de ambas zonas se muestra en la Fig. 5.20. En esta figura, las coordenadas x_0 y x_f son los límites del dominio mientras que x_a es la posición del frente de avance. En los problemas sin deformación de malla, la zona de *no-layering* se mueve de forma rígida y la zona restante permanece estática. En caso de trabajar con deformación de malla, la velocidad de cualquier punto posicionado en x_i a un tiempo dado t es función de su posición y de la función de movimiento $f(t)$ según se define en la siguiente expresión,

$$v(x_i, t) = \begin{cases} \left[\delta \times \left(\frac{x_f - x_i}{x_f - x_0} \right) + (1 - \delta) \right] f(t) & x_0 \leq x_i \leq x_a \quad (\text{zona de no-layering}) \\ \left[\delta \times \left(\frac{x_f - x_i}{x_f - x_0} \right) \right] f(t) & x_a \leq x_i \leq x_f \quad (\text{zona de layering}) \end{cases} \quad (5.26)$$

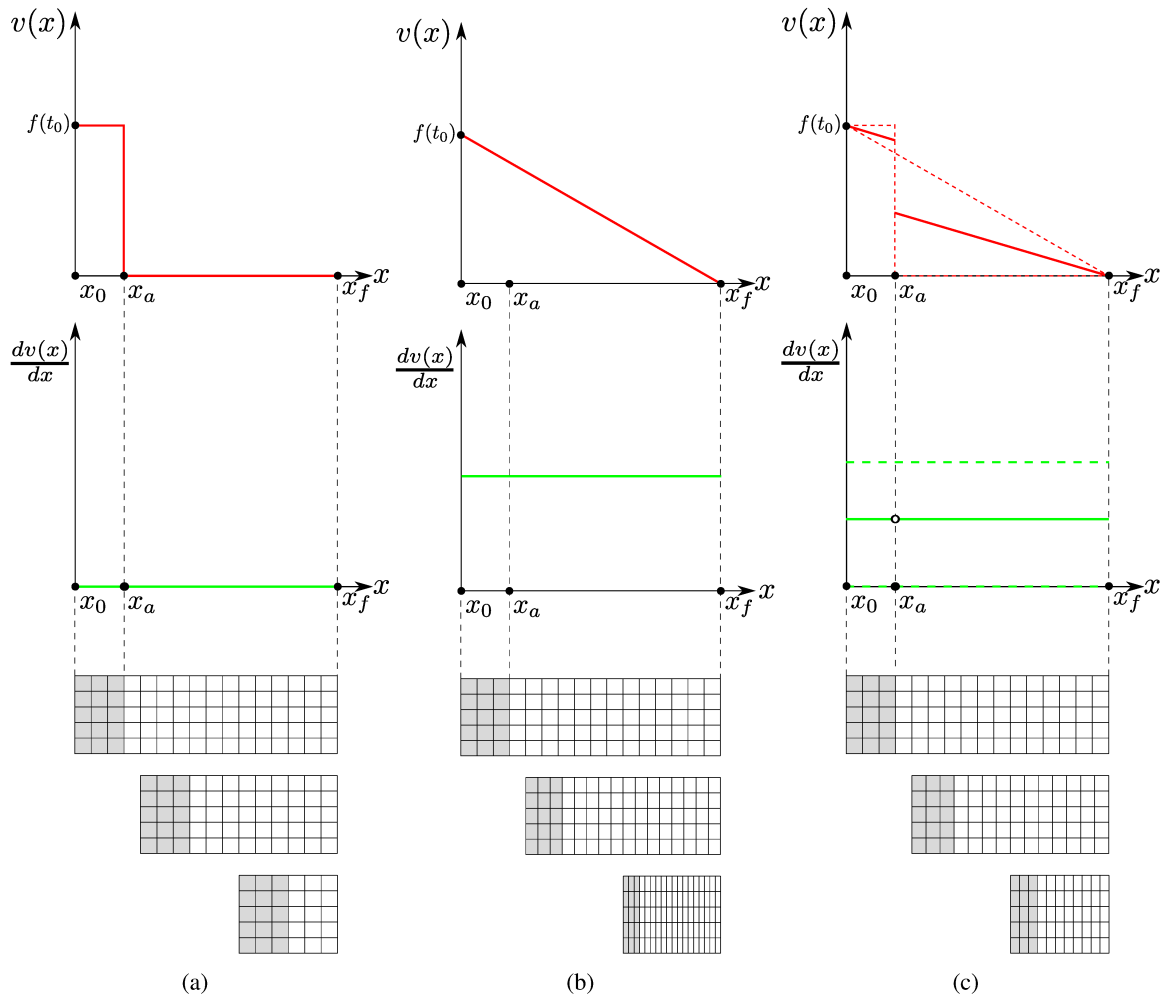


Figura 5.21: Cinemática de un problema de *layering* dividido en dos zonas: (a) *layering*; (b) deformación de malla; (c) una combinación de ambos.

La cinemática de un dominio definida por la Ec. (5.26) se presenta en la Fig. 5.21 para los casos de *layering* y deformación de malla actuando de forma independiente y su combinación. Adicionalmente se incluye en la misma figura la velocidad y su derivada espacial para cada punto del dominio como función de la posición para un instante de tiempo determinado. La derivada de la velocidad a lo largo del eje x es equivalente a la tasa de deformación de las celdas de la malla. Para el caso de *layering* sin deformación de malla, esta derivada es nula en todas las celdas exceptuando aquella que es adyacente al frente de avance. A consecuencia de esto, el total de la deformación del dominio se concentra en una sola capa mientras que las celdas restantes permanecen estáticas (zona de *layering*) o se mueven de forma rígida (zona de *no-layering*). Por su parte, cuando se utiliza deformación de malla exclusivamente, la derivada es constante a lo largo de todo el dominio lo que significa que todas las capas de celdas se deforman equitativamente sin necesidad de remover o adicionar capas. Estudiando estas situaciones límites, se concluye que la derivada de la velocidad sobre el eje axial del dominio requiere de una discontinuidad

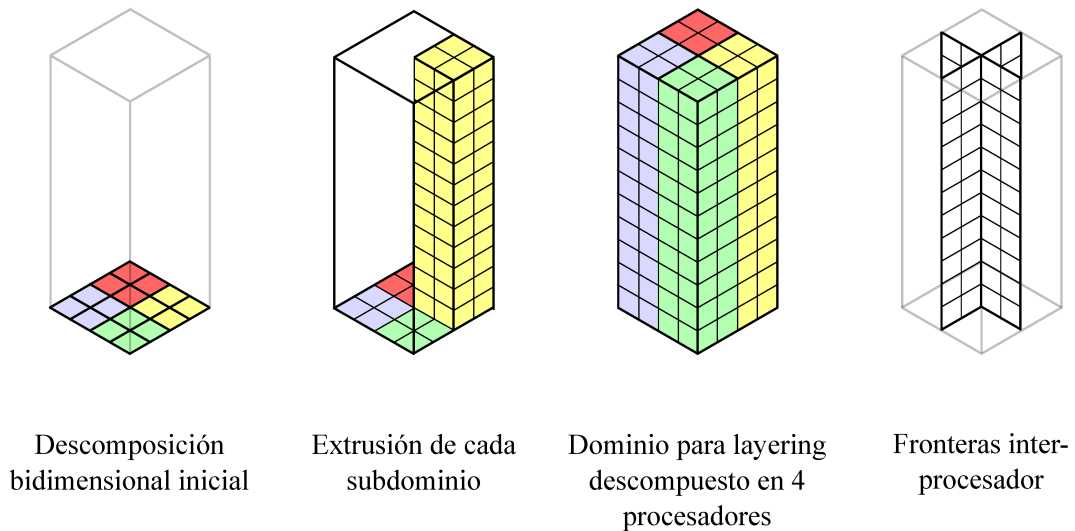


Figura 5.22: Descomposición de un dominio para layering. Una descomposición inicial bidimensional se extruye para conformar subdominios independientes los cuales están comunicados por fronteras inter-procesador.

para posibilitar la adición o remoción de celdas. Además, si la derivada espacial de la velocidad es constante, todas las celdas del dominio se deformarán de la misma forma, salvo las celdas adyacentes al frente de avance de *layering* en donde la derivada presenta una discontinuidad. Teniendo en cuenta estos conceptos, la combinación de *layering* con deformación de malla según la Ec. (5.26) logra definir una derivada espacial de la velocidad la cual es constante en todo el dominio exceptuando una discontinuidad localizada en el frente de avance.

5.5. Paralelismo

La técnica *layering* en paralelo requiere descomponer el dominio sobre una sección transversal para luego extruir cada división determinando los subdominios asociados a cada uno de los procesadores. Un ejemplo de subdivisión en cuatro procesadores se grafica en la Fig. 5.22. Los procesadores deben trabajar en conjunto debido a que la adición y remoción de capas de celdas se debe efectuar en simultáneo. Además, cuando se agrega una nueva celda, la posición de la nueva capa debe coincidir en todos los procesadores. De otra forma, las fronteras entre procesadores (ver la Fig. 5.22) quedarán no conformes invalidando el cómputo en paralelo. En este contexto, los procesadores se deben comunicar entre ellos para sincronizar los eventos de cambio topológico y definir de forma única las coordenadas de las nuevas capas de celdas.

En problemas con múltiples zonas de *layering*, por ejemplo, en un motor de más de un cilindro, cada zona puede eventualmente estar distribuida sobre diferentes subgrupos de procesos. Para estos casos, la

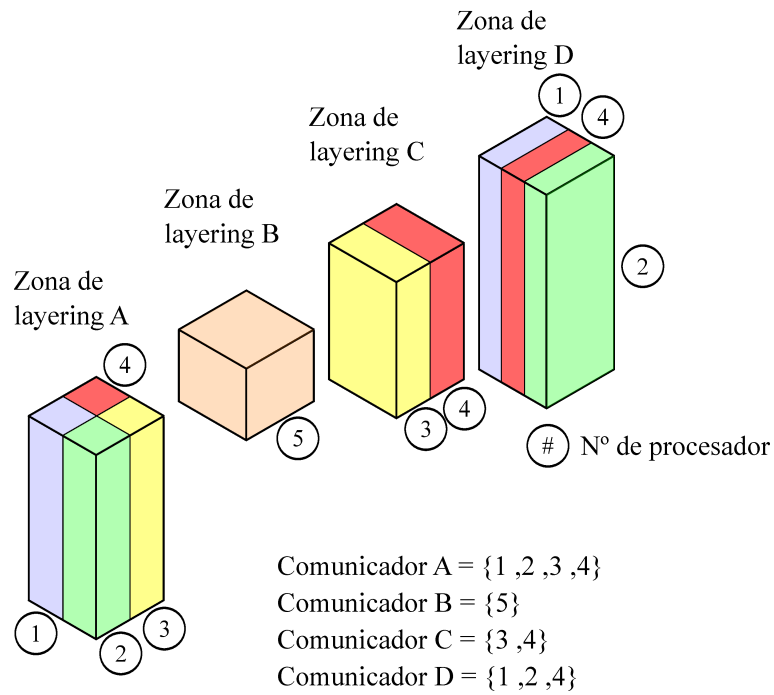


Figura 5.23: Dominio descompuesto en cuatro zonas de *layering* utilizando diferente número de procesos. Cada zona tiene su propio comunicador de MPI.

comunicación entre los procesadores se debe realizar entre cada subgrupo. Para organizar la lógica de comunicaciones se aplica la técnica propuesta por el trabajo de maestría de Tessi [70] en donde se crean varios “comunicadores” de MPI para agrupar aquellos procesadores que pertenecen a la misma zona móvil. De esta forma, para una zona dada, las operaciones colectivas requeridas implican solamente sus procesadores correspondientes. Un ejemplo gráfico de esta estrategia se muestra en la Fig. 5.23 donde las cuatro zonas de *layering* se descomponen de forma diferente dando lugar a cuatro comunicadores de MPI.

Capítulo 6

Eliminación de oscilaciones en la velocidad

6.1. Introducción

En este capítulo se estudia un problema numérico presente en algunas simulaciones basadas en el método PISO y en la formulación ALE. El problema consiste en oscilaciones de la velocidad de alta frecuencia denominadas como oscilaciones *checkerboard* (tablero de ajedrez). Si bien el problema es propio de los algoritmos basados en el método PISO, los inconvenientes se aprecian frecuentemente en simulaciones de flujo compresible de malla dinámica que utilizan la formulación ALE.

6.1.1. Problema ejemplo

Para introducir el problema de oscilaciones de velocidad se resuelve un ejemplo numérico unidimensional discretizado con 10 celdas. Se desarrolla un solo paso de tiempo en donde el dominio se comprime debido al movimiento rígido del par de celdas inferiores que comprimen a la tercer celda siguiendo el orden de abajo hacia arriba. La transformación del dominio se muestra en la Fig. 6.1. El resultado obtenido para el campo de la velocidad tiene una oscilación centrada en la celda que se comprime. La amplitud de la oscilación se incrementa a mayor variación volumétrica de la celda comprimida. Los valores de velocidad resultantes en función del grado de deformación de la celda comprimida se muestran en la Fig. 6.2.

Se analizaron los motivos que generan las oscilaciones en el campo de velocidades y se llega a la siguiente conclusión general: la oscilación en el campo de velocidades aparece luego de computar la corrección explícita de la velocidad dentro del bucle PISO. En detalle, la anomalía numérica se debe a la variación de los valores del coeficiente a_p , el cual en combinación con el gradiente de presión ∇p generan oscilaciones en la velocidad. Dentro del bucle PISO, la ecuación de presión y la posterior definición de la velocidad no disponen de un mecanismo para corregir las oscilaciones en la velocidad. La causa de esto

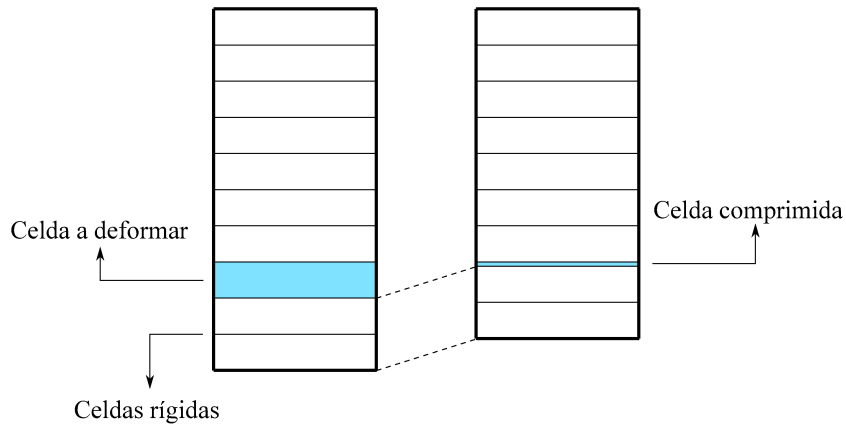


Figura 6.1: Dominio unidimensional con 10 celdas de las cuales las dos inferiores ascienden con movimiento rígido comprimiendo la tercer celda de abajo hacia arriba.

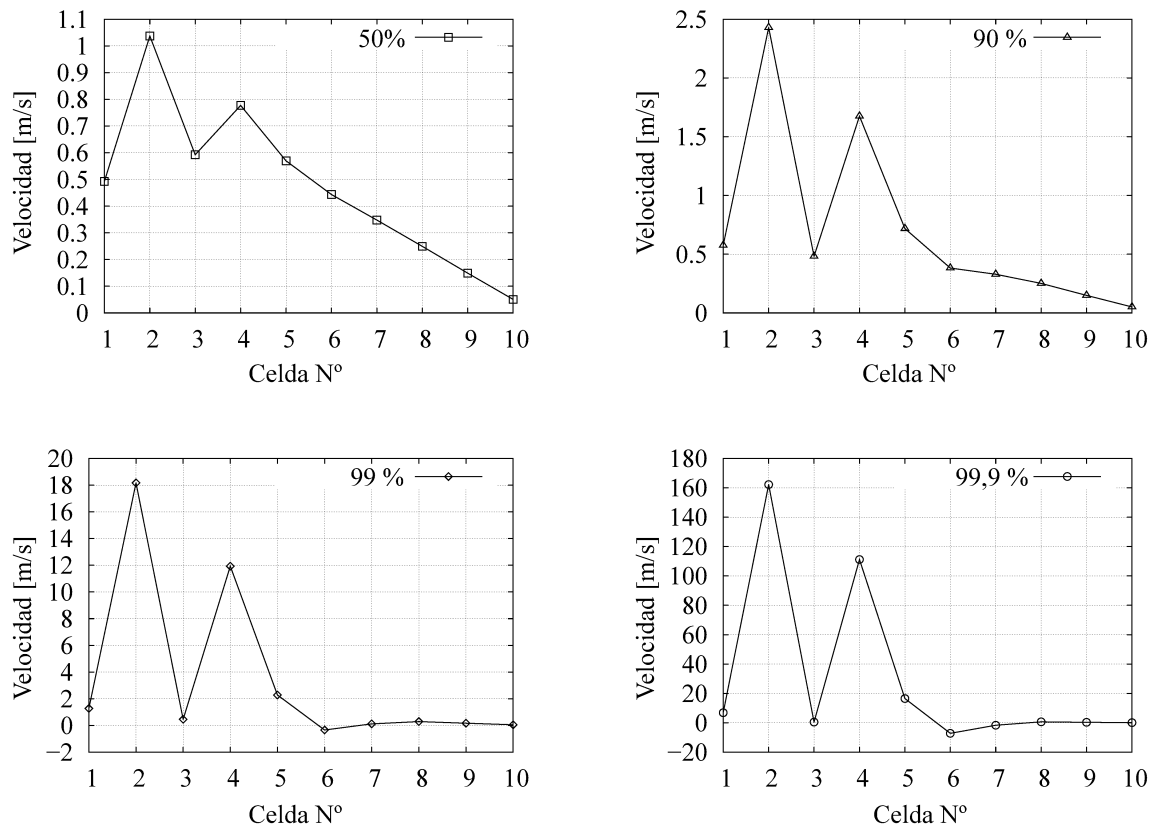


Figura 6.2: Valores de velocidad en las celdas del dominio unidimensional en función del grado de compresión de la celda deformable: 50 %, 90 %, 99 % y 99.9 %.

es que la velocidad es introducida en la ecuación de presión en forma de flujos localizados en las caras de la malla los cuales son interpolados a través de un esquema lineal. En esta interpolación, los errores de alta frecuencia se atenúan y por lo tanto no son visibles al resolver la ecuación de presión tal como se esquematiza en la Fig. 6.3. En consecuencia, los valores del flujo localizados en las caras no tienen las

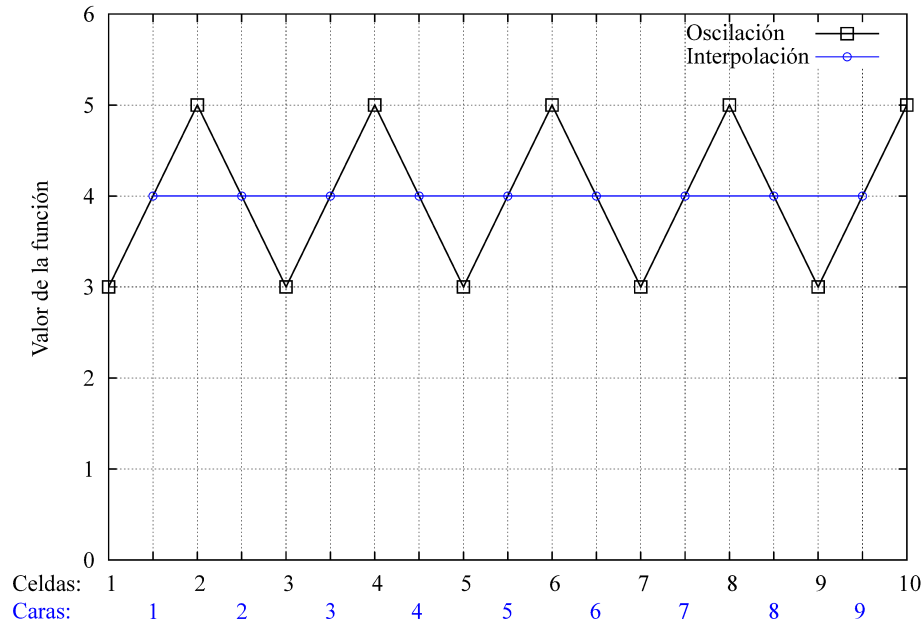


Figura 6.3: Las oscilaciones de máxima frecuencia originalmente en centro de celdas se eliminan sobre las caras por medio de interpolación lineal.

componentes de alta frecuencia que eventualmente se presentan en centro de celdas. Siguiendo el bucle PISO, luego de resolver la ecuación de presión se define la velocidad sobre las caras de la malla y los respectivos flujos que satisfacen el balance de masa. Debido a que estos flujos no presentan oscilaciones de alta frecuencia, se propone realizar una reconstrucción de estos valores para generar valores en celdas libre de oscilaciones.

6.2. Solver basado en reconstrucción de flujos

Se define un nuevo *solver* basado en la formulación SIMPLE-PISO el cual reemplaza la corrección explícita de la velocidad por medio de una reconstrucción de los flujos a valores en centros de celda:

$$\tilde{\mathbf{u}}_P = \mathcal{R}(\phi_k), \quad (6.1)$$

donde \mathcal{R} es un operador lineal que reconstruye los flujos en valores de velocidades de celdas mediante una determinada precisión y conservando su naturaleza no oscilatoria. Para ser consistente con la ecuación de momento, la definición de la velocidad por medio de la Ec. (6.1) es equivalente a reemplazar el gradiente de presión en la Ec. (2.73) por uno nuevo definido como,

$$\tilde{\nabla} p_P = a_P [\mathbf{H}_P - \mathcal{R}(\phi_k)]. \quad (6.2)$$

Introduciendo en (6.2) la definición del flujo de velocidad a partir de las Ecs. (2.71) y (2.72) y considerando la propiedad lineal del operador \mathcal{R} se llega a la siguiente expresión para el nuevo gradiente de presión:

$$\tilde{\nabla} p_P = a_P \mathcal{R} \left[\left(\frac{1}{a_P} \right)_k (\nabla p)_k \cdot \mathbf{S}_k \right] + a_P [\mathbf{H}_P - \mathcal{R}(\mathbf{H}_k \cdot \mathbf{S}_k)]. \quad (6.3)$$

Se puede observar que este nuevo gradiente de presión tiene dos términos bien diferenciados. El primero de ellos incluye el gradiente de presión computado a partir de un *stencil* compacto tal cual se lo usa en la Ec. (2.71). Por otro lado, el segundo término es función de \mathbf{H}_P y a_P .

Considerando este nuevo gradiente de presión, la corrección explícita de la velocidad resulta en,

$$\tilde{\mathbf{u}}_P = \mathbf{H}_P - \frac{1}{a_P} \tilde{\nabla} p_P. \quad (6.4)$$

6.2.1. Precisión del operador de reconstrucción

La redefinición del gradiente de presión en la Ec. (6.3) introduce una diferencia en el campo de velocidades con respecto a la velocidad resultante en la formulación estándar. Esta diferencia se obtiene restando las Ecs. (2.73) y (6.4),

$$\tilde{\mathbf{u}}_P - \mathbf{u}_P = -\frac{1}{a_P} \left[\left(\tilde{\nabla} p_P - \nabla p_P \right) \right]. \quad (6.5)$$

introduciendo luego la Ec. (6.3):

$$\tilde{\mathbf{u}}_P - \mathbf{u}_P = [\mathcal{R}(\mathbf{H}_k \cdot \mathbf{S}_k) - \mathbf{H}_P] - \mathcal{R} \left[\left(\frac{1}{a_P} \right)_k (\nabla p)_k \cdot \mathbf{S}_k \right] + \frac{\nabla p_P}{a_P}. \quad (6.6)$$

Esta última expresión define la diferencia entre los campos de velocidades obtenidos por medio de reconstrucción de flujos y a partir de la formulación estándar en el primer paso temporal. En este paso temporal los campos \mathbf{H}_P , a_P y la presión p coinciden en ambos *solvers* ya que comienzan por medio de la misma condición inicial. En este sentido, el error a un tiempo dado t se define como:

$$\tilde{\mathbf{u}}_P(t) - \mathbf{u}_P(t), \quad (6.7)$$

que es equivalente a la acumulación de los errores generados en cada paso de tiempo. En referencia a la exactitud numérica de la formulación estándar, el campo de velocidad a un tiempo dado es de segundo orden de precisión [71, 72]. Para preservar esta propiedad, la diferencia entre el campo de velocidades definido por medio de reconstrucción de flujos en comparación con la resultante de la formulación original

debe encuadrarse también en una diferencia de segundo orden. Considerando un análisis de refinamiento de malla conservando el número de Courant y usando un paso de tiempo uniforme se llega a,

$$\mathcal{O} [\tilde{\mathbf{u}}_P(t) - \mathbf{u}_P(t)] = \mathcal{O} \left[\sum_{i=1}^N (\tilde{\mathbf{u}}_P^i - \mathbf{u}_P^i) \right] = \mathcal{O}(h^n) \quad n \geq 2, \quad (6.8)$$

donde i es el índice del paso de tiempo y h es el tamaño de celda. Los términos de la sumatoria son del mismo orden por lo que el orden de magnitud de la sumatoria es equivalente al orden de uno de los términos escalado por el número total de sumandos ($N = t/\Delta t$). Además se tiene en cuenta que si el número de Courant es constante, entonces $h = \Delta t$:

$$\mathcal{O} \left[\frac{t}{\Delta t} (\tilde{\mathbf{u}}_P^i - \mathbf{u}_P^i) \right] = \mathcal{O} \left[\frac{t}{h} (\tilde{\mathbf{u}}_P^i - \mathbf{u}_P^i) \right] = \mathcal{O}(h^n) \quad n \geq 2, \quad (6.9)$$

luego considerando que t es un valor constante y pasando el valor de h al término derecho:

$$(\tilde{\mathbf{u}}_P^i - \mathbf{u}_P^i) = \mathcal{O}(h^n) \quad n \geq 3. \quad (6.10)$$

Si se tiene en cuenta que $(\tilde{\mathbf{u}}_P^i - \mathbf{u}_P^i)$ comparte el mismo orden de magnitud que el descrito por la Ec. (6.6), la condición sobre el operador de reconstrucción se puede expresar como,

$$\mathcal{R} \left[\left(\frac{1}{a_P} \right)_k (\nabla p)_k \cdot \mathbf{S}_k \right] - \frac{\nabla p_P}{a_P} + [\mathbf{H}_P - \mathcal{R}(\mathbf{H}_k \cdot \mathbf{S}_k)] = \mathcal{O}(h^n) \quad n \geq 3, \quad (6.11)$$

lo que implica que,

$$[\mathbf{H}_P - \mathcal{R}(\mathbf{H}_k \cdot \mathbf{S}_k)] = \mathcal{O}(h^n) \quad n \geq 3, \quad (6.12)$$

$$\mathcal{R} \left[\left(\frac{1}{a_P} \right)_k (\nabla p)_k \cdot \mathbf{S}_k \right] - \frac{\nabla p_P}{a_P} = \mathcal{O}(h^n) \quad n \geq 3. \quad (6.13)$$

En la Ec. (6.12), se define uno de los requisitos impuestos sobre el operador \mathcal{R} el cual define que la diferencia entre un campo definido en centro de celdas y el resultante de la reconstrucción de sus flujos en caras correspondientes debe tener tercer orden de convergencia espacial. Por otro lado, en el segundo requerimiento se tiene en cuenta que el término a_P varía con el tamaño del refinamiento espacial y temporal. Definiendo esquemas de discretización estándar para la ecuación de momento, se expresa al término a_P como:

$$a_P = \left(\frac{U}{\text{Co}h} + \sum_k \frac{\alpha_k}{h} + \sum_k \frac{\nu\beta_k}{h^2} \right), \quad (6.14)$$

donde α_k y β_k son los coeficientes convectivos y difusivos definidos por sus esquemas de discretización respectivamente y U es la velocidad característica del problema. Si se considera $\alpha_k, \beta_k, \nu, U$ y el número de Courant, Co , como valores constantes. Entonces,

$$\begin{aligned} \lim_{h \rightarrow 0} a_P &\propto \frac{1}{h^2}, \\ \lim_{h \rightarrow 0} a_P &\propto \frac{1}{h}, \quad \nu = 0. \end{aligned} \quad (6.15)$$

Introduciendo la Ec. (6.15) en Ec. (6.13), se obtiene el siguiente requerimiento para el operador de reconstrucción \mathcal{R} ,

$$\nabla p_P - \mathcal{R}(\nabla p_k \cdot \mathbf{S}_k) = \mathcal{O}(h^n) \quad n \geq 2. \quad (6.16)$$

De esta manera, si se utiliza un operador \mathcal{R} que satisface las condiciones dadas en las Ecs. (6.12) y (6.16) para el cómputo del gradiente de presión (Ec. 6.3), se asegura que el *solver* preserve la precisión de segundo orden en la velocidad de la formulación original.

6.3. Operadores de reconstrucción

La determinación de valores en celdas a partir de un conjunto de valores localizados en las caras es un problema indeterminado ya que el número de caras es superior al número de celdas. Consecuentemente, se debe adoptar una estrategia para resolver esta indeterminación. Dentro de las variantes existe la posibilidad de promediar los valores de las caras mediante pesos calculados de varias maneras o bien se puede plantear un problema de minimización de una determinada norma de error. Una estrategia de minimización es propuesta por Shashkov et al. [73] quienes definen un operador de reconstrucción a partir de minimizar un dado funcional. Este funcional es la diferencia entre el flujo, función de la velocidad de entrada del problema $\phi_k(\mathbf{u}_k)$ del problema y un conjunto de flujos aproximados a partir de la velocidad en la celda \mathbf{u}_P la cual es la incógnita del problema:

$$g(\mathbf{u}_P) = \sum_k [\phi_k(\mathbf{u}_k) - \phi_k^*(\mathbf{u}_P)]^2. \quad (6.17)$$

Shashkov *et al.* proponen dos aproximaciones para definir los flujos ϕ_k^* a través de series de Taylor de cero y primer orden,

$$\begin{aligned} \phi_k^*(\mathbf{u}_P) &= \mathbf{u}_P \cdot \mathbf{S}_k \\ \phi_k^*(\mathbf{u}_P) &= (\mathbf{u}_P + \nabla \mathbf{u}_P \cdot \mathbf{d}_{Pk}) \cdot \mathbf{S}_k, \end{aligned} \quad (6.18)$$

donde \mathbf{d}_{Pk} es el vector que une el centro de celda con el centroide de cara y $\nabla \mathbf{u}_P$ es un gradiente basado en el teorema de Gauss. Las soluciones del problema de minimización para las aproximaciones definidas en (6.18) son respectivamente:

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_P &= \left(\sum_k \mathbf{S}_k \mathbf{S}_k \right)^{-1} \cdot \left(\sum_k F_k \mathbf{S}_k \right), \\ \mathbf{u}_P &= \left(\sum_k \mathbf{S}_k \mathbf{S}_k \right)^{-1} \cdot \left[\sum_k (\phi_k - \nabla \mathbf{u}_P \cdot \mathbf{d}_{Pk} \cdot \mathbf{S}_k) \mathbf{S}_k \right]. \end{aligned} \quad (6.19)$$

Una expresión similar a la primera reconstrucción de la Ec. (6.19) es propuesta por Weller *et al.* [74, 75] quienes definen el valor de la velocidad en centro de celda como,

$$\mathbf{u}_P = \left(\sum_k \frac{\mathbf{S}_k \mathbf{S}_k}{\|\mathbf{S}_k\|} \right)^{-1} \cdot \left[\sum_k \phi_k \frac{\mathbf{S}_k}{\|\mathbf{S}_k\|} \right]. \quad (6.20)$$

Esta última reconstrucción se utiliza en algunos *solvers* de OpenFOAM(R) [8]. Se puede demostrar que esta fórmula es el resultado de resolver el problema de minimización definido en la Ec. (6.17) utilizando la inversa del área de las caras como factor de peso para el cómputo de minimización del error,

$$g(\mathbf{u}_P) = \sum_k \frac{1}{\|\mathbf{S}_k\|} [\phi_k(\mathbf{u}_k) - \phi_k^*(\mathbf{u}_P)]^2. \quad (6.21)$$

Para este caso se utilizó la primera expresión de la Ec. (6.18) para definir los flujos aproximados $\phi_k^*(\mathbf{u}_P)$.

Una estrategia diferente es propuesta por Perot *et al.* [76] la cual consiste en definir el valor de la velocidad en centro de celda por medio de un promedio pesado. El factor de peso utilizado es el volumen extruido de cada cara a partir de la distancia entre el centro de celda y el centro de cara:

$$\mathbf{u}_P = \frac{1}{V_P} \sum_k (\mathbf{S}_k \cdot \mathbf{d}_{Pk}) \mathbf{u}_k. \quad (6.22)$$

6.3.1. Una nueva fórmula de reconstrucción

La interpolación lineal de campos en celdas a caras consiste en aplicar una aproximación de Taylor de segundo orden utilizando un gradiente definido en la cara $\nabla \mathbf{u}_k$ calculado a partir de celdas adyacentes.

$$\mathbf{u}_k^* = \mathbf{u}_P + \nabla \mathbf{u}_k \cdot \mathbf{d}_{Pk}. \quad (6.23)$$

Según la Ec. (6.12), el operador de reconstrucción se debe acercar a una función inversa de la interpolación lineal de campos desde celdas a caras. Con este fin, las aproximaciones utilizadas para determinar

los valores en caras dentro de un proceso de reconstrucción deben basarse en la Ec. (6.23), lo cual no es el caso de las funciones de reconstrucción presentadas en los párrafos precedentes.

Si el campo de velocidades es oscilatorio y se adopta el mismo gradiente en caras para la fórmula de reconstrucción dada por la Ec. (6.23), entonces el operador de reconstrucción será la inversa de la interpolación recuperando las oscilaciones presentes en la velocidad. Para evitar esto, el gradiente en caras de la Ec. (6.23) se reemplaza por una aproximación basada en la interpolación de gradientes centrados en celdas el cual se lo simboliza como $(\overline{\nabla \mathbf{u}_P})_k$. A partir de esto se define la siguiente expresión para aproximar los valores en caras \mathbf{u}_k^* dentro del operador de reconstrucción,

$$\mathbf{u}_k^* = \mathbf{u}_P + (\overline{\nabla \mathbf{u}_P})_k \cdot \mathbf{d}_{Pk}. \quad (6.24)$$

Los flujos que resulta de esta aproximación se definen como,

$$\phi_k^*(\mathbf{u}_P) = [\mathbf{u}_P + (\overline{\nabla \mathbf{u}_P})_k \cdot \mathbf{d}_{Pk}] \cdot \mathbf{S}_k. \quad (6.25)$$

Adoptando la función de minimización de la Ec. (6.21), la velocidad \mathbf{u}_P se define como:

$$\mathbf{u}_P = \mathcal{R}(\phi_k) = \left(\sum_k \frac{\mathbf{S}_k \mathbf{S}_k}{\|\mathbf{S}_k\|} \right)^{-1} \cdot \left\{ \sum_k \left[\phi_k - (\overline{\nabla \mathbf{u}_P})_k \cdot \mathbf{d}_{Pk} \cdot \mathbf{S}_k \right] \frac{\mathbf{S}_k}{\|\mathbf{S}_k\|} \right\}. \quad (6.26)$$

La diferencia entre la velocidad dada en la Ec. (6.23) y la aproximación espacial utilizada en esta nueva fórmula de reconstrucción por medio de la Ec. (6.24) es,

$$\mathbf{u}_k^* - \mathbf{u}_k = [(\overline{\nabla \mathbf{u}_P})_k - \nabla \mathbf{u}_k] \cdot \mathbf{d}_{Pk}. \quad (6.27)$$

El error numérico introducido en la velocidad reconstruida es proporcional a la Ec. (6.27), la cual es equivalente a la versión discreta de una derivada de tercer orden [71]. La interpolación de Rhie-Chow [77] incluye un término similar pero basado en gradientes de presión. De forma análoga a la interpolación de Rhie-Chow, el nuevo operador de reconstrucción agrega un efecto difusivo sobre la velocidad filtrando errores de alta frecuencia en el campo de velocidades reconstruido.

6.3.2. Precisión espacial de los operadores de reconstrucción

A continuación se evalúa la precisión espacial de los operadores de reconstrucción por medio del siguiente test ideado para verificar el requerimiento impuesto por la Ec. (6.12): un campo vectorial centrado en celdas \mathbf{u}_P se interpola linealmente a las caras obteniendo los flujos ϕ_k . Luego, estos flujos son reconstruidos a valores en celdas definiendo finalmente el campo $\tilde{\mathbf{u}}_P$. La diferencia en media cuadrática

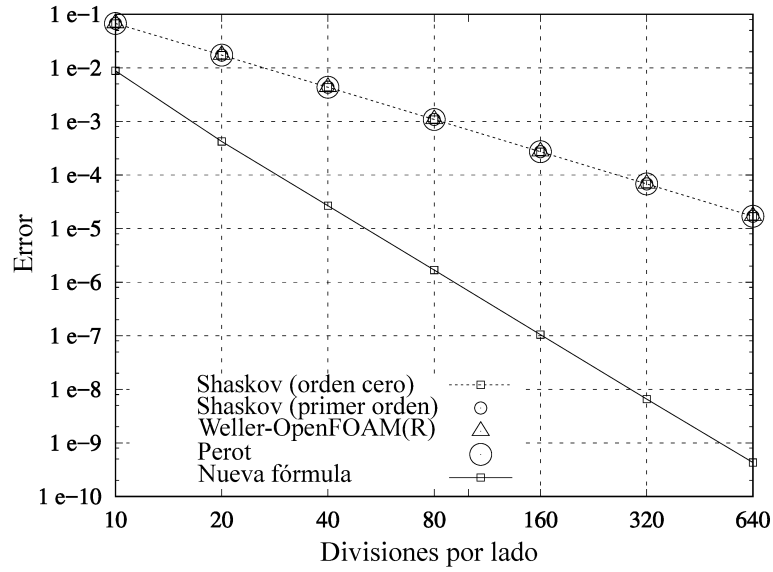


Figura 6.4: Error E_2 para los operadores de reconstrucción.

entre los campos iniciales y finales es el error de este problema numérico el cual se computa como,

$$E_2(\mathbf{u}_P) = \sqrt{\frac{\sum_i^n (\mathbf{u}_P - \tilde{\mathbf{u}}_P)^2}{n}}, \quad (6.28)$$

donde n es igual al número de celdas de la malla. El campo adoptado para este problema es el estado inicial del campo de velocidades del conocido problema bidimensional de Taylor-Green descrito en el trabajo de Mirkov et al. [78]:

$$\begin{aligned} u_x(x, y) &= -\sin(x) \cos(y) \\ u_y(x, y) &= \cos(x) \sin(y). \end{aligned} \quad (6.29)$$

El procedimiento de estudio se aplica sobre un dominio cuadrado con una longitud de lado igual a 2π . En vistas de analizar la convergencia del error, la resolución de la malla se incrementa con un factor de dos partiendo desde 10 hasta 640 divisiones por lado. Los resultados del problema se presentan en la Fig. 6.4 indicando el error en función de la resolución de malla. Los métodos de reconstrucción descritos por Shashkov et al., Weller et al. y Perot et al. demuestran convergencia de segundo orden. De acuerdo a la restricción planteada por la Ec. (6.12), el uso de estos operadores para definir la velocidad en celdas debe converger con un orden superior a tres para evitar reducir la precisión del *solver* por debajo de segundo orden. La nueva fórmula de reconstrucción descrita en la Ec. (6.26) demuestra una convergencia de cuarto orden satisfaciendo el requerimiento impuesto en la Ec. (6.12).

Resta verificar si la nueva fórmula de reconstrucción satisface el segundo requerimiento definido en la Ec. (6.16). Con este objetivo se propone un segundo test en donde el error en media cuadrática se calcula

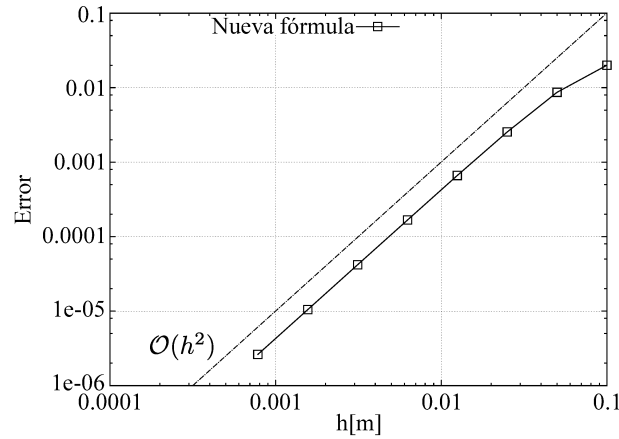


Figura 6.5: Convergencia del error de la nueva fórmula de reconstrucción en problema de cálculo de gradiente en centro de celda.

según,

$$E_2(\nabla\psi_P) = \sqrt{\frac{\sum_1^n (\nabla\psi_P - \nabla\psi_P^{\mathcal{R}})^2}{n}}, \quad (6.30)$$

donde $\nabla\psi_P$ es el gradiente calculado en centro de celdas mientras que $\nabla\psi_P^{\mathcal{R}}$ es,

$$\nabla\psi_P^{\mathcal{R}} = \mathcal{R}(\nabla\psi_k \cdot \mathbf{S}_k). \quad (6.31)$$

El campo utilizado en el test es una función Gaussiana:

$$\psi(x, y) = \exp\left[\frac{(x^2 + y^2)}{2}\right]. \quad (6.32)$$

El dominio de estudio es un cuadrado con lados de 20 m. Análogamente a lo hecho en el problema anterior, el cómputo del error se realiza refinando la malla variando entre 20 y 250 divisiones por lado. Los resultados se presentan en la Fig. 6.5 la cual demuestra que el nuevo operador de reconstrucción tiene una precisión de segundo orden en el cálculo del gradiente satisfaciendo la cota de error dada en Ec. (6.16).

A consecuencia de los resultados obtenidos por el nuevo operador de reconstrucción se concluye que este satisface los requerimientos impuestos para conservar el orden de precisión de segundo orden espacial y temporal del algoritmo original.

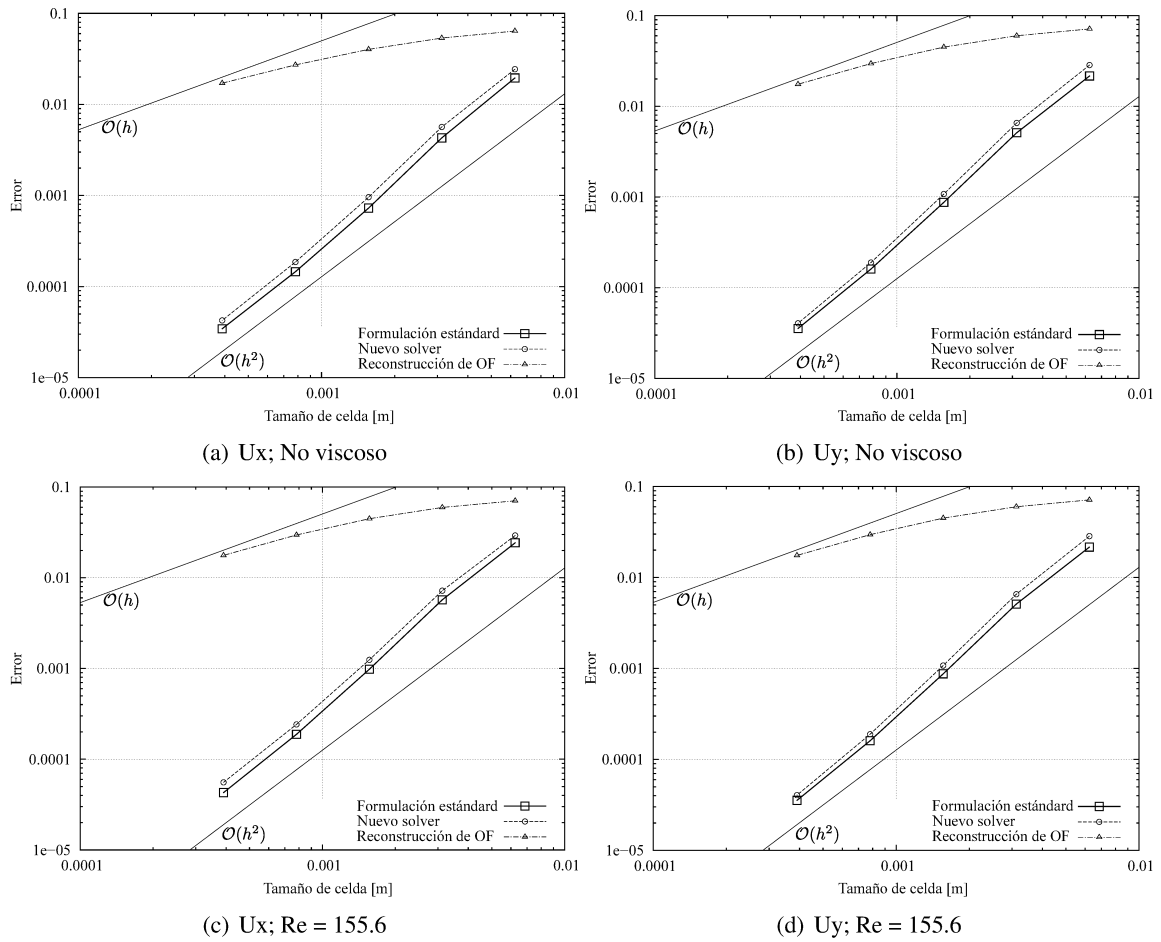


Figura 6.6: Error en las componentes de la velocidad usando dos valores de viscosidad para las tres formulaciones.

6.4. Ejemplos de aplicación

6.4.1. Resolución de un problema de flujo con solución analítica

En esta sección se analiza el orden de convergencia de un *solver* de flujo basado en la reconstrucción de flujos con el nuevo operador descrito en los párrafos precedentes. El problema a resolver es el transporte de un vórtice tal cual se definió en la Ec. (4.14). El caso es resuelto con el *solver* de flujo basado en el algoritmo SIMPLE-PISO utilizando dos métodos para definir la corrección explícita de la velocidad: la corrección propuesta en este capítulo y una alternativa análoga pero utilizando el operador de reconstrucción nativo del paquete de librerías OpeanFOAM(R) descrito en los trabajos de Weller et al. [74, 75]. Como solución de referencia se incluye la solución resultante del algoritmo original. Las curvas de error de las simulaciones se disponen en la Fig. 6.6 de donde se observa segundo orden de convergencia para el *solver* que utiliza el nuevo operador de reconstrucción. Además, el error absoluto en contraste con los resultados del *solver* original es relativamente pequeño. Por otro lado, los resultados

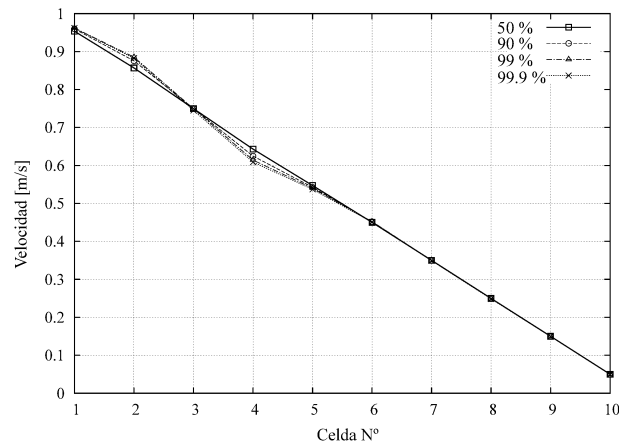


Figura 6.7: Valor de la velocidad en las celdas del dominio unidimensional para diferentes grados de compresión de la celda deformable.

correspondientes al operador de reconstrucción de bajo orden reduce la precisión del método PISO por debajo de primer orden.

6.4.2. Compresión de una celda en un caso unidimensional

En este ejemplo se resuelve la compresión unidimensional esquematizada en la Fig. 6.1 en donde la celda a deformar se comprime un 50 %, 90 %, 99 % y 99,9 %. En la Fig. 6.2 se mostraron los resultados de la magnitud de la velocidad que se obtienen utilizando la formulación clásica del método PISO para volúmenes finitos colocados en celdas. En este caso los valores de velocidad resultado de incluir la reconstrucción de flujos como método de corregir la velocidad en el bucle PISO están libres de oscilaciones espurias tal cual se aprecia en la Fig. 6.7.

6.4.3. Viaje de una onda de presión en una cavidad cúbica

En este problema se resuelve el desplazamiento de una onda de presión móvil dentro de una cavidad cúbica por medio de una formulación compresible del tipo SIMPLE-PISO. Al comienzo de la simulación, la cavidad está dividida en dos zonas de presión. La mitad del dominio (Ω_A) contiene aire a una presión p_A mientras que la otra mitad (Ω_B) está a presión p_B . El dominio Ω es un cubo de 1 m de lado donde la pared inicial que separa las zonas de presión esta dispuesta normal al eje x tal como se muestra en la Fig. 6.8. Las condiciones iniciales del problema se definen a continuación:

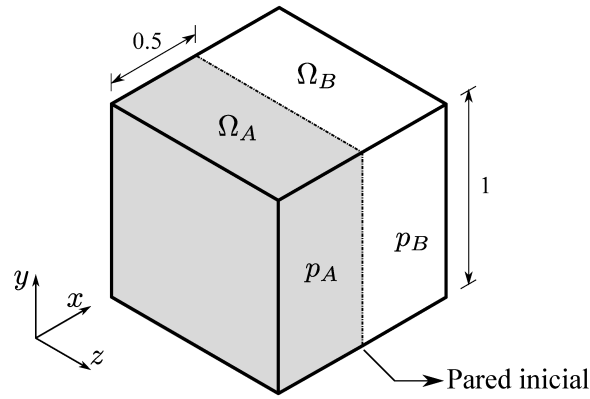


Figura 6.8: Dominio cúbico que contiene dos regiones de aire sometidos a diferentes presiones.

$$\begin{aligned}
 \mathbf{U}(\mathbf{x}, 0) &= (0, 0, 0) \text{ m/s} & \forall \mathbf{x} \in \Omega \\
 T(\mathbf{x}, 0) &= 276 \text{ K} & \forall \mathbf{x} \in \Omega \\
 p(\mathbf{x}, 0) &= 110000 \text{ Pa} & \forall \mathbf{x} \in \Omega_A \\
 p(\mathbf{x}, 0) &= 100000 \text{ Pa} & \forall \mathbf{x} \in \Omega_B.
 \end{aligned} \tag{6.33}$$

En las paredes se configura condición de adherencia para la velocidad y adiabáticas para la transferencia térmica. El problema se resuelve con esquemas de primer orden para las operadores espaciales y temporales respectivamente para evitar posibles oscilaciones debido a esquemas de alto orden. Todas las simulaciones se realizan con un paso temporal igual a $\Delta t = 3 \times 10^{-4}$ s. Al comienzo del problema, se retira la pared inicial y seguidamente, dos ondas de presión comienzan a desplazarse en direcciones opuestas a lo largo del eje x . A medida que estas ondas se disipan por causa de la viscosidad del aire, la presión en la cavidad se uniformiza hasta alcanzar un valor constante en todo el dominio. La reflexión de las ondas de presión contra las paredes produce oscilaciones físicas en las propiedades del aire con un período de tiempo igual a $T \approx L/c$, donde L es la longitud de un lado de la cavidad y c es la velocidad del sonido en el aire. El problema se resuelve con un *solver* SIMPLE-PISO con su formulación original generando velocidades oscilatorias según se muestra en la Fig. 6.9. En esta figura se muestran los valores de las tres componentes de velocidad sobre una línea paralela al eje x y coincidente con el centro geométrico de la cavidad. Las ondas de velocidad se disipan a medida que transcurre el tiempo disminuyendo la magnitud de la velocidad tal como se muestra en la Fig. 6.9. Las oscilaciones de velocidad aparecen en todas las componentes de la velocidad y su amplitudes crecen con el avance temporal. Por el contrario, el nuevo *solver* en base a reconstrucción de flujos define velocidades libres de oscilaciones espúreas según se verifica en la Fig. 6.10.

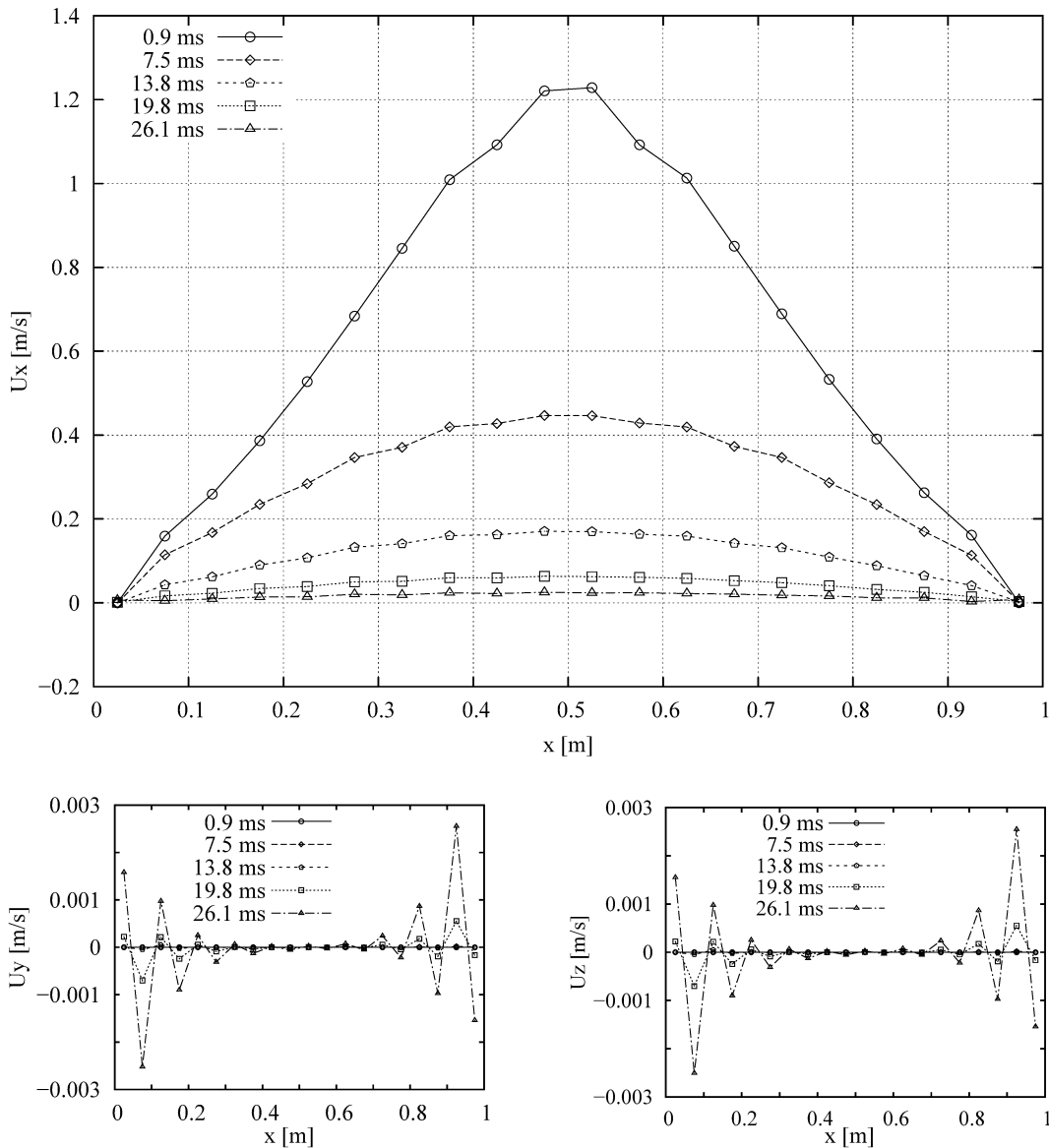


Figura 6.9: Resultados utilizando el *solver* estándar para las tres componentes de la velocidad.

6.5. Notas finales

En este capítulo se desarrolló y describió un nuevo *solver* de flujo que elimina oscilaciones espurias en la velocidad. Para esto, se propuso una estrategia de reconstrucción de flujos en las caras para determinar los valores de velocidad en las celdas. En vistas de preservar la exactitud de segundo orden de la formulación estándar se imponen dos requerimientos que definen cotas mínimas a la exactitud espacial del operador de reconstrucción. Para satisfacer estas condiciones, se diseñó una nueva expresión para reconstruir los flujos en velocidades basado en el uso de un gradiente compacto definido en las caras.

A partir del análisis de un caso problemático se concluyó que las oscilaciones potencialmente presentes en los campos H_P y en a_P no son corregidas por la ecuación de presión y se introducen directamente

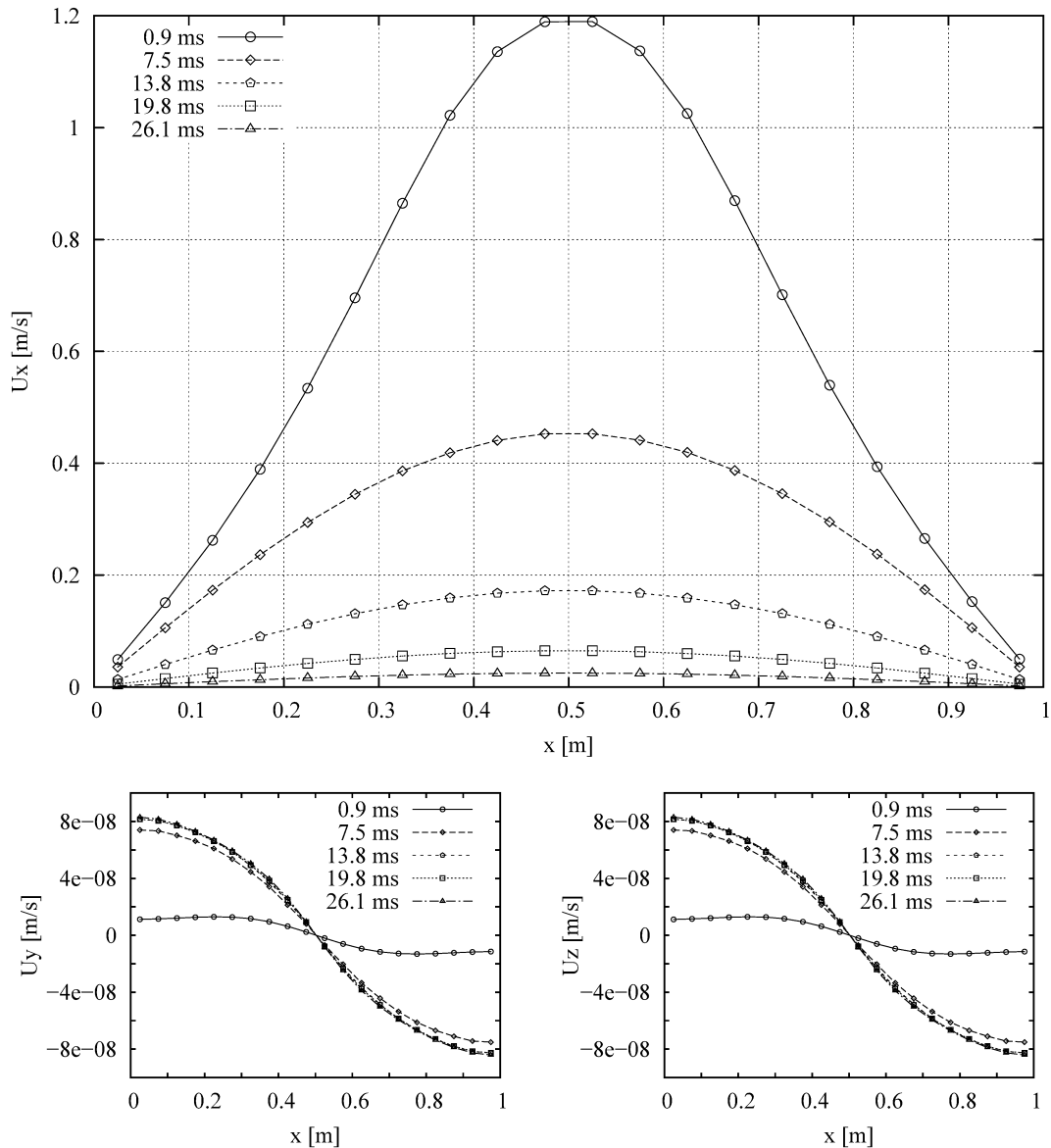


Figura 6.10: Resultados utilizando reconstrucción de flujos para las tres componentes de la velocidad.

en la velocidad. Por otra parte, los flujos determinados a partir de resolver la ecuación de presión están libres de oscilaciones debido al filtro realizado por medio de la interpolación lineal.

Por esta razón, la definición de la velocidad a través de la reconstrucción de flujos en caras reemplaza a la corrección explícita de la velocidad eliminando las oscilaciones de alta frecuencia. Este enfoque es equivalente a emplear un gradiente de presión modificado que introduce difusión numérica proporcional a una derivada de alto orden del término H_P que atenúa las oscilaciones espurias de forma análoga al accionar de la corrección de Rhie-Chow sobre la presión.

Se resolvieron dos tests de flujo compresible para validar las propiedades anti-oscilatorias del *solver* desarrollado. En ambos problemas se eliminaron las oscilaciones de velocidad por medio del uso del

nuevo operador de reconstrucción. Es valioso aclarar que la implementación de esta nueva estrategia no es intrusiva sobre la estructura general del algoritmo SIMPLE-PISO y puede ser implementada de forma directa reemplazando el cálculo del gradiente en la corrección explícita de la velocidad.

Capítulo 7

Modelado de la inyección de combustible

7.1. Introducción

La mejora continua de los procesos de inyección de combustible es un requisito fundamental en el desarrollo de nuevos motores de combustión interna. El objetivo es disminuir las emisiones contaminantes y aumentar la eficiencia energética de los ciclos termodinámicos por medio de perfeccionar el proceso de combustión del combustible. Con el fin de elaborar nuevos diseños, las herramientas de simulación computacional tienen un rol muy importante y son un complemento a los ensayos experimentales. Mediante la simulación numérica se consigue una vasta información del fenómeno estudiado y además, es posible obtener datos en lugares de difícil acceso por parte de las facilidades experimentales. En este contexto, el desarrollo y perfeccionamiento de las herramientas de simulación en general, y en particular de los procesos de inyección, en complemento con el área experimental es la línea de investigación principal para la optimización de los motores de combustión interna. El fenómeno de inyección de combustible incluye la formación del *spray* mediante la atomización del combustible y su posterior evaporación mezclando el combustible con el oxidante de su entorno. El objetivo es lograr condiciones de mezclado, de temperatura y presión que permitan reaccionar toda la masa del combustible de forma perfecta y completa. De aquí la importancia de entender y poder mejorar este proceso que es hoy una de las principales alternativas que ofrece el motor de combustión interna para poder estar a la altura de los requerimientos ambientales de las normas tanto europeas (EURO) como americanas (EPA).

Los modelos numéricos de inyección se pueden realizar con diferentes grados de simplificación o modelado. En general, a mayor simplificación se obtiene una mayor velocidad de cómputo. De forma contraria, cuanto más detalle se incluye en el modelo, mayores son los recursos computacionales necesarios y el tiempo de cálculo requerido. Dentro de este marco, los modelos más simples utilizan aproximaciones de orden cero basados en conceptos termodinámicos [79]. En el otro extremo se posi-

cionan los modelos basados en la mecánica de fluidos computacional en donde a su vez, existen una gran variedad de estrategias. Los métodos más exhaustivos se basan en la simulación numérica directa de las ecuaciones de gobierno (DNS). Ejemplos de simulaciones de un *spray* líquido utilizando DNS se encuentran en los trabajos de Ménard *et al.* [80], y Shinjo y Umemura [81]. Por medio de esta estrategia se puede obtener información detallada de la primera fase de la inyección. Sin embargo, estas simulaciones requieren de un costo computacional muy elevado y entonces su empleo está particularmente destinado al estudio físico del proceso de inyección o bien para la validación y ajuste de modelos más simplificados [82]. En el trabajo de Vallet y Borghi [83] se propone una nueva estrategia de simulación de la inyección de combustible denominada ELSA (*Eulerian Lagrangian Spray Atomization*). Aquí se incluye dentro de una formulación multifásica una nueva variable que representa la superficie de la masa líquida la cual determina la velocidad de transferencia de masa, energía y momento. Esta estrategia ha tenido un amplio crecimiento en los últimos años siendo su principal ventaja su buena relación entre exactitud y costo computacional [84]. No obstante, la técnica más utilizada y tradicional para la resolución del proceso de inyección en motores de combustión interna se basa en una formulación Lagrangiana por medio del método de gota discreta (DDM o DPM, por sus siglas en inglés) [27]. Existen una gran cantidad de trabajos de aplicación de técnicas tipo DDM en motores ya que el modelado de la fase combustible es poco intrusiva dentro del modelo de la fase continua o gaseosa lo cual su combinación con *solvers* de flujo compresible es relativamente sencilla [85, 86, 87]. En este modelo, la fase líquida que representa el combustible inyectado dentro del cilindro se modela por medio de un enfoque Lagrangiano donde las gotas de combustible son consideradas por partículas o parcelas. Cada parcela se representa a través de un punto localizado en una determinada posición del espacio el cual posee varias propiedades que caracterizan al conjunto de gotas representadas, como por ejemplo, su diámetro, su temperatura y su velocidad. A su vez, el modelo Lagrangiano interactúa con la fase gaseosa resuelta sobre un dominio discretizado por lo que existe un conjunto de arreglos de datos que proporciona la conectividad entre las partículas y la malla del problema.

En este contexto, este capítulo describe el modelo utilizado para resolver la inyección directa de gasolina en motores de combustión interna. En un primer lugar se presentan las técnicas utilizadas para resolver la fase Lagrangiana compuesta por partículas dentro de un contexto de mallas dinámicas. Posteriormente se describe el algoritmo de acople entre la fase líquida de partículas para luego describir los modelos elegidos para resolver el proceso de atomización del chorro líquido inyectado. Finalmente el modelo de inyección se calibra a partir de experimentos realizados sobre un inyector multiorificio.

7.2. Formulación Lagrangiana en mallas dinámicas

En simulaciones de malla dinámica con cambios de topología, como sucede en las técnicas de pseudo-supermalla y *layering*, las conectividades entre puntos, caras y celdas de la malla varían. De la misma forma, se altera la conectividad entre las partículas y la malla. Este inconveniente debe ser resuelto por el modelo Lagrangiano el cual debe estar especialmente concebido para funcionar con determinadas herramientas de malla dinámica. En este sentido esta tesis presenta un modelo de seguimiento de partículas para simular la inyección de combustible en motores de combustión interna que esta adaptado para funcionar con las técnicas presentadas en capítulos previos: la técnica de interfaz de pseudo-supermallas con solapamiento parcial y la estrategia combinada de *layering* con deformación de malla. El modelo Lagrangiano se diseña para cómputo en paralelo sin necesidad de imponer restricciones geométricas al momento de particionar el dominio, característica de gran utilidad para el usuario de estos códigos computacionales.

7.2.1. Seguimiento de partículas en mallas poliédricas arbitrarias

El seguimiento de partículas dentro de una malla de volúmenes finitos consiste en relacionar su posición con datos que permitan localizarlas sobre la malla con el objetivo de relacionar cada partícula o parcela (fase discreta) con la fase continua. En la presente implementación se adopta una estrategia de seguimiento de partículas basada en una descomposición de la malla en tetraedros donde la ubicación de la partícula dentro de un tetraedro se precisa por medio de coordenadas baricéntricas. En este sentido, la partícula se localiza en la malla por medio del índice de la celda en la que se encuentra, luego por el índice del tetraedro interno de la celda y finalmente por las coordenadas baricéntricas que permiten localizar el punto en que se encuentra la partícula en función de las coordenadas de los vértices del tetraedro. Esta forma de ubicar una partícula dentro de una malla arbitraria se esquematiza en la Fig. 7.1.

La relación entre las coordenadas baricéntricas, $\Lambda_P = (\lambda_a, \lambda_b, \lambda_c, \lambda_d)$ y las coordenadas globales o

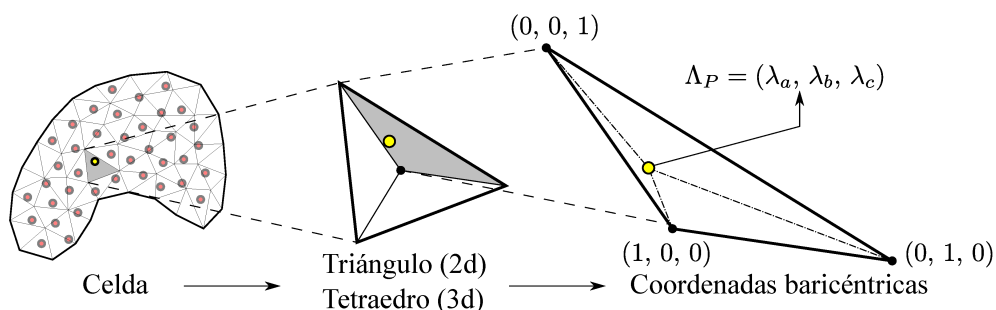


Figura 7.1: Esquema bidimensional que explica el método de localización de una partícula en una malla arbitraria de volúmenes finitos.

cartesianas $\mathbf{r}_P = (x_P, y_P, z_P)$ se presenta en la siguiente ecuación,

$$\lambda_a \mathbf{P}_a + \lambda_b \mathbf{P}_b + \lambda_c \mathbf{P}_c + \lambda_d \mathbf{P}_d = \mathbf{r}_P, \quad (7.1)$$

en donde $\mathbf{P}_a \dots \mathbf{P}_d$ son las coordenadas globales de los vértices del tetraedro. La ecuación vectorial dada en (7.1) tiene infinitas soluciones para las incógnitas $\lambda_a \dots \lambda_d$. Para determinar el sistema se impone como restricción que la suma de las coordenadas baricéntricas sea igual a la unidad,

$$\lambda_a + \lambda_b + \lambda_c + \lambda_d = 1, \quad (7.2)$$

por lo que podemos expresar una coordenada baricéntrica como función de las restantes. Por ejemplo,

$$\lambda_a = 1 - \lambda_b - \lambda_c - \lambda_d. \quad (7.3)$$

Reemplazando esta última ecuación en (7.1),

$$(1 - \lambda_b - \lambda_c - \lambda_d) \mathbf{P}_a + \lambda_b \mathbf{P}_b + \lambda_c \mathbf{P}_c + \lambda_d \mathbf{P}_d = \mathbf{r}_P, \quad (7.4)$$

y reagrupando se llega a,

$$\lambda_b (\mathbf{P}_b - \mathbf{P}_a) + \lambda_c (\mathbf{P}_c - \mathbf{P}_a) + \lambda_d (\mathbf{P}_d - \mathbf{P}_a) = \mathbf{r}_P - \mathbf{P}_a, \quad (7.5)$$

que es un sistema con solución única para las incógnitas λ_b , λ_c y λ_d . Para simplificar la notación se introducen los siguientes vectores:

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_{ba} &= \mathbf{P}_b - \mathbf{P}_a \\ \mathbf{P}_{ca} &= \mathbf{P}_c - \mathbf{P}_a \\ \mathbf{P}_{da} &= \mathbf{P}_d - \mathbf{P}_a \\ \Delta \mathbf{r}_a &= \mathbf{r}_P - \mathbf{P}_a \\ \mathbf{\Lambda}^* &= (\lambda_b, \lambda_c, \lambda_d). \end{aligned} \quad (7.6)$$

De forma matricial la Ec. (7.5) se expresa como,

$$\mathbf{T} \cdot \mathbf{\Lambda}^* = \Delta \mathbf{r}_a, \quad (7.7)$$

donde las columnas de la matriz T están formadas por los vectores P_{ba} , P_{ca} y P_{da} ,

$$T = [P_{ba}, P_{ca}, P_{da}]. \quad (7.8)$$

Las coordenadas baricéntricas Λ^* se obtienen invirtiendo la matriz T ,

$$\Lambda^* = T^{-1} \cdot \Delta r_a, \quad (7.9)$$

en donde la inversa de T se puede calcular como cociente de productos vectoriales y mixtos, a saber:

$$T^{-1} = \frac{1}{P_{ba} \cdot (P_{ca} \times P_{da})} [(P_{ca} \times P_{da}), (P_{ba} \times P_{da}), (P_{ba} \times P_{ca})]. \quad (7.10)$$

Finalmente, una vez resuelto el vector Λ^* se completa la definición de las coordenadas baricéntricas por medio de determinar la coordenada λ_a usando la Ec. (7.3).

El posicionamiento inicial de una partícula se realiza de la siguiente manera: partiendo de su posición global se determina la celda en la cual esta se aloja por medio de un esquema tipo árbol, luego se reposiciona la partícula dentro de un tetraedro arbitrario de la celda coincidiendo con su centroide que es equivalente al primer punto de los cuatro que definen al tetraedro en la presente implementación. Posteriormente se calcula el desplazamiento relativo que tiene que hacer la partícula para desplazarse desde el centroide de la celda a su posición original. Este desplazamiento se calcula en coordenadas baricéntricas que finalmente se suma a la posición del centroide definiendo la posición final de la partícula en el sistema de posicionamiento del tetraedro.

Una vez ubicada la partícula mediante coordenadas baricéntricas, el proceso de seguimiento consiste en desplazar cada partícula hasta que colisione con alguna de las caras del tetraedro. Este evento se identifica con un cambio de signo en las coordenadas baricéntricas: estas son positivas cuando las partículas se encuentran en el interior del tetraedro y pasan a ser negativas en alguna de las coordenadas cuando la partícula atraviesa la cara opuesta asociada al vértice de la coordenada en cuestión. Si la cara del tetraedro es interna a la celda, la partícula cambia de tetraedro y se actualizan las coordenadas baricéntricas consecuentemente. Por otro lado, si la partícula colisiona con una cara de la celda, se debe actualizar el tetraedro como también el índice de la nueva celda en la que la partícula se encuentra. En el caso de que el desplazamiento de la partícula sea lo suficientemente pequeño para permanecer dentro del mismo tetraedro solamente se actualizan sus coordenadas baricéntricas.

Para determinar las nuevas coordenadas baricéntricas de una partícula o eventualmente determinar si la partícula colisiona con una de las caras del tetraedro, primero se computa el desplazamiento relativo en coordenadas baricéntricas $\Delta \Lambda$ a partir del correspondiente en coordenadas globales Δr .

El cómputo del desplazamiento relativo en coordenadas baricéntricas se calcula como la diferencia entre dos posiciones cuya resta es el desplazamiento relativo buscado. De forma de aprovechar la expresión (7.9), se propone utilizar como punto base o de referencia al primer punto del tetraedro P_a el cual tiene como coordenadas baricéntricas al vector $\Lambda_a = (1, 0, 0, 0)$. El segundo punto se obtiene sumando a P_a el desplazamiento relativo,

$$\mathbf{r}_2 = \mathbf{P}_a + \Delta \mathbf{r}. \quad (7.11)$$

Las coordenadas baricéntricas de este segundo punto se obtienen por medio de la Ec. (7.9) donde el vector $\Delta \mathbf{r}_a$ coincide con el vector de desplazamiento relativo buscado,

$$\Delta \mathbf{r}_a = \Delta \mathbf{r}. \quad (7.12)$$

A partir de resolver la Ec. (7.9), se obtienen las coordenadas baricéntricas Λ_2^* de este segundo punto. Seguidamente,

$$\Lambda_2 = [1 - (\lambda_b + \lambda_c + \lambda_d), \lambda_b, \lambda_c, \lambda_d]. \quad (7.13)$$

Posteriormente, se computa el desplazamiento relativo en coordenadas baricéntricas,

$$\Delta \Lambda = \Lambda_2 - \Lambda_a = [-(\lambda_b + \lambda_c + \lambda_d), \lambda_b, \lambda_c, \lambda_d] = [\Delta \lambda_a, \Delta \lambda_b, \Delta \lambda_c, \Delta \lambda_d]. \quad (7.14)$$

Por último y considerando que la partícula se encuentra inicialmente en la posición Λ_P^0 , su posición final Λ_P^1 es,

$$\Lambda_P^1 = \Lambda_P^0 + \Delta \Lambda. \quad (7.15)$$

Si una de las componentes del vector Λ_P^1 es negativa entonces la partícula se posiciona fuera del tetraedro. Para encontrar el punto y el tiempo exacto de la colisión entre la partícula y una de las caras del tetraedro se parametriza el movimiento de la partícula por medio de α :

$$\Lambda_P(\alpha) = \Lambda_P^0 + \alpha \Delta \Lambda, \quad (7.16)$$

de forma que si $\alpha = 0$ la partícula se encuentra en la posición inicial y si $\alpha = 1$ la partícula se encuentra en la posición final. En el caso de que la partícula colisione con una de las caras del tetraedro, entonces la coordenada baricéntrica respectiva al punto opuesto de la cara en cuestión se anula. Para determinar cuales de las caras es colisionada por la partícula se despeja por cada componente baricéntrica el valor

de $\alpha_a \dots \alpha_d$ que genera que tal coordenada se anule,

$$\begin{aligned}
 \Lambda_a^0 + \alpha_a \Delta \Lambda_a = 0 &\implies \alpha_a = -\frac{\Lambda_a^0}{\Delta \Lambda_a} \\
 \Lambda_b^0 + \alpha_b \Delta \Lambda_b = 0 &\implies \alpha_b = -\frac{\Lambda_b^0}{\Delta \Lambda_b} \\
 \Lambda_c^0 + \alpha_c \Delta \Lambda_c = 0 &\implies \alpha_c = -\frac{\Lambda_c^0}{\Delta \Lambda_c} \\
 \Lambda_d^0 + \alpha_d \Delta \Lambda_d = 0 &\implies \alpha_d = -\frac{\Lambda_d^0}{\Delta \Lambda_d}.
 \end{aligned} \tag{7.17}$$

Los coeficientes $\alpha_a \dots \alpha_d$ determinan el movimiento relativo de la partícula en relación a cada una de las caras del tetraedro respectivamente. Si el coeficiente $\alpha_i < 0$ entonces la partícula se aleja de la cara i y no existe colisión. Si $\alpha_i > 1$ entonces la partícula se acerca a la cara i pero no colisiona. Por último si $0 \leq \alpha_i \leq 1$ la partícula se dirige en dirección a la cara i y la colisiona en la fracción α_i de su trayecto. Si ninguno de los coeficientes α_i se encuentra entre 0 y 1 entonces la partícula permanece dentro de su tetraedro y por lo tanto se actualiza su posición computando la Ec. (7.16). En este caso el seguimiento de la partícula concluye. De forma contraria, si alguno de los coeficientes α_i se encuentra entre 0 y 1 entonces se busca aquel que tenga el valor mínimo al cual se lo denomina como α'_i ,

$$\alpha'_i = \min \{ \alpha_i : 0 \leq \alpha_i \leq 1 \}. \tag{7.18}$$

El coeficiente α'_i determina la fracción del desplazamiento relativo $\Delta \Lambda$ en el cual la partícula colisiona con una de las caras del tetraedro. De esta forma se actualiza la partícula utilizando $\alpha = \alpha'_i$ en (7.16),

$$\Lambda'_P = \Lambda_P^0 + \alpha'_i \Delta \Lambda \tag{7.19}$$

Debido a que la partícula cambia de tetraedro, el triángulo en el cual se encuentra cambia de orientación lo que se corresponde con una permutación de sus coordenadas baricéntricas. El algoritmo de seguimiento continúa partiendo desde su nueva posición, en el nuevo tetraedro, con la fracción del desplazamiento relativo por completar: $\left\{ \left[1 - \Lambda_P(\alpha'_i) \right] \Delta \mathbf{r} \right\}$. El desarrollo presentado en los párrafos precedentes se explica gráficamente en la Fig. 7.2 para un problema bidimensional. En esta figura se describe el seguimiento de una partícula que parte inicialmente desde la posición Λ_P^0 la cual se desea desplazar hasta la posición Λ_P^1 . Siguiendo este objetivo, se calcula el desplazamiento relativo $\Delta \Lambda = \Lambda_2 - \Lambda_0$ para luego obtener los coeficientes $\alpha_a \dots \alpha_c$ aplicando la Ec. (7.17).

Las etapas descritas en los párrafos precedentes se resumen en el Algoritmo 5.

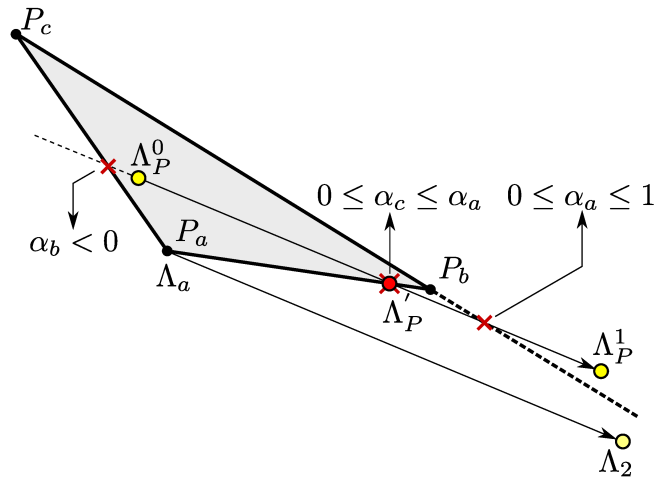


Figura 7.2: Esquema bidimensional que explica el seguimiento de una partícula dentro de un triángulo para un desplazamiento relativo determinado. En una fracción α_c del desplazamiento la partícula colisiona con una de las caras del triángulo.

Algoritmo 5 Algoritmo de seguimiento de una partícula sobre una malla poliédrica arbitraria.

1. Posicionamiento inicial

- a) Se busca la celda en la que se encuentra la partícula a través de una estructura del tipo árbol
- b) Se ubica temporalmente la partícula en un tetraedro arbitrario y coincidente con el centroide de la celda
- c) Se calcula el desplazamiento necesario para moverse a su posición original en coordenadas baricéntricas para luego adicionar este desplazamiento a la posición conocida del centroide determinando las coordenadas de su posición original en el marco de referencia del tetraedro

2. Seguimiento

- a) Se calcula el desplazamiento relativo en coordenadas baricéntricas
 - b) Se define si la partícula egresa de su tetraedro
 - 1) La partícula no colisiona con una de las caras del tetraedro:
 - a' La partícula se mueve a una posición interna del tetraedro. Se actualizan sus coordenadas baricéntricas y concluye el seguimiento
 - 2) La partícula colisiona con una de las caras del tetraedro:
 - a' La partícula egresa del tetraedro. Si la cara es interna a la celda entonces la partícula modifica su tetraedro dentro de la celda. Si la cara es de borde, entonces la partícula se mueve hacia un tetraedro localizado en una nueva celda
 - b' Se actualizan las coordenadas baricéntricas por medio de permutar las coordenadas baricéntricas debido al cambio de orientación del triángulo
 - c' Se calcula la fracción restante del desplazamiento en las coordenadas correspondientes al nuevo tetraedro
 - d' Se vuelve al punto 2. b) del presente algoritmo.
-

7.2.2. Partículas e interfaces de pseudo-supermalla

En el caso de que una partícula llegue a una cara de interfaz de pseudo-supermalla, se debe evaluar si esta cara corresponde al sector acoplado o no acoplado de la interfaz.

Si pertenece al sector no acoplado se procede a trabajar con la cara correspondiente del borde barrera, el cual puede tener condiciones de pared, o bien, alguna otra configuración, como puede ser una condición de salida. En estas situaciones la partícula rebotará o bien saldrá del dominio respectivamente.

En el caso de que la partícula se encuentre sobre una cara totalmente acoplada, entonces esta cruzará a través de la interfaz.

Si la cara pertenece a un sector parcialmente solapado, se asume esta como si fuera una cara totalmente acoplada. En consecuencia, la partícula cruzará la interfaz.

Para averiguar a que sector se corresponde una cara de pseudo-supermalla se computa la relación entre su área geométrica y su área real resultante del método de pseudo-supermalla. Si esta relación es cercana a cero, entonces la cara pertenece al sector no acoplado, en el caso contrario, la cara se asume dentro del sector acoplado:

$$\begin{aligned} \text{si } \frac{A_g(K)}{A(K)} > \epsilon &\implies \text{ cara acoplada, } K \in \{\tau_{C_A}, \tau_{C_B}\}, \\ \text{si } \frac{A_g(K)}{A(K)} < \epsilon &\implies \text{ cara no acoplada, } K \in \{\tau_{A_b}, \tau_{B_b}\}, \end{aligned} \quad (7.20)$$

donde ϵ es una tolerancia cercana a cero, $A_g(K)$ es el área geométrica de la cara K y $A(K)$ es el área efectiva determinada por la estrategia de pseudo-supermallas.

7.2.3. Partículas y layering

Al realizarse cambios topológicos se invalida la conectividad existente entre las partículas y la malla. Por lo tanto, se deben relocalizar las partículas para definir sus nuevas coordenadas baricéntricas de acuerdo al nuevo estado de la malla. El proceso de posicionamiento es idéntico al descrito en el Algoritmo 5 en donde la celda en la cual se encuentra la partícula se define por un mapa que relaciona el nuevo estado de malla con la malla previa.

Cuando se adiciona una nueva capa de celdas, las celdas insertadas poseen inicialmente volumen nulo para luego crecer y determinar el nuevo estado de malla. A este proceso se lo denomina inflación tal cual fue descrito en la Fig. 5.7. Al momento de localizar una partícula en una de las celdas agregadas, la característica de volumen nulo no es compatible con el algoritmo de seguimiento propuesto (Algoritmo 5). Para resolver este inconveniente se evita el proceso de inflación. En su reemplazo, se considera que la

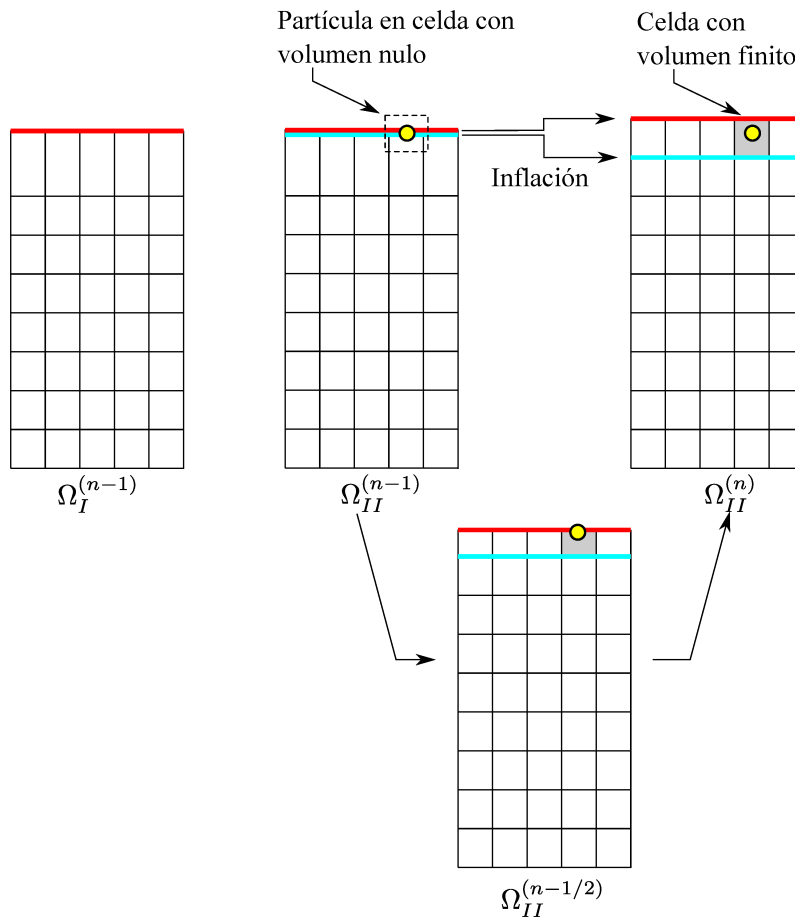


Figura 7.3: Sustitución del proceso de inflación para posibilitar el seguimiento de partículas localizadas en una nueva celda de malla.

nueva celda nace con un volumen finito. En la Fig. 7.3 se explica gráficamente como se interpreta una nueva capa de celdas al momento de realizar el seguimiento de partículas.

7.2.4. Paralelización

La paralelización del método de partículas se realiza con el concepto de partición de dominios en donde cada procesador se ocupa de las partículas que están localizadas en su correspondiente subdominio. Cuando las partículas llegan a un borde límite entre procesadores estas cambian de unidad de proceso estableciendo comunicación de partículas entre los procesadores. En el caso de que la partícula llegue a una cara de pseudo-supermalla su próximo destino está en una de las caras de la interfaz opuesta. A diferencia de un borde interprocesador, una interfaz de pseudo-supermalla puede estar conectada con más de un procesador. En la Fig. 7.4 se presenta un dominio arbitrario el cual posee una interfaz de pseudo-supermalla que lo divide en dos partes. A su vez, el dominio está particionado en 6 subdominios distribuidos sobre 6 procesadores respectivamente. En el ejemplo, la interfaz de pseudo-supermalla sirve

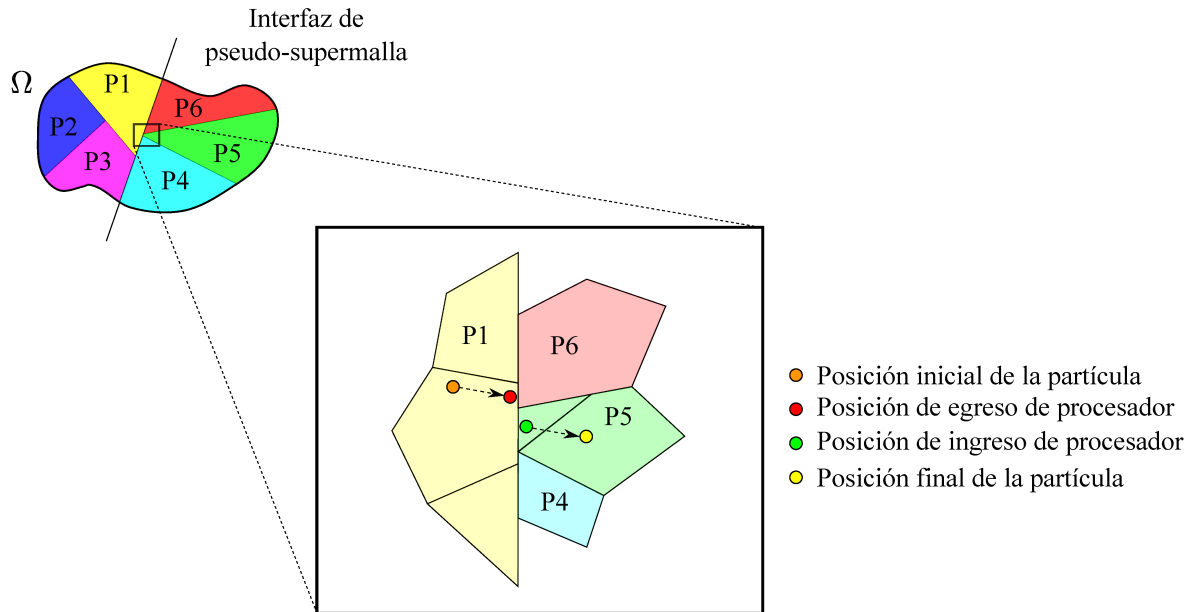


Figura 7.4: Seguimiento de una partícula a través de una interfaz de pseudo-supermalla que es frontera entre dos procesadores. La partícula ingresa en el nuevo procesador localizada en el centroide de la cara de entrada correspondiente.

de límite o frontera entre algunos procesadores. A su vez y como se puede apreciar en el detalle de la Fig. 7.4, una de las caras de pseudo-supermalla del procesador N°1 limita con tres procesadores localizados del otro lado de la interfaz. En este caso, si una partícula egresa de esa cara de pseudo-supermalla, como se ejemplifica por medio de la partícula coloreada en rojo, esta egresa del procesador N°1 y debe ser colocada en una cara de la interfaz opuesta. Consecuentemente se debe definir el procesador destino y su cara correspondiente. En este trabajo se propone definir previamente una relación uno-a-uno entre las caras de pseudo-supermalla. Bajo este concepto, cada cara de una interfaz de pseudo-supermalla conoce el procesador y la cara destino a la que está conectada, información que es necesaria para realizar la transferencia de partículas. No se respeta la posición de egreso del procesador de salida con la nueva posición de la partícula en el procesador destino, ya que se define que la partícula ingrese en su nuevo procesador por el centroide de la cara de pseudo-supermalla. Esta estrategia permite realizar el intercambio de partículas entre procesadores a través de una interfaz de pseudo-supermalla de forma eficiente y robusta, pero con un error de posición en la partícula que es del orden de la longitud característica de la cara de egreso.

7.2.5. Eficiencia computacional y escalabilidad

Se realiza una prueba del algoritmo de seguimiento de partículas en un contexto de mallas dinámicas con interfaces de pseudo-supermalla y *layering*. El ensayo se realiza mediante cómputo en paralelo por

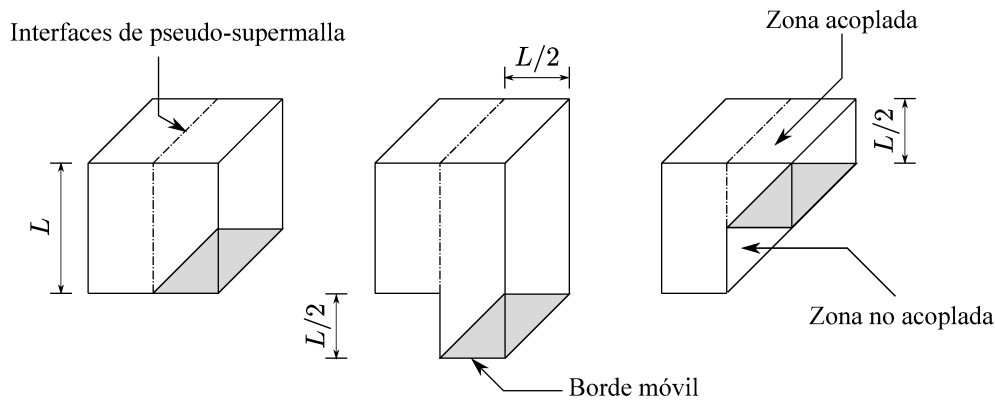


Figura 7.5: Descripción del dominio utilizado para el test de partículas en combinación con *layering* e interfaces de pseudo-supermalla. La figura muestra tres posiciones del borde móvil.

lo que se verifica el funcionamiento correcto del algoritmo de cruce de partículas a través de bordes interprocesadores y de interfaces no conformes. El problema a resolver consiste en inyectar y simular el movimiento de partículas dentro de un dominio inicialmente cúbico de lado L , en donde la mitad de su borde inferior es móvil. Esta porción del borde inferior posee un movimiento oscilante con una amplitud $L/2$ que genera nuevas fronteras según la posición del borde inferior. Para poder resolver la dinámica propuesta se utiliza la técnica de *layering* para el movimiento del borde e interfaces de pseudo-supermalla para dividir el dominio en dos partes y así posibilitar el movimiento relativo entre ambas mitades. El dominio, su borde móvil y la interfaz de pseudo-supermalla se muestran en la Fig.7.5. Las partículas se inyectan en un punto ubicado en la parte superior del subdominio móvil con una velocidad de 10 m/s. Estas se direccionan aleatoriamente dentro de los rangos definidos por una envolvente cónica de 45 grados de apertura.

En un primer estudio, se estudia la eficiencia computacional del algoritmo en función del número total de partículas inyectadas. El problema se discretiza con un esquema no conforme de divisiones para el par de subdominios mostrados en la Fig. 7.5 totalizando 8410 celdas. En cada simulación, el bloque móvil se mueve siguiendo una función sinusoidal con un período de un segundo. Se simulan dos períodos de oscilación del bloque móvil inyectando durante el primer período el total de las partículas. De esta manera, la totalidad de las partículas se resuelven en interacción con el bloque móvil durante un segundo completo siendo el tiempo total de cómputo el dato de estudio.

Los resultados se presentan en la Fig. 7.6 en donde se discriminan los tiempos necesarios para resolver las acciones de malla dinámica y las necesarias para el seguimiento de las partículas incluyendo el tiempo total. En la gráfica se observa un crecimiento lineal del tiempo de cómputo en función del número de partículas. Esta tendencia se corresponde también al tiempo necesario para la actualización de la malla. Es necesario aclarar que dentro de las acciones de actualización de la malla se incluye el

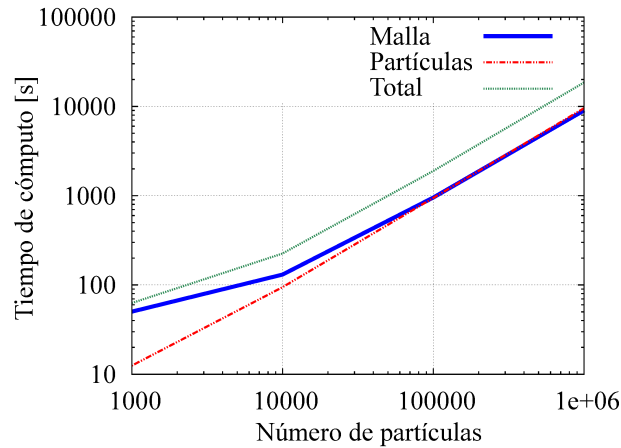


Figura 7.6: Tiempo de cómputo necesario en función del número de partículas totales utilizadas en el problema de malla dinámica.

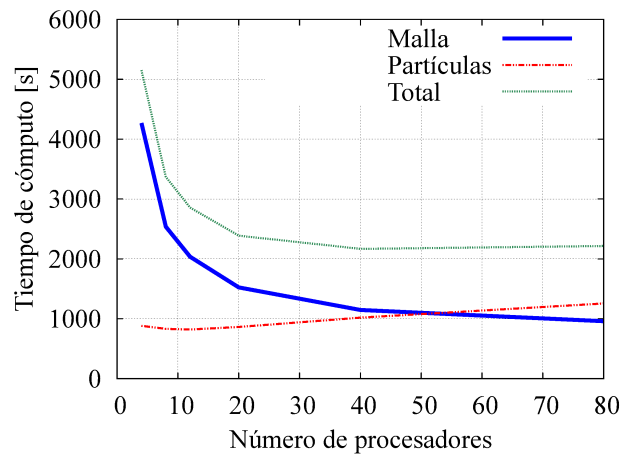


Figura 7.7: Tiempo de cómputo en función del número de procesadores

reposicionamiento de las partículas al momento de realizar cambios topológicos por lo que es esperable un incremento en los tiempos de cálculo a mayor número de partículas.

Con el mismo procedimiento se realiza un segundo estudio que tiene como objetivo evaluar la capacidad de paralelización del algoritmo de seguimiento de partículas. Se simula el mismo problema variando el número de procesadores y ajustando el número total de partículas para mantener una relación constante de 125000 partículas por procesador. Los tiempos totales de cada simulación se presentan en la Fig. 7.7.

Del análisis de la figura se aprecia que el tiempo total de simulación es aproximadamente constante. Sin embargo, el tiempo dedicado a actualizar la nube de partículas crece con el número de procesadores mientras que el tiempo requerido por las acciones de malla dinámica decrece. En vistas de analizar eficiencia de paralelización en términos del concepto de escalabilidad débil, donde el tamaño del problema aumenta a medida que se incrementa el número de procesadores, se toma como indicador el tiempo requerido exclusivamente por las partículas ya que la relación entre el número de partículas y procesadores

se mantiene. En este grupo de tareas la paralelización tiene una efectividad del 70 % comparando los tiempos de cómputo usando 4 y 80 procesadores.

7.3. Interacción entre las partículas y la fase gaseosa

Las fase líquida modelada por las partículas del modelo Lagrangiano intercambian cantidades de momento, masa y energía con la fase gaseosa la cual representa la mezcla aire-combustible compuesta de varias especies. Para explicar el acople físico entre estas dos fases se representa a una determinada cantidad n sobre la partícula p_i como $\psi_n(p_i)$. La misma cantidad se define en la fase gaseosa sobre la celda P_j como $\Psi_n(P_j)$. Teniendo en cuenta estas definiciones, el problema Lagrangiano define la variación temporal de una determinada cantidad n sobre cada una de las partículas p_i como,

$$\frac{d\psi_n(p_i)}{dt} = f \{ [\psi_1(p_i), \psi_2(p_i), \dots, \psi_n(p_i)], [\Psi_1(P_j), \Psi_2(P_j), \dots, \Psi_n(P_j)] \} \quad \forall p_i, \quad (7.21)$$

en donde P_j es la celda que se corresponde con la posición de la partícula p_i . Por su lado, la variación de la cantidad intensiva Ψ_n de la fase gaseosa sobre una celda P_j es,

$$\frac{d\Psi_n(P_j)}{dt} = f \{ [\Psi_1(P_j), \Psi_2(P_j), \dots, \Psi_n(P_j)], [\Psi_n(P_N)], [\psi_1(p_i), \psi_2(p_i), \dots, \psi_n(p_i)] \} \quad (7.22)$$

$$\forall P_j, \forall p_i \in P_j, \forall P_N,$$

donde P_N representa a las celdas vecinas de P_j . La combinación de las Ecs. (7.21) y (7.22) produce un acople completo entre las variables y sus valores definidos sobre todas las partículas y celdas de la malla. El acople se simplifica por medio de un método segregado en el cual se resuelven las cantidades definidas sobre las partículas y la malla de forma separada utilizando el último valor disponible de las variables restantes. A partir de esta simplificación las Ecs. (7.21) y (7.22) resultan en,

$$\frac{d\psi_n(p_i)}{dt} = f \{ [\psi_1(p_i)^0, \psi_2(p_i)^0, \dots, \psi_n(p_i)], [\Psi_1(P_j)^0] \} \quad \forall p_i, \quad (7.23)$$

$$\frac{d\psi_n(p_i)}{dt} = f [\psi_n(p_i)] + b^0(p_i) \quad \forall p_i,$$

y

$$\frac{d\Psi_n(P_j)}{dt} = f \{ [\Psi_1(P_j)^0, \Psi_2(P_j)^0, \dots, \Psi_n(P_j)], [\Psi_n(P_N)], [\psi_n(p_i)^0] \} \quad \forall P_j, \forall p_i \in P_j, \forall P_N,$$

$$\frac{d\Psi_n(P_j)}{dt} = f [\Psi_n(P_j), \Psi_n(P_N)] + b^0(P_j) \quad \forall P_j, \forall P_N, \quad (7.24)$$

respectivamente donde b^0 representa el término independiente en cada una de las ecuaciones el cual agrupa los últimos valores disponibles de las variables asumidas explícitas. La Ec. (7.23) genera un sistema de ecuaciones desacoplado para cada variable en cada partícula mientras que la Ec. (7.24) genera un sistema de ecuaciones para cada variable de forma de obtener el valor sobre todas las celdas de la malla.

Para mejorar el acople entre las Ecs. (7.23) y (7.24) es posible actualizar los valores de la fase gaseosa Ψ_n a medida que se van actualizando las variables en las partículas p_i . En esta actualización se adopta la hipótesis de que la variación de las cantidades en la fase gaseosa dependen exclusivamente del intercambio de cantidades con las partículas según se define en la siguiente ecuación:

$$\frac{d\Psi_n(P_j)}{dt} = f[\Psi_n(P_j), \psi_n(p_i)] \quad \forall p_i \in P_j. \quad (7.25)$$

Cuando es posible, la Ec. (7.25) se puede linealizar para resolverla de forma acoplada con la Ec. (7.23).

Se define el siguiente conjunto de ecuaciones diferenciales:

$$\begin{aligned} \frac{d\psi_n(p_i)}{dt} &= f[\psi_n(p_i), \Psi_n(P_j)] + b^0(p_i) \quad \forall p_i, \\ \frac{d\Psi_n(P_j)}{dt} &= f[\Psi_n(P_j), \psi_n(p_i)] \quad \forall p_i \in P_j. \end{aligned} \quad (7.26)$$

En cada paso de tiempo, la partícula puede atravesar más de una celda en su recorrido tal cual se describe en la Fig. 7.8. Para resolver la integración temporal de las cantidades evaluadas en las partículas en un determinado paso de tiempo Δt se divide la integral temporal en correspondencia con el período de tiempo que la partícula permanece en cada una de las celdas involucradas en su trayectoria,

$$\int_{\Delta t} \frac{d\psi_n(p_i)}{dt} dt = \sum_{P_i \in \Pi} \int_{\Delta t_{P_i}} \frac{d\psi_n(p_i)}{dt} dt, \quad (7.27)$$

donde Π es el conjunto de celdas en las que se localiza la trayectoria de la partícula en el paso de tiempo Δt para el cual se verifica que,

$$\Delta t = \sum_{P_i \in \Pi} \Delta t_{P_i}. \quad (7.28)$$

7.3.1. Concepto de parcela y partícula

El tamaño del problema numérico correspondiente a la fase Lagrangiana es directamente proporcional al número de partículas. En la gran mayoría de los problemas de inyección de combustible el número de gotas es muy elevado siendo este del orden de magnitud de 10^8 gotas para inyecciones en motores de combustión interna. En este contexto, representar cada gota por medio de una partícula del modelo

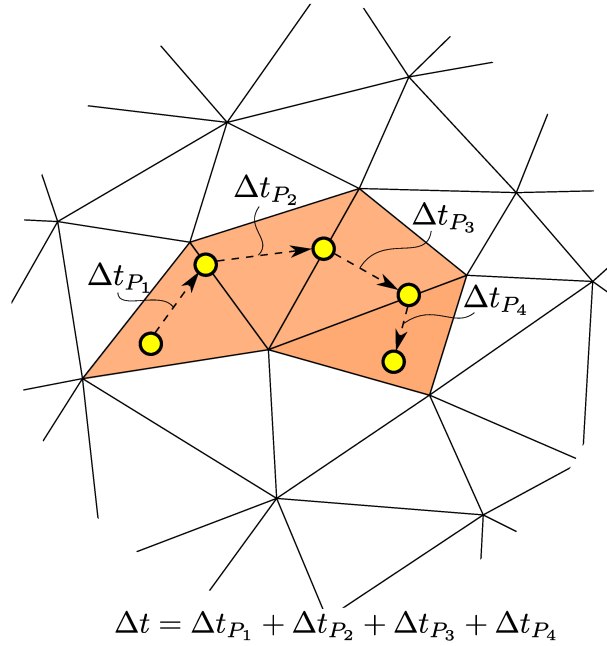


Figura 7.8: Seguimiento de una partícula en un paso temporal Δt . La partícula transfiere cantidades de masa, momento y energía por medio de fuentes de intercambio que dependen de los valores de la celda. La cantidad transferida es proporcional al tiempo de permanencia de la partícula en la celda.

Lagrangiano no es posible debido a los límites impuestos por los recursos computacionales. Para resolver este inconveniente se simplifica el problema agrupando un determinado número de partículas en una nueva entidad denominada parcela. El uso de parcelas se basa en la hipótesis de que las partículas que se encuentran cercanas entre sí experimentan los mismos cambios en sus propiedades. Si se define a una parcela cualquiera como \hat{p}_i la cual contiene un número $N_{\hat{p}_i}$ de partículas, las cantidades extensivas en la parcela se escalan por $N_{\hat{p}_i}$,

$$\rho(\hat{p}_i) \psi(\hat{p}_i) = \sum_{p_i \in \hat{p}_i} \rho(p_i) \psi(p_i) = N_{\hat{p}_i} \rho(p_i) \psi(p_i). \quad (7.29)$$

Asimismo, se escalan las transferencias de cantidades con la fase continua,

$$\frac{d\psi_n(\hat{p}_i)}{dt} = N_{\hat{p}_i} \frac{d\psi_n(p_i)}{dt}. \quad (7.30)$$

7.3.2. Algoritmo de acople entre las fases

Finalmente se presenta el Algoritmo 6 que describe el acople entre las partículas y la fase continua. El procedimiento se basa en calcular primero las cantidades sobre las partículas y posteriormente resolver las cantidades sobre la fase continua. Por su lado, la actualización de las cantidades en las partículas se realiza de forma segregada por medio de tres bucles anidados. El bucle exterior recorre cada una de las

Algoritmo 6 Esquema de acople entre la fase líquida Lagrangiana y la fase continua Euleriana.

1. Se actualizan las variables sobre las partículas

■ Bucle por cada parcela \hat{p}_i

• $\hat{p}_i \leftarrow \hat{p}_{i+1}$

• $t \leftarrow t_0$

• Bucle por cada celda P_j de la trayectoria de la partícula

○ $t \leftarrow t + \Delta t_{P_j}$

○ Bucle por cada variable ψ_n definida sobre la parcela \hat{p}_i

◇ $\psi_n(\hat{p}_i) \leftarrow \psi_{n+1}(\hat{p}_i)$

◇ Se resuelve el acoplamiento definido en la Ec. (7.26).

◇ Se actualiza el valor de parcela:

$$\psi_n(\hat{p}_i, t + \Delta t_{P_j}) \leftarrow \psi_n(\hat{p}_i, t) + \int_{\Delta t_{P_j}} \frac{d\psi_n(\hat{p}_i)}{dt}$$

◇ Se actualiza el valor de la fase continua:

$$\Psi_n(P_j, t + \Delta t_{P_j}) \leftarrow \Psi_n(P_j, t) + \int_{\Delta t_{P_j}} \frac{d\Phi_n(P_j)}{dt}$$

2. Se actualizan las variables de la fase gaseosa

■ Bucle por cada variable Ψ_n

• Se resuelve el sistema de ecuaciones definido en la Ec. (7.24).

partículas. Luego, para cada partícula el segundo bucle recorre cada una de las celdas de su trayectoria y finalmente en el bucle interno se actualizan cada una de las propiedades de las partículas. Dentro de este bucle interno se actualizan las cantidades de las partículas de forma acoplada con las cantidades de la fase continua según el sistema de ecuaciones definido en la Ec. (7.26).

7.3.3. Cinemática de las parcelas e intercambio de cantidad de movimiento

La descripción del movimiento de las parcelas se determina por medio de la segunda ley de Newton,

$$\frac{d^2(\mathbf{x}_{\hat{p}_i})}{dt^2} = \frac{\mathbf{F}_{\hat{p}_i}}{m_{\hat{p}_i}}, \quad (7.31)$$

donde $\mathbf{x}_{\hat{p}_i}$ es la posición de la parcela y $\mathbf{F}_{\hat{p}_i}$ es la fuerza actuante sobre esta. La Ec. (7.31) se integra de forma explícita,

$$\mathbf{x}_{\hat{p}_i}^{(n)} = \mathbf{x}_{\hat{p}_i}^{(n-1)} + \mathbf{u}_{\hat{p}_i}^{(n-1)} \Delta t, \quad (7.32)$$

donde la velocidad se calcula como,

$$\mathbf{u}_{\hat{p}_i}^{(n-1)} = \mathbf{u}_{\hat{p}_i}^{(n-2)} + \left(\frac{\mathbf{F}_{\hat{p}_i}}{m_{\hat{p}_i}} \right)^{(n-1)} \Delta t. \quad (7.33)$$

En los próximos párrafos, para el cálculo de la fuerza actuante sobre la parcela solo se consideran las fuerzas de arrastre debido a su velocidad relativa con la fase continua. Sin embargo, el modelo contempla el momento transferido a través de la evaporación, el cual será detallado en el apartado de intercambio de masa.

La expresión para la fuerza de arrastre a tiempo $t^{(n-1)}$ es,

$$\mathbf{F}_{\hat{p}_i}^{(n-1)} = \frac{1}{2} C_D A_{\hat{p}_i} \left[\mathbf{u}_{P_j}^{(n-1)} - \mathbf{u}_{\hat{p}_i}^{(n-1)} \right]^2, \quad (7.34)$$

siendo C_D el coeficiente de arrastre, $\mathbf{u}_{\hat{p}_i}^{(n-1)}$ la velocidad de la fase continua y $A_{\hat{p}_i}$ el área transversal de la parcela. La Ec. (7.34) se linealiza utilizando la velocidad relativa del paso temporal previo $\mathbf{u}_r^{(n-2)} = \mathbf{u}_{P_j}^{(n-2)} - \mathbf{u}_{\hat{p}_i}^{(n-2)}$. En consecuencia,

$$\mathbf{F}_{\hat{p}_i}^{(n-1)} = \frac{1}{2} C_D A_{\hat{p}_i} \left[\mathbf{u}_r^{(n-2)} \right] \left[\mathbf{u}_{P_j}^{(n-1)} - \mathbf{u}_{\hat{p}_i}^{(n-1)} \right]. \quad (7.35)$$

Para determinar el valor de la velocidad en la fase continua $\mathbf{u}_{P_j}^{(n-1)}$ se adopta la hipótesis propuesta en la Ec. (7.25) en donde la variación de la velocidad de la fase continua depende exclusivamente de su relación con la parcelas. De esta forma,

$$\frac{d\mathbf{u}_{P_j}}{dt} = \frac{-\mathbf{F}_{\hat{p}_i}}{m_{P_j}}, \quad (7.36)$$

y discretizando de forma explícita a tiempo $t^{(n-1)}$ resulta en,

$$\mathbf{u}_{P_j}^{(n-1)} = \mathbf{u}_{P_j}^{(n-2)} + \left(\frac{-\mathbf{F}_{\hat{p}_i}}{m_{P_j}} \right)^{(n-1)} \Delta t. \quad (7.37)$$

Combinando las Ecs. (7.33), (7.34) y (7.37) se llega a las siguientes expresiones para la velocidad de la parcela y de la fase continua respectivamente,

$$\mathbf{u}_{P_j}^{(n-1)} = \frac{C_{u1} \mathbf{u}_{\hat{p}_i}^{(n-2)} + (C_{u2} + C_{u3}) \mathbf{u}_{P_j}^{(n-2)}}{C_{u1} + C_{u2} + C_{u3}} \quad (7.38)$$

$$\mathbf{u}_{\hat{p}_i}^{(n-1)} = \frac{C_{u2} \mathbf{u}_{P_j}^{(n-2)} + (C_{u1} + C_{u3}) \mathbf{u}_{\hat{p}_i}^{(n-2)}}{C_{u1} + C_{u2} + C_{u3}}, \quad (7.39)$$

donde,

$$\begin{aligned}
 C_{u1} &= C_{u4} m_{\hat{p}_i} \Delta t \\
 C_{u2} &= C_{u4} m_{P_j} \Delta t \\
 C_{u3} &= m_{\hat{p}_i} m_{P_j} \\
 C_{u4} &= \frac{1}{2} C_D A_{\hat{p}_i} \mathbf{u}_r^{(n-2)}.
 \end{aligned} \tag{7.40}$$

7.3.4. Intercambio de masa

Las gotas de combustible se evaporan dentro de la corriente de aire intercambiando masa con la fase líquida. La tasa de evaporación de una determinada especie se rige por el gradiente de concentración presente entre las fases. En esta tesis se adopta el modelo de Spalding [88]:

$$\frac{dm}{dt} = \pi d_l \text{Sh} \rho_s D_{AB} \log(1 + x_r), \tag{7.41}$$

donde d_l es el diámetro de la gota, Sh es el número de Sheerwood, ρ_s es la densidad en la superficie de la gota, D_{AB} es el coeficiente de difusividad binario de difusividad y x_r es la relación de fracciones molares. Esta se define como,

$$x_r = \frac{x_s - x_a}{1 - x_s}, \tag{7.42}$$

siendo x_s la fracción molar de vapor de combustible en la superficie de la gota y x_a en la fase continua respectivamente. La fracción molar en la superficie de la gota se calcula como el cociente de la presión de saturación p_{sat} del vapor a la temperatura de la gota T_d y la presión de la fase continua p_a ,

$$x_s = \frac{p_{\text{sat}}(T_d, p_a)}{p_a}. \tag{7.43}$$

La densidad de superficie del vapor de combustible se calcula por medio de la ley de gases ideales utilizando los valores de presión p_s y temperatura T_s en al superficie de la gota,

$$\rho_s = \frac{p_s}{R T_s}, \tag{7.44}$$

donde R es la constante de gas ideal del vapor de combustible. La presión de saturación del vapor en la superficie de la gota se computa en función de la presión de la fase continua y la temperatura de superficie la cual se calcula usando la regla de los dos tercios [89] que promedia la temperatura de las fases líquida y continua de la siguiente forma:

$$T_s = \frac{1}{3} T_a + \frac{2}{3} T_d. \tag{7.45}$$

El número de Sheerwood se determina por medio de la correlación de Froessling [90],

$$\text{Sh} = 2 + 0,6 \text{Re}^{1/2} \text{Sc}^{1/3}, \quad (7.46)$$

siendo $\text{Sc} = D_{AB}/\nu$ el número de Schmidt calculado como el cociente entre la difusividad y la viscosidad cinemática del aire.

El intercambio de masa genera una transferencia de momento entre las fases. En este caso, la cantidad de momento correspondiente a la masa evaporada se adiciona al momento resultante de las fuerzas de arrastre.

7.3.5. Intercambio de energía

El balance térmico para la gota evaporándose dentro de la fase continua se computa realizando un desacople entre las contribuciones debido al calor latente \dot{Q}_L y el calor sensible \dot{Q}_S ,

$$m(\hat{p}_i) c_p(\hat{p}_i) \frac{dT(\hat{p}_i)}{dt} = \dot{Q}_L(\hat{p}_i) + \dot{Q}_S(\hat{p}_i). \quad (7.47)$$

El flujo de calor latente debido a la masa evaporada Δm_{evap} se calcula como el producto de esta por la diferencia de entalpía entre la fase líquida y gaseosa de acuerdo a las temperatura de la gota T_d y la presión p_a ,

$$\dot{Q}_L = \dot{m}_{\text{evap}} [h_l(p_a, T_d) - h_g(p_a, T_d)]. \quad (7.48)$$

Por otro lado el calor sensible está dado por,

$$\dot{Q}_S = A_{\hat{p}_i} \kappa_{\hat{p}_i} [T(P_j) - T(\hat{p}_i)]. \quad (7.49)$$

La ecuación diferencial (7.47) se integra para determinar la temperatura de la parcela en el nuevo paso de tiempo,

$$\frac{m(\hat{p}_i) c_p(\hat{p}_i) [T(\hat{p}_i)^n - T(\hat{p}_i)^{n-1}]}{\Delta t} = A_{\hat{p}_i} \kappa_{\hat{p}_i} [T(P_j)^n - T(\hat{p}_i)^n] + \dot{Q}_L^{n-1}. \quad (7.50)$$

Para determinar la temperatura de la fase continua se procede según la Ec. (7.25),

$$\frac{m(P_j) c_p(P_j) [T(P_j)^n - T(P_j)^{n-1}]}{\Delta t} = A_{\hat{p}_i} \kappa_{\hat{p}_i} [T(\hat{p}_i)^n - T(P_j)^n] \quad (7.51)$$

Se resuelven el sistema de ecuaciones definido por las Ecs. (7.50) y (7.51) determinando las nuevas

temperaturas de la parcela $p_{\hat{p}_i}$ y la celda P_j ,

$$T(P_j)^n = \frac{C_{T2} T(\hat{p}_i)^{n-1} + [C_{T1} + C_{T3}] T(P_j)^{n-1} + C_{T4} \dot{Q}_L^{n-1}}{C_{T1} + C_{T2} + C_{T3}} \quad (7.52)$$

$$T(\hat{p}_i)^n = \frac{(C_{T1} + C_{T2}) T(\hat{p}_i)^{n-1} + (C_{T4} + C_{T5}) Q_L + C_{T3} T(P_j)^{n-1}}{C_{T1} + C_{T2} + C_{T3}}, \quad (7.53)$$

donde,

$$\begin{aligned} C_{T1} &= m(\hat{p}_i) c_p(\hat{p}_i) m(P_j) c_p(P_j) \\ C_{T2} &= m(\hat{p}_i) c_p(\hat{p}_i) A_{\hat{p}_i} \kappa_{\hat{p}_i} \Delta t \\ C_{T3} &= m(P_j) c_p(P_j) A_{\hat{p}_i} \kappa_{\hat{p}_i} \Delta t \\ C_{T4} &= A_{\hat{p}_i} \kappa_{\hat{p}_i} (\Delta t)^2 \\ C_{T5} &= m(P_j) c_p(P_j) \Delta t. \end{aligned} \quad (7.54)$$

7.4. Atomización del combustible

7.4.1. Introducción

El objetivo de un sistema de inyección de combustible en un motor de combustión interna es evaporar el líquido inyectado lo más rápidamente posible y permitir una mayor homogeneización de la mezcla aire-combustible. Para este fin se desea tener tamaños de gotas pequeños de forma de tener una mayor superficie global y maximizar la transferencia de masa. Para conseguir gotas pequeñas, se busca inyectar el combustible por orificios cada vez más chicos generando un tamaño reducido de la corriente líquida inicial y en consecuencia una mayor velocidad para un mismo caudal de inyección. Una vez que el chorro líquido está en contacto con el aire, la velocidad relativa entre líquido y gas en combinación con la turbulencia presente en el chorro generan múltiples desprendimientos de gotas. A este proceso se lo denomina atomización primaria el cual está motivado en parte por la cavitación presente en el inyector, la turbulencia de la masa líquida y las fuerzas aerodinámicas debido a la velocidad relativa entre las fases.

A partir de una determinada distancia del punto de inyección, el chorro líquido se convierte en una nube de gotas las cuales se van desintegrando en gotas sucesivamente más pequeñas exclusivamente debido a fuerzas aerodinámicas. A esta fase se la denomina como atomización secundaria, comúnmente denominado en lengua inglesa como *break up*. Finalmente las gotas pequeñas adquieren un tamaño estable correspondientes a un bajo valor de su número de Weber, en donde las fuerzas de tensión superficial dominan a las inerciales. Estas gotas completan el proceso evaporándose hasta desaparecer completamente.

El proceso comprendido entre la salida del líquido por el inyector hasta su evaporación completa en la

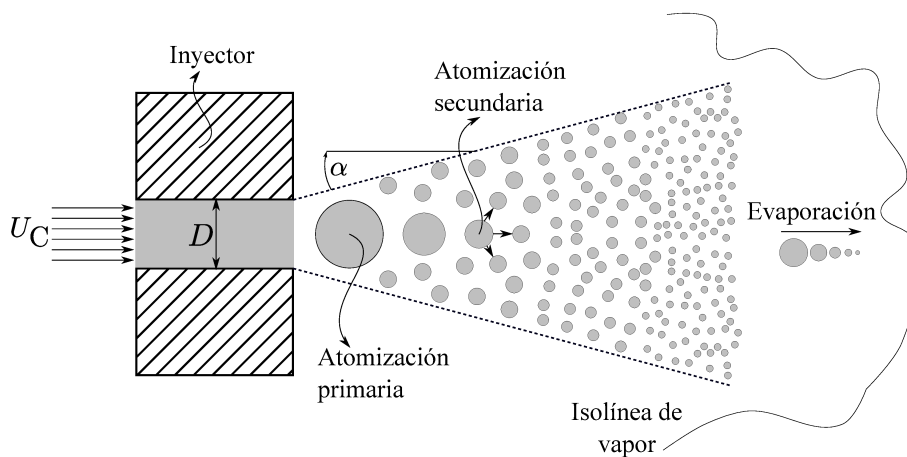


Figura 7.9: Etapas en la conversión del combustible inyectado en vapor.

mezcla aire-combustible se representa esquemáticamente en la Fig. 7.9.

El proceso de inyección se desarrolla en varias etapas las cuales están controladas por fenómenos diferentes. Principalmente se presentan variaciones significativas entre el tamaño de gota y la velocidad relativa entre líquido y aire dependiendo de la distancia al inyector en términos globales, lo que da lugar a la atomización primaria y secundaria, según se especifica en la Fig. 7.9. Existen múltiples modelos en los cuales no se diferencian estas dos etapas del proceso de inyección [91, 92]. Sin embargo, en inyecciones de alta presión es necesario discriminar los distintos fenómenos de atomización para reproducir fielmente la atomización primaria. Debido a esta razón, se utiliza más de un enfoque para representar la totalidad de las etapas de inyección conformando un modelo híbrido. La estrategia más utilizada es combinar el modelo de Kelvin-Helmholtz (KH), para resolver la atomización primaria, con el modelo de Rayleigh-Taylor (RT) para modelar la atomización secundaria [93, 85]. También existen otras combinaciones en donde se utilizan los modelos TAB, *Wave* y LISA entre otros modelos de *break up* [94, 95, 96]. En particular, en este trabajo se adopta un método de atomización híbrido especialmente diseñado para inyecciones de alta presión y que combina los modelos de Huh-Gosman (HG), Kelvin-Helmholtz (KH) y Rayleigh-Taylor (RT). Los lineamientos principales para el diseño e implementación del método híbrido están basados en el trabajo de Li *et al.* [28] y el trabajo de Lucchini *et al.* [86]. En los siguientes párrafos se definen cada uno de los modelos por separado para finalmente concluir en el algoritmo global del método híbrido.

7.4.2. Modelo de atomización de Huh-Gosman

El modelo de atomización de Huh-Gosman [28, 87, 86, 97] se utiliza para resolver la atomización primaria del chorro líquido en las cercanías del punto de inyección. El modelo fue propuesto inicialmente para inyectores Diesel de cono completo y altas presiones de inyección. El modelo propone que

la turbulencia presente en el líquido, debido a su flujo dentro del inyector, produce inestabilidades en el chorro líquido que en combinación con las fuerzas aerodinámicas generan los primeros desprendimientos de gotas de la atomización primaria. Estos fenómenos están gobernados por distancias y tiempos de atomización característicos L_A y τ_A respectivamente. La longitud característica se propone proporcional a la longitud característica turbulenta L_t ,

$$L_A = C_1 L_t. \quad (7.55)$$

La longitud de onda de la perturbación en el chorro líquido denominada como L_w se relaciona con L_t como,

$$L_w = \frac{L_t}{C_2}, \quad (7.56)$$

siendo C_1 y C_2 constantes del modelo iguales a 2 y 0,5 respectivamente. Por su lado, el tiempo característico de atomización τ_A se calcula como combinación lineal de los tiempos característicos debido a la turbulencia τ_t y la longitud de crecimiento de onda en la superficie τ_w ,

$$\tau_A = C_3 \tau_t + C_4 \tau_w, \quad (7.57)$$

donde $C_3 = 1,2$ y $C_4 = 0,4$. El tiempo característico del crecimiento de perturbaciones en la superficie τ_w se deriva de la teoría de inestabilidades de Kelvin-Helmholtz. Despreciando el efecto de la tensión superficial, se llega a la siguiente expresión:

$$\tau_w = L_w \frac{\sqrt{\rho_l / \rho_g}}{w}, \quad (7.58)$$

siendo w la velocidad relativa entre la gota y el aire. Una vez determinadas las longitudes y tiempos característicos, se propone la siguiente tasa de cambio del tamaño de la parcela madre,

$$\frac{d(d_l)}{dt} = -2 \frac{L_A}{\tau_A}. \quad (7.59)$$

En su forma discretizada, la Ec. (7.59) se calcula como,

$$d_1 = d_0 - 2 \frac{L_A}{\tau_A} (t_1 - t_0), \quad (7.60)$$

donde los subíndices 0 y 1 representan el estado previo y posterior al proceso de atomización. La reducción del tamaño de la gota debido a la Ec. (7.59) genera una diferencia de masa en la parcela que se

acumula a lo largo del tiempo. A esta diferencia se la denomina como la masa despojada m_{s_1} ,

$$m_{s_1} = m_{s_0} + \rho_l \frac{\pi}{6} [d_0^3 - d_1^3]. \quad (7.61)$$

Si la masa despojada supera el 10 % de la masa de la parcela, se produce la atomización de las partículas con un diámetro de la partícula hija definida como $d_h = 2L_A$ y una masa total de la parcela igual a m_s . La cantidad de partículas que contiene la parcela hija se determina por medio de un balance de masa,

$$N_{\hat{p}_h} = \frac{m_{s_1}}{\rho_l \frac{\pi}{6} d_h^3}. \quad (7.62)$$

Una vez realizada la atomización se vuelve a cero la masa despojada $m_{s_1} = 0$. En el caso de que la masa despojada no alcance el 10 % de la masa de la parcela, la parcela madre no sufre cambios considerando solamente el aumento de la masa despojada.

La longitudes y tiempos turbulentos iniciales se calculan a partir del modelo de turbulencia k - ϵ ,

$$\begin{aligned} L_{t_0} &= C_\mu \frac{k_0^{1,5}}{\epsilon_0} \\ \tau_{t_0} &= C_\mu \frac{k_0}{\epsilon_0}, \end{aligned} \quad (7.63)$$

donde $C_\mu = 0,09$ es una constante del modelo [86]. Las cantidades turbulentas decaen a lo largo del tiempo una vez que egresan de la boca del inyector. A partir del desarrollo descrito en Baumgarten [98] se llegan a las siguientes funciones en el tiempo para la longitud y tiempo característico de turbulencia:

$$\begin{aligned} Lt(t) &= L_{t_0} \left(1 + \frac{0,0828 t}{\tau_{t_0}} \right)^{0,457} \\ \tau_t(t) &= \tau_{t_0} + 0,0828 t. \end{aligned} \quad (7.64)$$

Finalmente, para cerrar el modelo restan definir las cantidades turbulentas k_0 y ϵ_0 las cuales se determinan haciendo un balance simplificado de pérdida de carga dentro del inyector. En [98] se proponen las siguientes expresiones,

$$\begin{aligned} k_0 &= C_5 \frac{U_i^2}{8L/D}, \\ \epsilon_0 &= C_5 K_e \left(\frac{U_i^3}{2L} \right), \end{aligned} \quad (7.65)$$

en donde U_i es la magnitud de la velocidad de salida del líquido en el inyector y C_5 es una constante que depende de las características geométricas del inyector.

El modelo de Huh-Gosman también estima el ángulo de salida del líquido inyectado θ . Se asume que la velocidad transversal del líquido en el punto de salida del inyector es igual al cociente entre la longitud y tiempo de atomización. En combinación con la velocidad de salida U_i se despeja el ángulo de apertura de la inyección por medio de la siguiente expresión:

$$\tan\left(\frac{\theta}{2}\right) = \frac{L_A/\tau_A}{U_i}. \quad (7.66)$$

7.4.3. Modelo de atomización de Kelvin-Helmholtz

Este modelo de atomización se basa en un análisis lineal y de primer orden de la inestabilidad de Kelvin-Helmholtz (KH) [91, 93], aplicado sobre un chorro líquido cilíndrico que penetra en un gas incompresible. Se plantea una ecuación de dispersión para obtener la frecuencia Ω_{KH} relacionada a la longitud de onda de mayor crecimiento en la superficie del chorro Λ_{KH} ,

$$\Lambda_{KH} = \frac{9,02 r_0 \left[\left(1 + 0,45 \sqrt{Z}\right) (1 + 0,4T)^{0,7} \right]}{\left(1 + 0,865 We_g^{1,67}\right)^{0,6}}, \quad (7.67)$$

$$\Omega_{KH} = \frac{0,34 + 0,385 We_g^{1,5}}{(1 + Z)(1 + 1,4T^{0,6})} \sqrt{\frac{\sigma}{\rho_l r_0^3}}, \quad (7.68)$$

donde $Z = \sqrt{We_l}/Re_l$ es el número de Ohnesorge, $T = Z\sqrt{We_g}$ es el número de Taylor, We_g es el número de Weber de la fase gaseosa, We_l es el número de Weber de la fase líquida y Re_l es el número de Reynolds de la fase líquida. Las ondas que van creciendo en la superficie con longitud Λ_{KH} son las causantes de la atomización y el desprendimiento de nuevas gotas. El tamaño de las nuevas gotas r_{KH} se asume proporcional a Λ_{KH} ,

$$d_{KH} = 2B_0 \Lambda_{KH}, \quad (7.69)$$

siendo B_0 una constante del modelo que se fija en $B_0 = 0,61$. De forma similar a lo planteado en la Ec. (7.59), la tasa de variación de la parcela madre se calcula como,

$$\frac{d(d_l)}{dt} = -\frac{d_0 - d_{KH}}{\tau_{KH}} \quad d_{KH} \leq d_0, \quad (7.70)$$

en donde τ_{KH} es el tiempo característico del modelo calculado a partir de la velocidad característica $\Omega_{KH}\Lambda_{KH}$ y una distancia proporcional al diámetro de la gota madre d_0 ,

$$\tau_{KH} = \frac{3,788 B_1 d_0}{2 \Omega_{KH} \Lambda_{KH}}, \quad (7.71)$$

donde la constante B_1 se utiliza para ajustar los resultados del modelo a partir de datos experimentales. Esta constante considera los efectos turbulentos del chorro líquido sobre la velocidad de aparición de las inestabilidades. Cuanto menor es el valor de B_1 mayor es la tasa de atomización efectiva. Siguiendo la Ec. (7.70) el diámetro de la parcela se actualiza como,

$$d_1 = d_0 - \frac{(d_0 - d_{KH})(t_1 - t_0)}{\tau_{KH}}. \quad (7.72)$$

El proceso de atomización se efectúa de igual forma que para el modelo de HG empleando la expresiones (7.61) y (7.62) para determinar la masa despojada y el número de parcelas hijas respectivamente. A diferencia del proceso de HG, el criterio de atomización se define cuando la masa despojada supera el 3 % de la masa de la parcela madre.

7.4.4. Modelo de atomización de Rayleigh-Taylor

De acuerdo al fenómeno investigado por Taylor [99], cuando dos líquidos con diferentes densidades y velocidades interactúan, aparecen aceleraciones normales a la interfaz que generan inestabilidades. La inestabilidad aparece cuando la fase más densa se acelera en comparación con la fase más liviana. En el caso de una gota con velocidad relativa inmersa en aire, esta inestabilidad se aprecia en la parte posterior de la gota. Si se localiza un marco de referencia localizado en la gota donde el eje longitudinal se define en la dirección posterior, la gota en su desaceleración debido a las fuerzas de arrastre se interpreta como una aceleración dando lugar a la inestabilidad de Rayleigh-Taylor. Despreciando la viscosidad del líquido, la frecuencia Ω_{RT} de la longitud de onda de mayor velocidad de crecimiento Λ_{RT} se definen como,

$$\Omega_{RT} = \sqrt{\frac{2}{3\sqrt{3}\sigma} \frac{[a(\rho_l - \rho_g)]^{3/2}}{\rho_l + \rho_g}}, \quad (7.73)$$

$$\Lambda_{RT} = C_{RT} 2\pi \sqrt{\frac{3\sigma}{a(\rho_l - \rho_g)}}, \quad (7.74)$$

en donde a es la aceleración debido a la fuerza de arrastre,

$$a = \frac{3}{8} C_D \frac{\rho_g \|u_r\|^2}{\rho_l r}, \quad (7.75)$$

siendo C_D el coeficiente de arrastre y u_r la velocidad relativa entre la gota y el aire. La constante C_{RT} regula el tamaño de la longitud de onda atendiendo a las incertidumbres sobre las características del flujo líquido saliente del inyector. A esta constante se la define con un valor $C_{RT} = 0,1$. El tiempo

característico de desarrollo de la onda es proporcional a la inversa de la frecuencia Ω_{RT} ,

$$\tau_{RT} = \frac{C_\tau}{\Omega_{RT}}, \quad (7.76)$$

siendo $C_\tau = 1$ una constante de ajuste del modelo. Siempre que el diámetro de la gota sea mayor que la longitud de onda Λ_{RT} se asume que las ondas comienzan a crecer en su superficie. El tiempo de desarrollo de estas ondas t_{RT} se computa según:

$$t_{RT_1} = t_{RT_0} + (t_1 - t_0) \quad (7.77)$$

Cuando el tiempo acumulado de crecimiento de la onda es mayor al tiempo característico $t_{RT_1} \geq \tau_{RT}$ se asume que la gota se desintegra totalmente en nuevas gotas hijas con diámetro $d_h = \Lambda_{RT}$. A diferencia de los modelos de atomización de HG y KH, en RT no se genera una nueva parcela ya que la sucesiva atomización resultante de este modelo producirá una cantidad excesiva de parcelas incrementando el costo computacional [28]. A raíz de esto, el proceso de atomización se traduce en un aumento del número de partículas que representa la parcela en cuestión según,

$$N_{\hat{p}_1} = N_{\hat{p}_0} \left(\frac{d_0}{d_1} \right)^3 \quad (7.78)$$

y además, se vuelve a cero el tiempo acumulado de crecimiento de onda $t_{RT_1} = 0$.

7.4.5. Modelo de atomización híbrido HG-KH-RT

La inclusión de los tres modelos de atomización dentro de un modelo híbrido requiere diseñar un esquema de decisión que precise el mecanismo adecuado según las propiedades locales de la parcela y del flujo. En referencia a esto se adoptan los siguientes lineamientos definidos por en el trabajo de Li *et al.*:

- Dentro de una determinada distancia L_{bu} , la fase líquida se asume como un chorro continuo. En este sector, se omite el uso del mecanismo de RT para el cómputo de la atomización. Esta distancia se calcula como,

$$L_{bu} = \frac{1}{2} C_{bu} D \sqrt{\frac{\rho_l}{\rho_g}} \quad (7.79)$$

donde C_{bu} es una constante de ajuste y D es el diámetro del inyector.

- En el sector cercano al inyector, los modelos de HG y KH compiten mutuamente. El modelo que indique el tiempo característico más corto es el que determina la mecánica de la atomización.

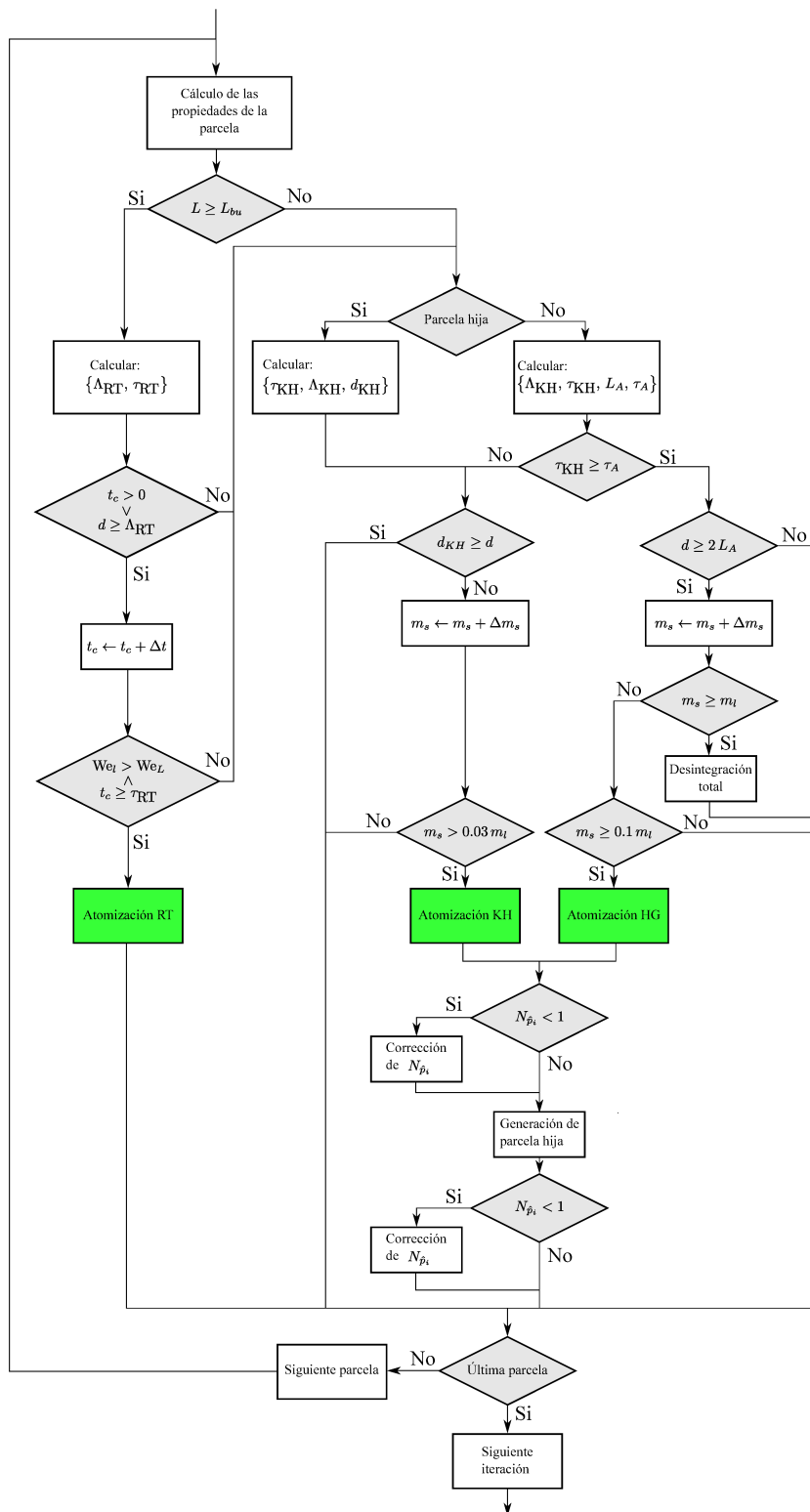


Figura 7.10: Diagrama de flujo que describe el proceso de atomización de una parcela por medio del modelo híbrido HG-KH-RT

- El modelo de HG actúa solamente sobre parcelas pertenecientes al chorro líquido. Aquellas parcelas hijas resultantes de un proceso de atomización previo, se asumen fuera del chorro líquido y, por esta causa, el modelo de HG no actúa sobre ellas.
- Para distancias superiores al valor L_{bu} el *jet* líquido está totalmente desintegrado y se le asigna al modelo de RT prioridad sobre el modelo de KH. En caso de que el diámetro de la gota sea estable para RT, se procede a evaluar las cantidades del modelo KH.

A partir de las consideraciones previas se define un diagrama de decisión en la Fig. 7.10. En adición a la propuesta de Li *et al.* se incluyen detalles técnicos relacionados a la estabilidad del modelo en vistas de evitar diámetros negativos de gota y parcelas con un número de partículas menor a la unidad. En este marco, se define lo siguiente:

- En el modelo de HG y en combinación con grandes pasos de tiempo, es posible que la cantidad de masa despojada supere a la masa de la gota. En esta situación, se modifica el número de partículas de la parcela de acuerdo al diámetro resultante de la atomización sin necesidad de generar una nueva parcela. A esta situación se la denomina como desintegración total de la gota.
- En los modelos de HG y KH, tanto las parcelas madres como parcelas hijas pueden resultar con un número de partículas menor a la unidad. Esta situación sucede cuando la masa de líquido de la parcela es inferior al diámetro de gota. Para este caso se corrige el diámetro de gota en función de la cantidad de masa de las parcelas determinando una única partícula por parcela.

7.5. Ajuste del modelo híbrido de inyección: *spray G*

Con el objetivo de recopilar información y mejorar el entendimiento de los procesos de inyección directa de gasolina, la Red de Combustión de Motores [100] (ECN, por sus siglas en inglés) en conjunto con fabricantes de motores han elegido un inyector determinado para concentrar los esfuerzos de investigación. Sus características geométricas han sido diseñadas para cubrir una amplia gama de aplicaciones de inyección directa de gasolina siendo este un inyector multiorificio comandado por solenoide y provisto por la firma Delphi. Este posee 8 orificios dispuestos con un ángulo de abarque global de 37 grados según se muestra en el corte esquemático de Fig. 7.11.

Este inyector ha sido motivo de múltiples trabajos de investigación. En particular, el trabajo de Manin *et al.* [101] estudia el desarrollo del *spray* de forma experimental para diferentes condiciones de la cámara de inyección. Un trabajo similar, pero focalizando sobre el colapso del *spray* en condiciones de alta temperatura y densidad es presentado por Payri *et al.* [102]. Utilizando el mismo inyector, se estudia el efecto de las condiciones de presión y temperatura del combustible en el trabajo de Lacey *et al.* [103].

Parámetros	Valor
Temperatura del aire ambiente	573 K
Presión del aire ambiente	600 kPa
Densidad del aire ambiente	3,5 kg/m ³
Velocidad del aire ambiente	Menor a 1 m/s
Inyector	Delphi activado por solenoide
Presión de inyección	200 bar
Boquilla	8 agujeros
Combustible	Iso-octano
Temperatura del combustible	363 K
Duración de la inyección	780 μ s

Cuadro 7.1: Condiciones de operación del *spray* G según la ECN.

El flujo interno dentro del inyector y su geometría, seguido del desarrollo inicial del *spray*, es estudiado experimentalmente por Duke *et al.* en donde se remarca la sensibilidad del *spray* a los defectos geométricos del inyector [104]. En otro trabajo se investiga el transitorio inicial de la inyección resolviendo el flujo interno desarrollado a partir de accionar la aguja de control utilizando mallas dinámicas [105]. En particular, en esta tesis se utilizan los resultados del trabajo experimental de Manin *et al.* [101] para ajustar el modelo híbrido HG-KH-RT y validar su implementación.

7.5.1. Estudio paramétrico

Para ajustar los parámetros del modelo de inyección HG-KH-RT se realizan simulaciones del *spray* G para las condiciones definidas por la ECN detalladas en la Tabla. 7.1. Los resultados obtenidos se

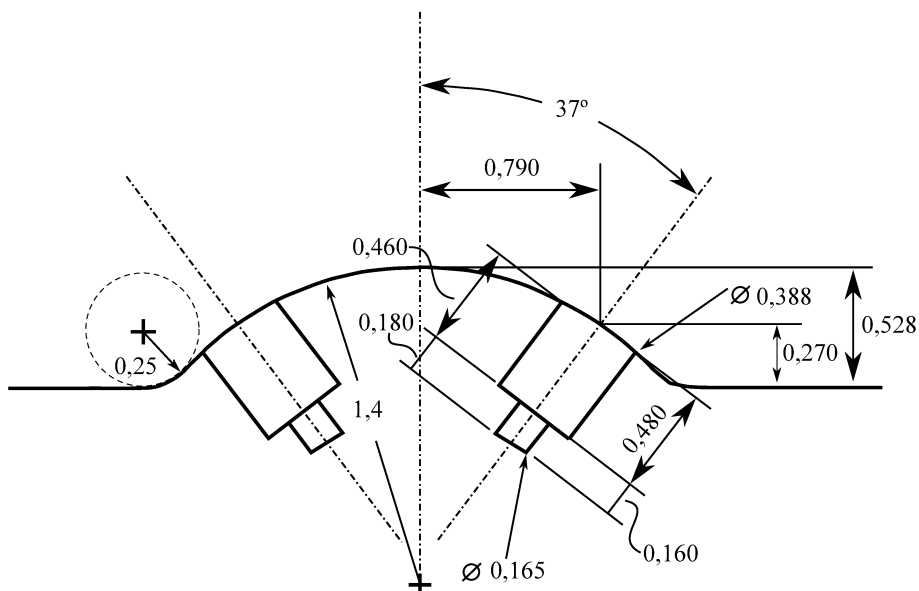


Figura 7.11: Corte lateral del inyector en donde se especifican sus dimensiones principales.

comparan con resultados experimentales publicados en el trabajo de Manin *et al.* [101] el cual recopila información provista por dos grupos de trabajo usando diferentes técnicas experimentales. En particular, se analiza la evolución macroscópica de la inyección que se cuantifican por medio de la penetración del *jet* líquido y la penetración del vapor. En el trabajo de Manin *et al.* se evalúan tres condiciones del aire ambiente de la cámara de inyección las cuales son la condición definida por la ECN y dos nuevas condiciones con mayor temperatura y densidad. A estas condiciones de inyección se las denomina como condición I, condición II y condición III respectivamente según se describen en la Tabla 7.2. El problema se simula dentro de una cámara de inyección paralelepípeda de dimensiones 80 mm × 100 mm × 80 mm. El inyector se ubica de acuerdo a la orientación definida en el trabajo de Manin: este se ubica paralelo al eje z y se posiciona en el centro geométrico del plano $x - y$ coincidente con el origen de coordenadas. Los orificios del inyector se numeran en el sentido de las agujas del reloj en donde el orificio #1 se ubica sobre la semirrecta positiva del eje x .

El modelo de atomización de HG-KH-RT dispone de parámetros que se utilizan para ajustar los resultados de las simulaciones con los datos experimentales. De todos los parámetros posibles se seleccionan los siguientes:

- Modelo de Huh-Gosman: coeficiente C_5 . Este coeficiente define la turbulencia inicial del chorro líquido saliente del inyector. Se evalúan tres valores: $C_5 = 0,01$, $C_5 = 0,1$ y $C_5 = 1$.
- Modelo de Kelvin-Helmholtz: coeficiente B_1 . Este coeficiente define la velocidad de desarrollo de las ondas de KH. Se propone usar dos valores: $B_1 = 7$ y $B_1 = 40$.
- Modelo de Rayleigh-Taylor: coeficiente C_{bu} . Este coeficiente determina la longitud máxima del chorro líquido.

El dominio se discretiza con una malla estructurada de hexaedros utilizando una caja de refinamiento en la zona de inyección con tamaños de malla de 2 mm y 0,5 mm para la zona gruesa y fina respectivamente. Los esquemas de discretización utilizados en todas las simulaciones son los siguientes: para el esquema convectivo se configura el método *upwind* de segundo orden, para el esquema difusivo se propone un esquema lineal y para las derivadas temporales se adopta el esquema de segundo orden de diferencias descentradas hacia atrás.

Condición de cámara	Temperatura [K]	Densidad [Kg/m ³]
Condición I	573	3,5
Condición II	700	6
Condición III	800	9

Cuadro 7.2: Tres condiciones de aire de la cámara de inyección utilizadas para el estudio de los modelos de inyección.

La validación de los resultados de la simulación se realiza comparando la penetración de vapor con los resultados experimentales. La penetración de vapor se define como la máxima distancia al punto de inyección, medida sobre el eje axial al inyector, de una celda con fracciones de vapor superior al 0,1 %. Por otro lado, se estudian otras características del *spray* con el objetivo de evaluar la incidencia de los parámetros de modelo híbrido HG-KH-RT. Dentro de estas variables se encuentra la tasa instantánea de evaporación y el diámetro medio de Sauter (SMD) los cuales determinan el grado de atomización del *spray*. Por último se incluyen indicadores del número de atomizaciones generadas por cada modelo fenomenológico para analizar la sensibilidad de los procesos de atomización a cada uno de los parámetros estudiados.

7.5.2. Influencia de la turbulencia inicial del *spray*

En un primer grupo de simulaciones se estudia el efecto de la constante C_5 sobre la evolución del *spray*. Esta constante define la magnitud de las cantidades turbulentas k y ϵ del chorro líquido, según la Ec. (7.65), influyendo directamente sobre el ángulo del *spray* y en el tiempo y longitud característicos del modelo. En la Fig. 7.12 se presentan los resultados de la penetración de vapor y líquido según tres valores de la constante C_5 : 1, 0,1 y 0,05. El *spray* es resuelto para las tres condiciones de inyección definidas en la Tabla 7.12 ubicándose los resultados en la Fig. 7.12 en las filas superior, media e inferior para las condiciones I, II y III respectivamente. De los resultados se aprecia que el parámetro C_5 influye sobre las longitudes de penetración de vapor y líquido principalmente en la segunda mitad de evolución del *spray*. En particular, la penetración de vapor para la condición I es mayor conforme aumenta el valor de C_5 . Sin embargo, para las condiciones II y III, el alcance del vapor es similar para los valores $C_5 = 1$ y $C_5 = 0,1$ pero se detecta una mayor penetración en el último cuarto de evolución del *spray* para el caso $C_5 = 0,05$. En referencia a la penetración de líquido, esta es mayor cuanto más alto es el valor de la constante.

Cuando se analiza la velocidad de evaporación y el diámetro medio de Sauter en la Fig. 7.13 se concluye una influencia directa del parámetro C_5 generando mayor evaporación y un tamaño de gota más chico cuanto menor es su valor. Luego se analiza en la Fig. 7.14 la influencia de C_5 sobre el número de atomizaciones producidas por cada modelo. De la gráfica se concluye que el parámetro de turbulencia controla la cantidad de atomizaciones de los modelos de HG y KH: se baja la atomización en el primero de ellos y se incrementa en el segundo cuanto más grande es C_5 . Por otro lado, se concluye que para esta configuración de parámetros el número de atomizaciones de RT es relativamente menor en comparación con lo restantes.

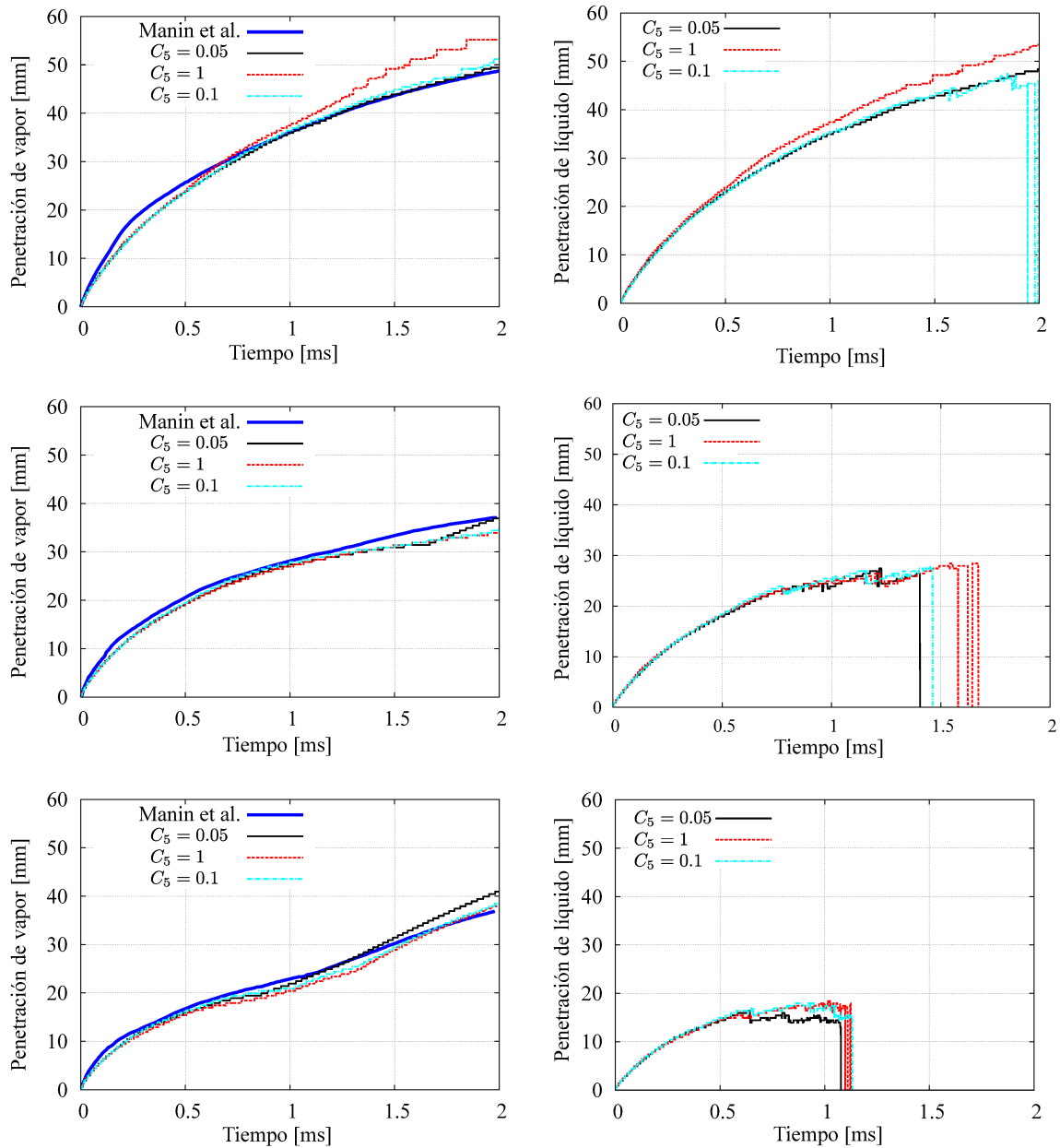


Figura 7.12: Penetración de vapor y líquido para las tres condiciones de inyección utilizando diferentes valores de C_5 .

7.5.3. Influencia del parámetro B_1 en el modelo de KH

En este análisis se simulan las tres condiciones de inyección utilizando dos valores distintos para la constante B_1 : $B_1 = 7$ y $B_1 = 40$. En la Fig. 7.15, se muestran los resultados de penetración de vapor y líquido. Respecto a la penetración de vapor se observa que la sensibilidad del parámetro B_1 es mayor para las condiciones de inyección II y III. En ambos casos la penetración de vapor es mayor en la primera parte de desarrollo del *spray* para el valor superior de B_1 . Sin embargo, en la condición de inyección III se aprecia que luego del cambio de curvatura de la curva la simulación con $B_1 = 7$ termina alcanzando

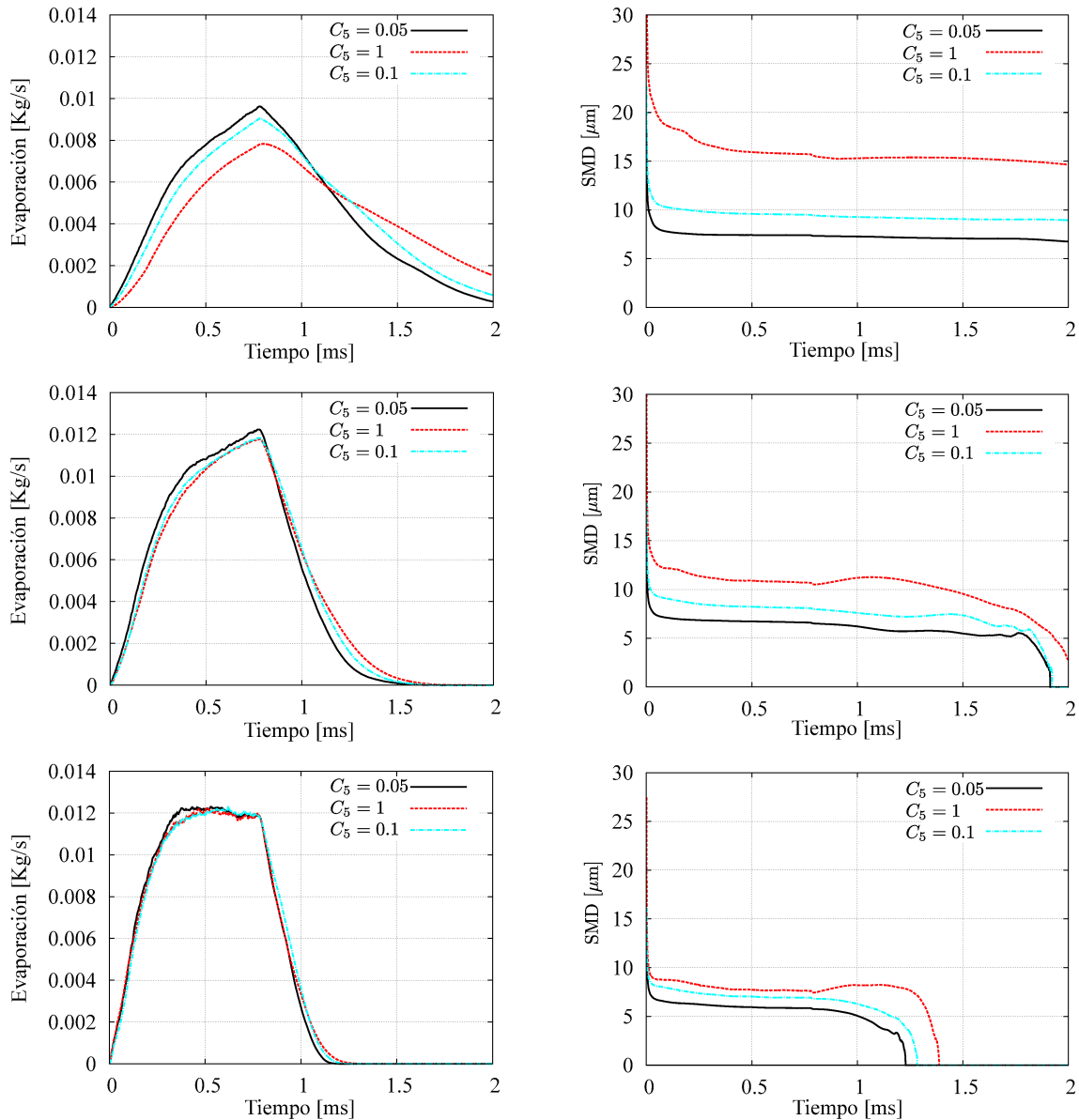


Figura 7.13: Evaporación instantánea y diámetro de Sauter medio para las tres condiciones de inyección utilizando diferentes valores de C_5 .

una mayor penetración al final del *spray*. Por el lado de la penetración de líquido, en todos los casos se observa mayor penetración para el valor $B_1 = 40$ siendo su influencia mayor para las condiciones II y III. Del análisis de la tasa de evaporación y diámetro medio de Sauter a partir de la Fig. 7.16 se observa que cuanto mayor es el valor de B_1 , mayor es el diámetro de Sauter, siendo menor la tasa de evaporación. Por último se analiza el número total de atomizaciones debido a cada modelo en la Fig. 7.17. Se observa que el valor de B_1 no tiene influencia en el modelo de HG pero si afecta de forma directa el número de atomizaciones del modelo de KH. Cuanto más chico es B_1 , mayor es la cantidad de atomizaciones debido a KH. Además, este parámetro de estudio modifica el número de atomizaciones por RT siendo la

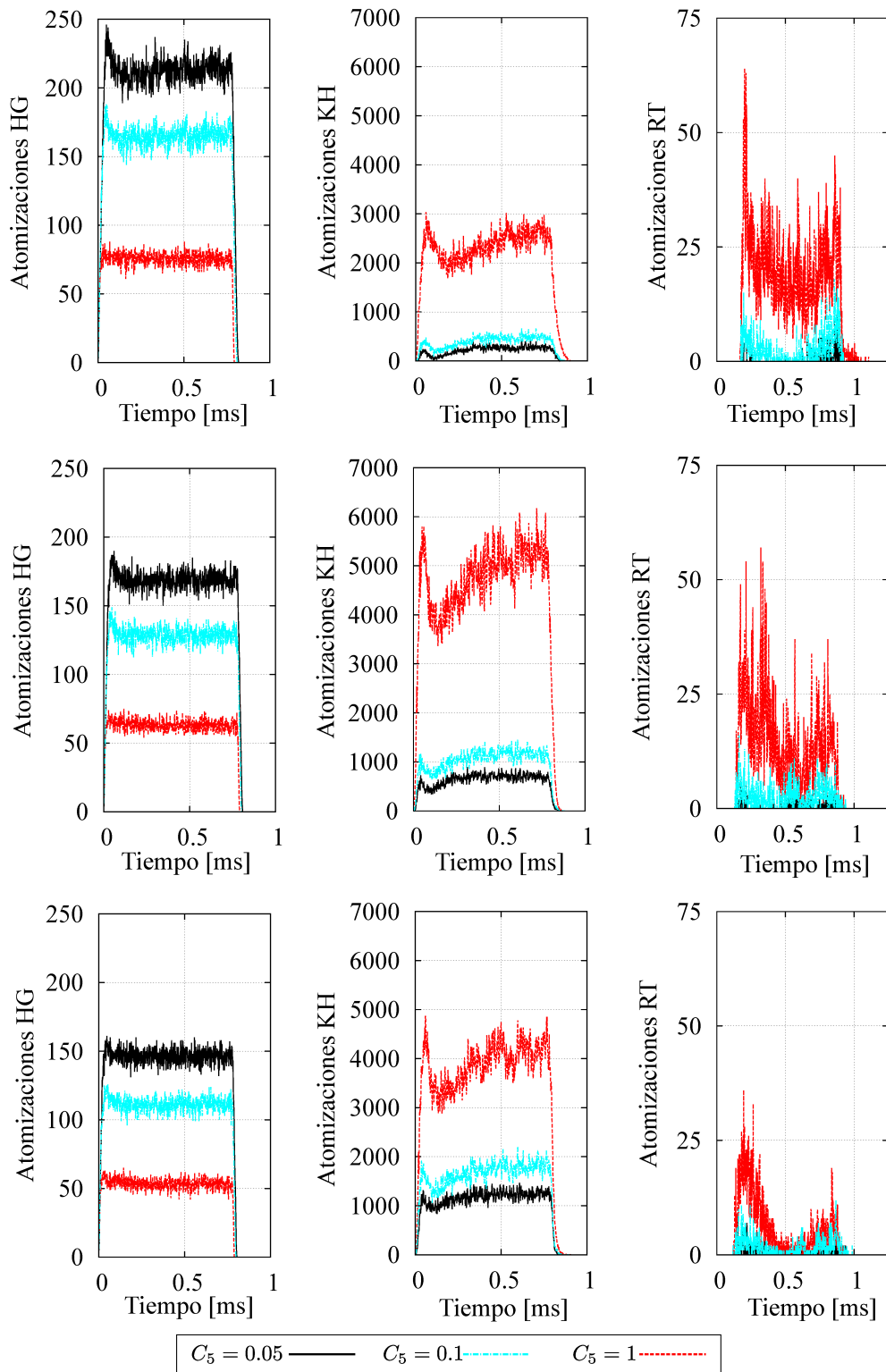


Figura 7.14: Número total de atomizaciones por paso de tiempo para las tres condiciones de inyección utilizando diferentes valores de C_5 .

tendencia inversa al caso de KH.

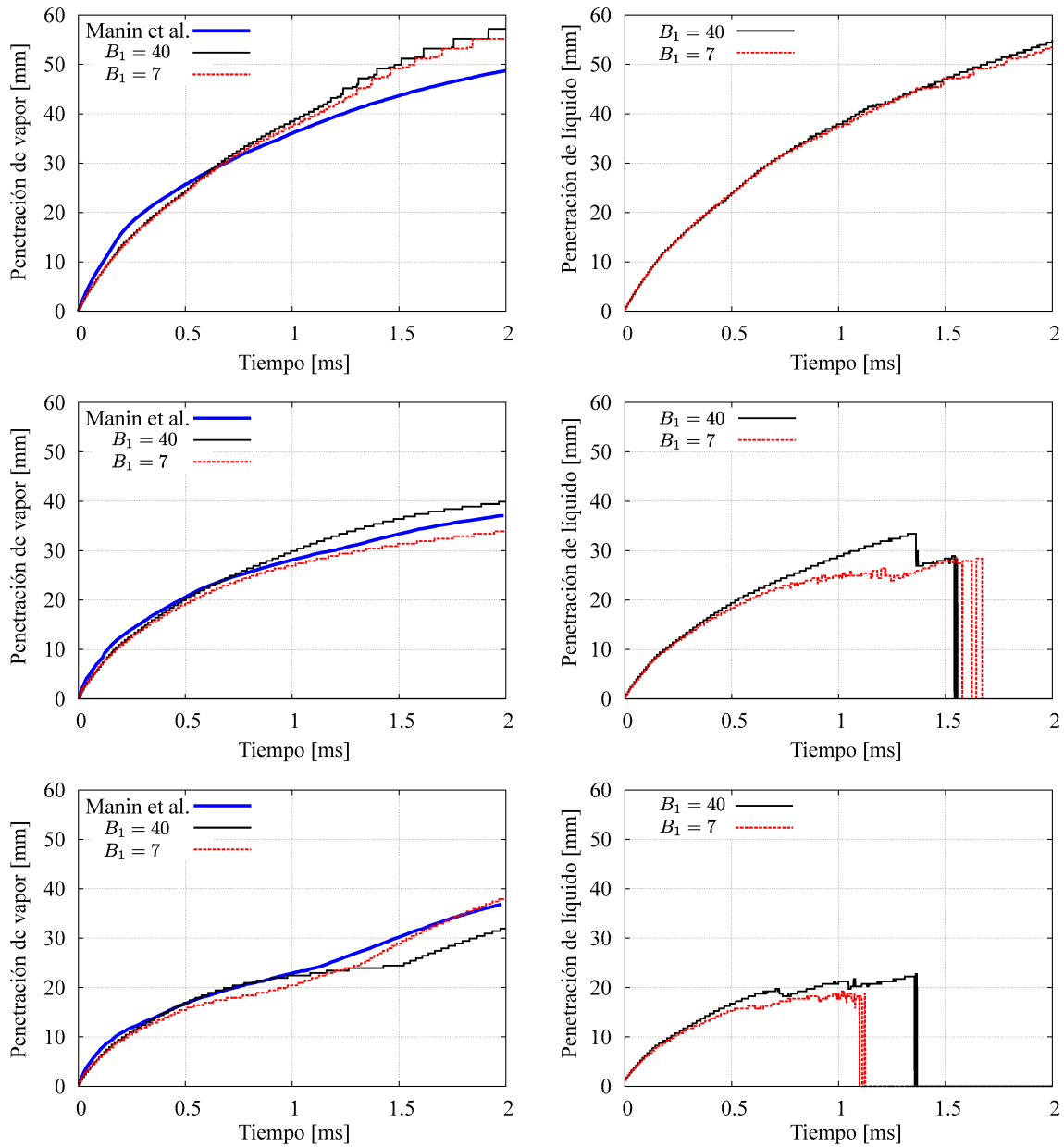


Figura 7.15: Penetración de vapor y líquido para las tres condiciones de inyección utilizando diferentes valores de B_1 .

7.5.4. Influencia del parámetro C_{bu} en el modelo de RT

El último parámetro de estudio es la constante C_{bu} del modelo de RT la cual define la longitud del chorro líquido y en consecuencia determina la longitud mínima, por encima de la cual se habilita la acción del fenómeno de RT sobre las gotas del *spray*. En la Fig. 7.18 se grafica la penetración de vapor y líquido para valores 2, 5 y 10 del parámetro C_{bu} . Se concluye que la forma y valores alcanzados por las curvas de penetración no son sensibles al valor de C_{bu} .

A partir del análisis de las tasas de evaporación y diámetro medio de Sauter presentado en la Fig. 7.19

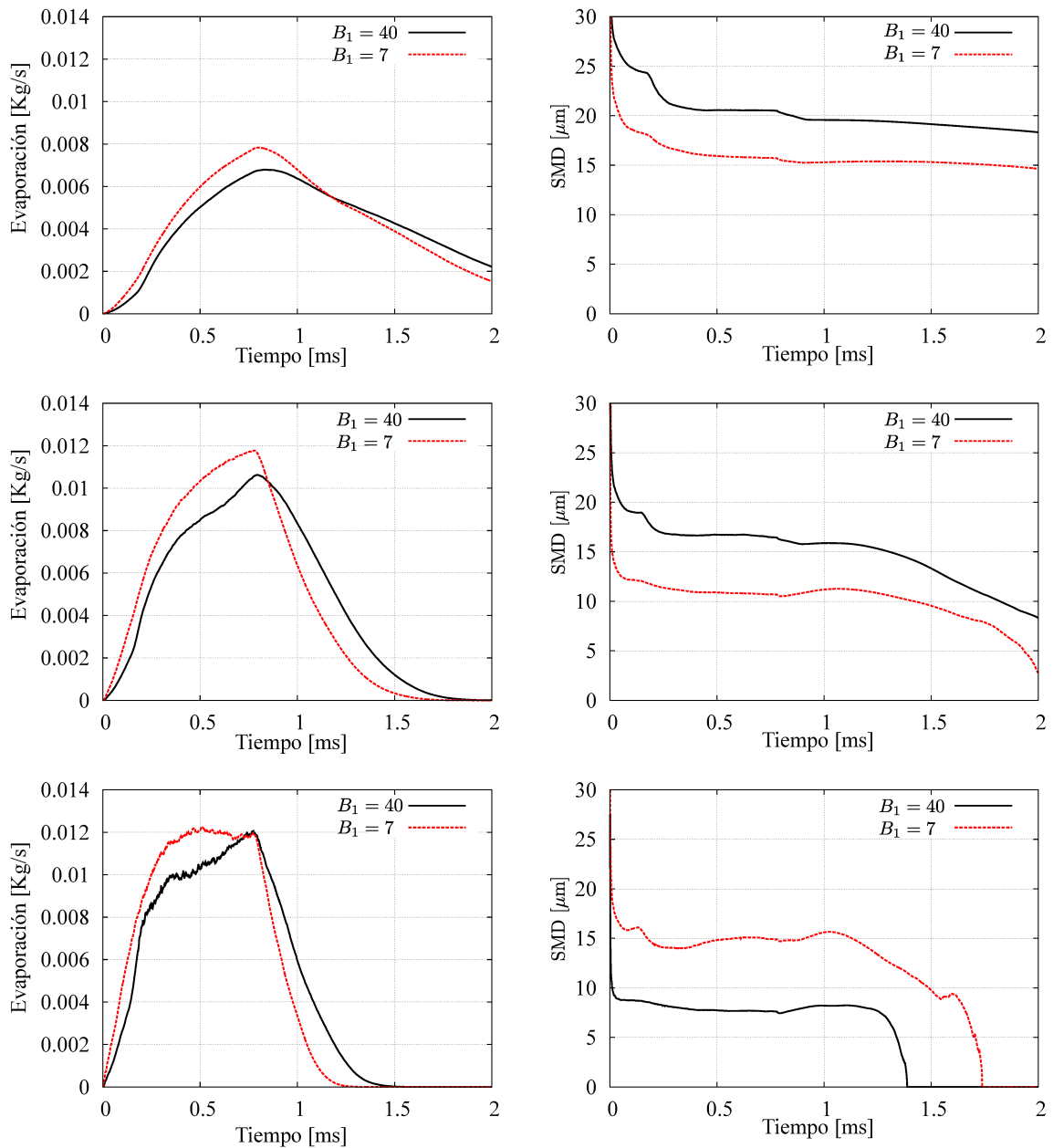


Figura 7.16: Evaporación instantánea y diámetro de Sauter medio para las tres condiciones de inyección utilizando diferentes valores de B_1 .

se concluye que utilizando los valores $C_{bu} = 5$ y $C_{bu} = 10$ no modifica de forma sensible los resultados. Sin embargo, si se aprecian diferencias con el valor $C_{bu} = 2$ para el cual se desarrollan menores diámetros medios y una mayor tasa de evaporación.

Luego en los resultados provistos por la Fig. 7.20 se observa sensibilidad del parámetro C_{bu} por parte de los modelos de KH y RT. En particular, las diferencias más grandes son resultado del valor $C_{bu} = 2$ que genera un mayor número de atomizaciones por RT y una reducción significativa del número de atomizaciones de KH.

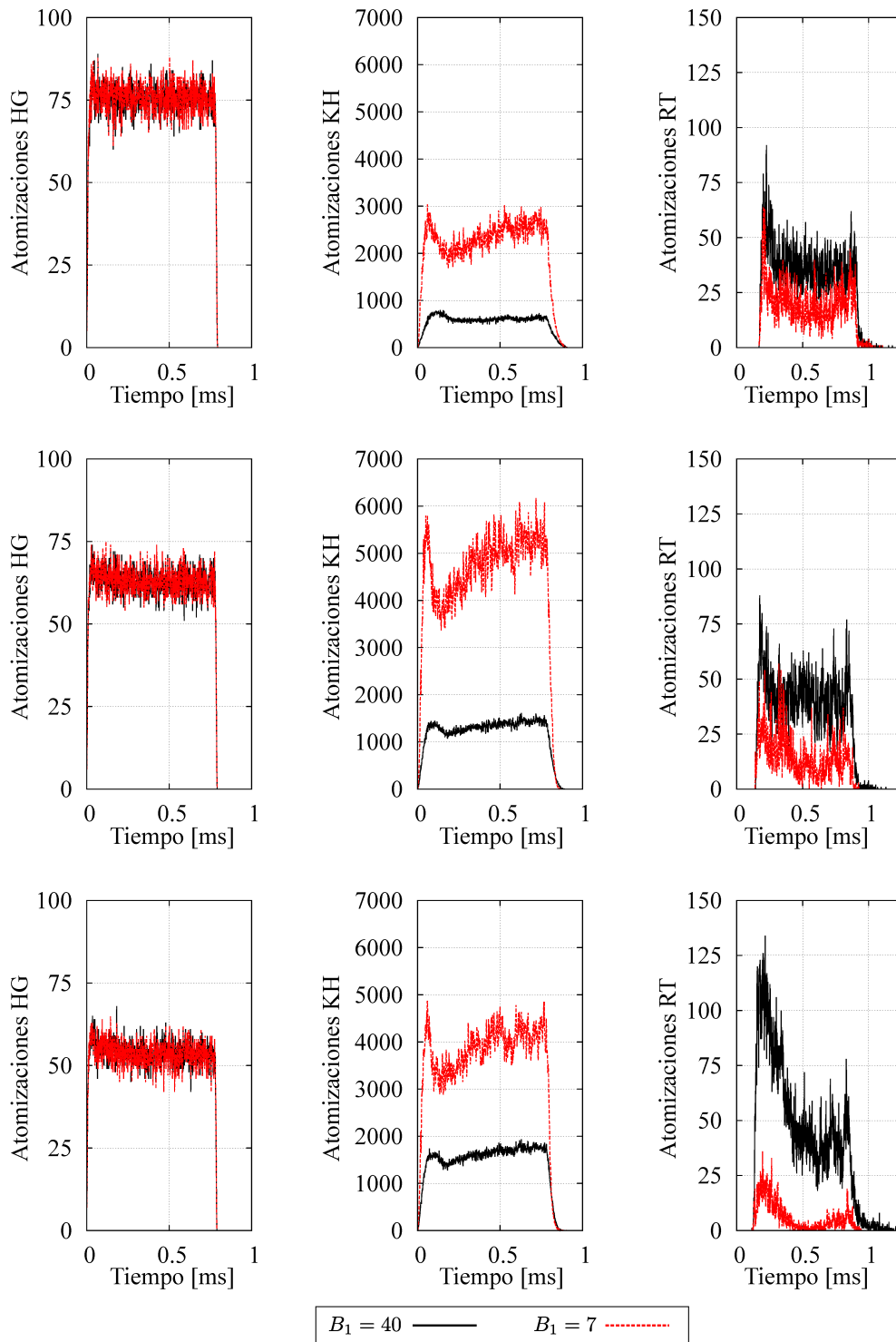


Figura 7.17: Número total de atomizaciones por paso de tiempo para las tres condiciones de inyección utilizando diferentes valores de B_1 .

7.5.5. Conclusiones

A partir del estudio paramétrico realizado en los párrafos precedentes se llega a las siguientes conclusiones:

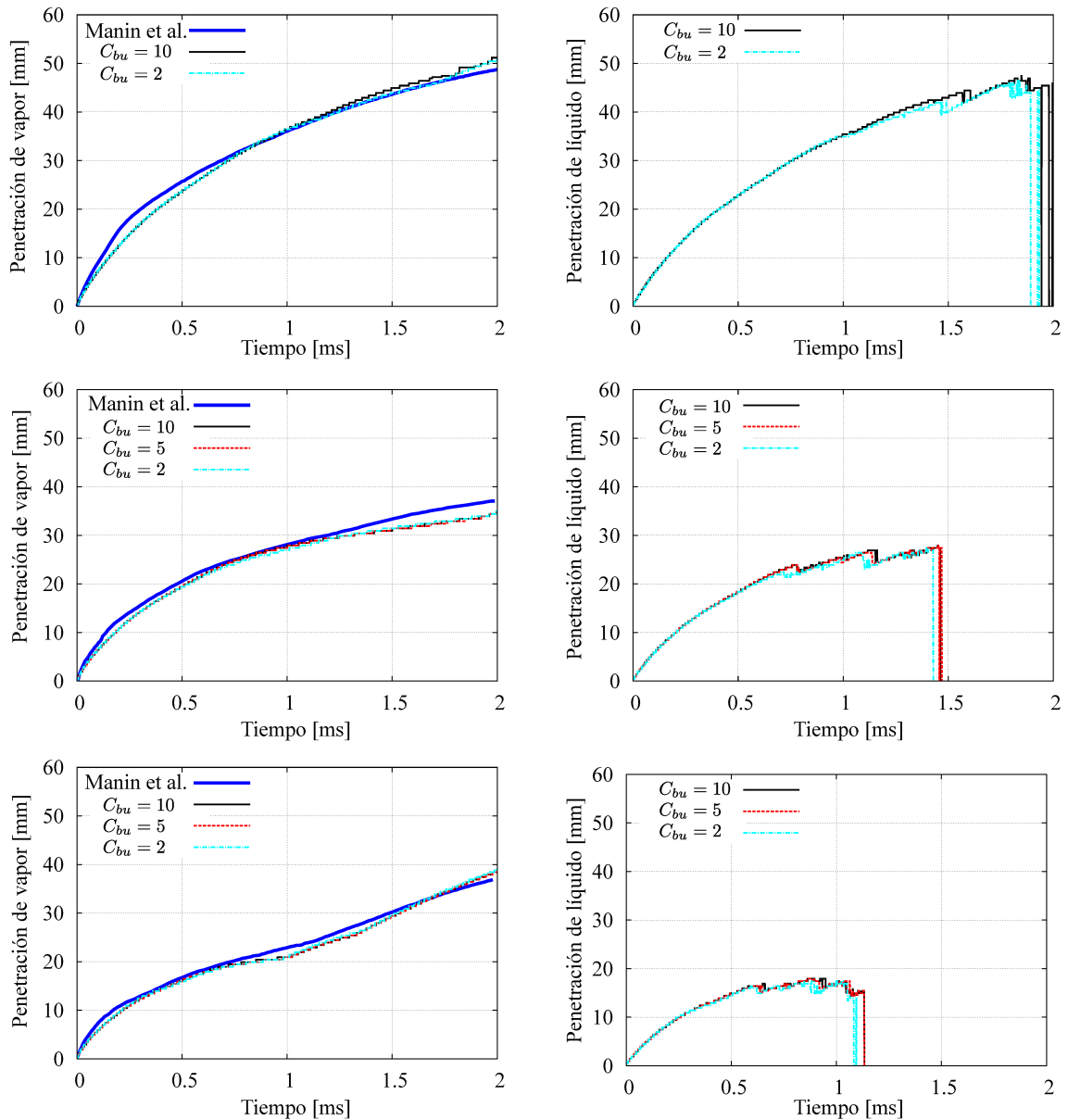


Figura 7.18: Penetración de vapor y líquido para las tres condiciones de inyección utilizando diferentes valores de C_{bu} .

- El parámetro C_5 del modelo HG influye de forma significativa en la evolución del *spray* modificando sensiblemente los valores de penetración, diámetros medios y porcentaje de participación de los modelos. Debido a esto se debe precisar el valor de este parámetro al comienzo de la etapa de ajuste.
- El parámetro B_1 permite realizar un ajuste preciso de la influencia del modelo de KH sin afectar significativamente la participación en los otros modelos de atomización. A su vez, el modelo de KH tiene un rol importante en el diámetro medio de Sauter y en la penetración del *spray*. Este parámetro es muy útil en la puesta a punto del *spray* debido a que permite controlar el diámetro

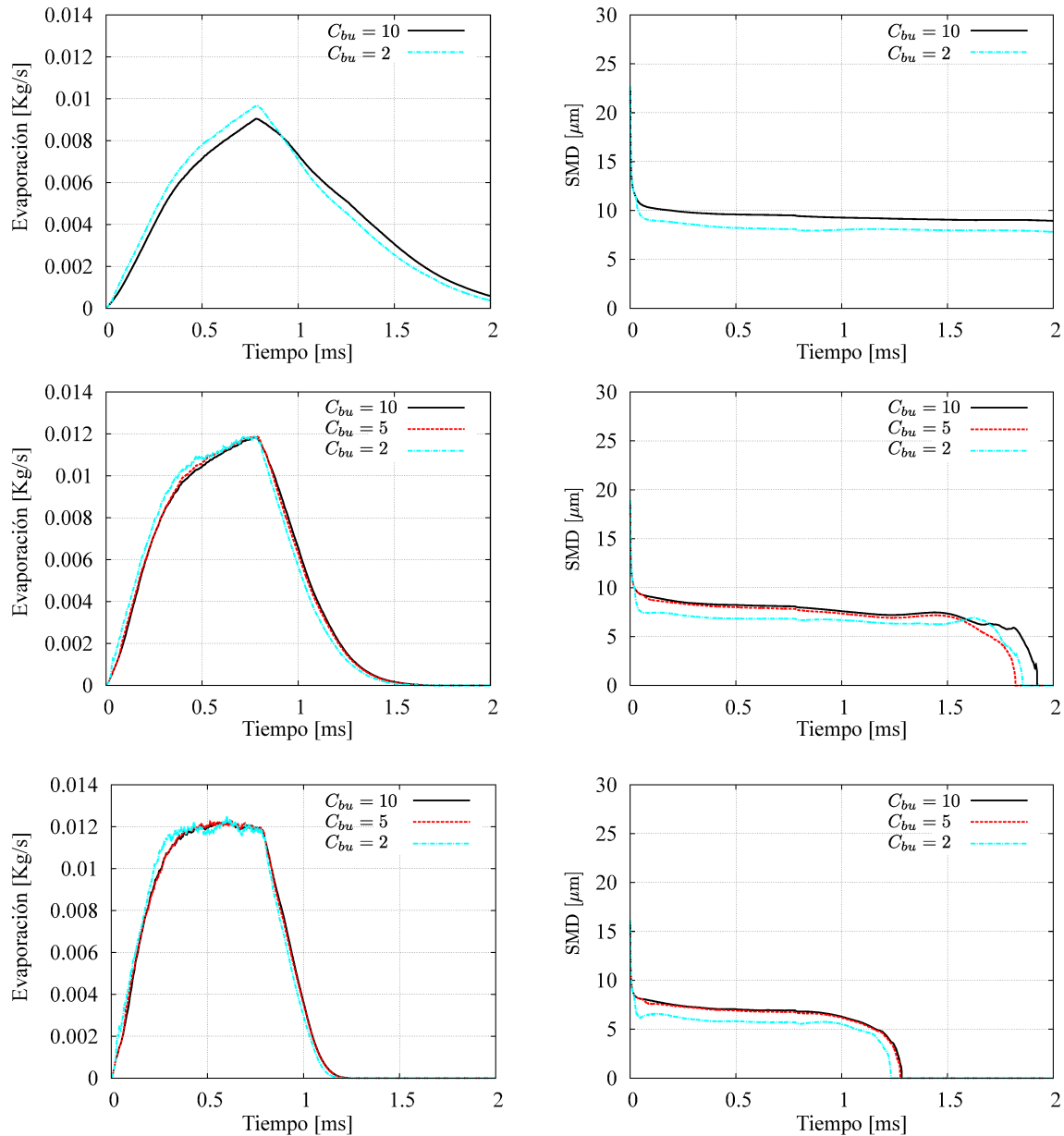


Figura 7.19: Evaporación instantánea y diámetro de Sauter medio para las tres condiciones de inyección utilizando diferentes valores de C_{bu} .

medio y la penetración sin afectar la forma de las curvas de penetración.

- El parámetro C_{bu} define la zona dentro del *spray* en el cual compite el modelo de RT. Por debajo de cierto valor, el modelo de RT compite directamente con el modelo de KH. A mayor participación del modelo de RT se observan menores diámetros de gotas en el *spray*.

A partir de los resultados y conclusiones elaboradas se eligen los siguientes valores de los parámetros estudiados: $C_5 = 0,1$, $B_1 = 7$ y $C_{bu} = 2$. La elección se basa en un mejor ajuste a las curvas de penetración de vapor experimentales y, además, se busca una participación equilibrada de cada modelo

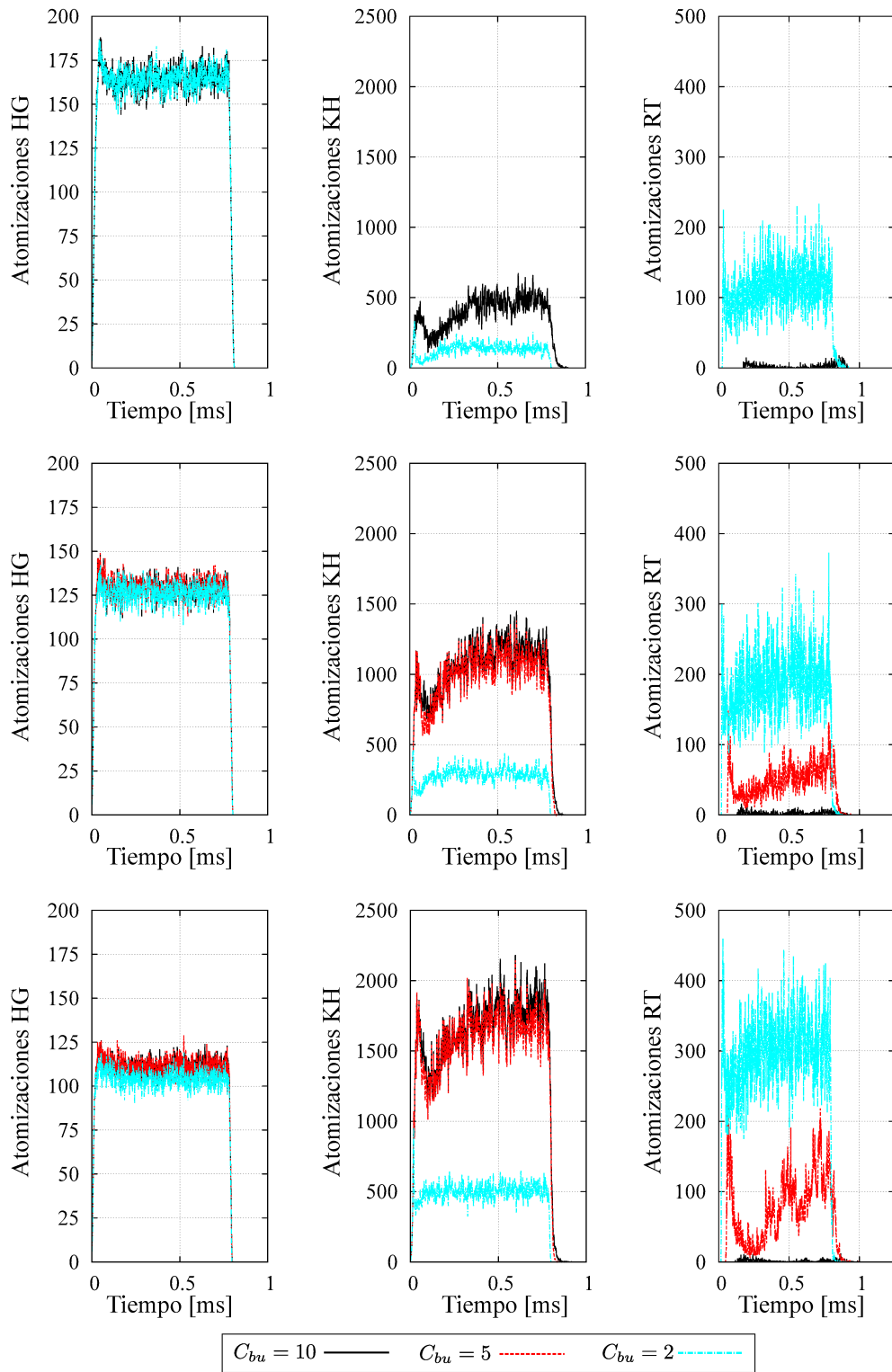


Figura 7.20: Número total de atomizaciones por paso de tiempo para las tres condiciones de inyección utilizando diferentes valores de C_{bu} .

de atomización.

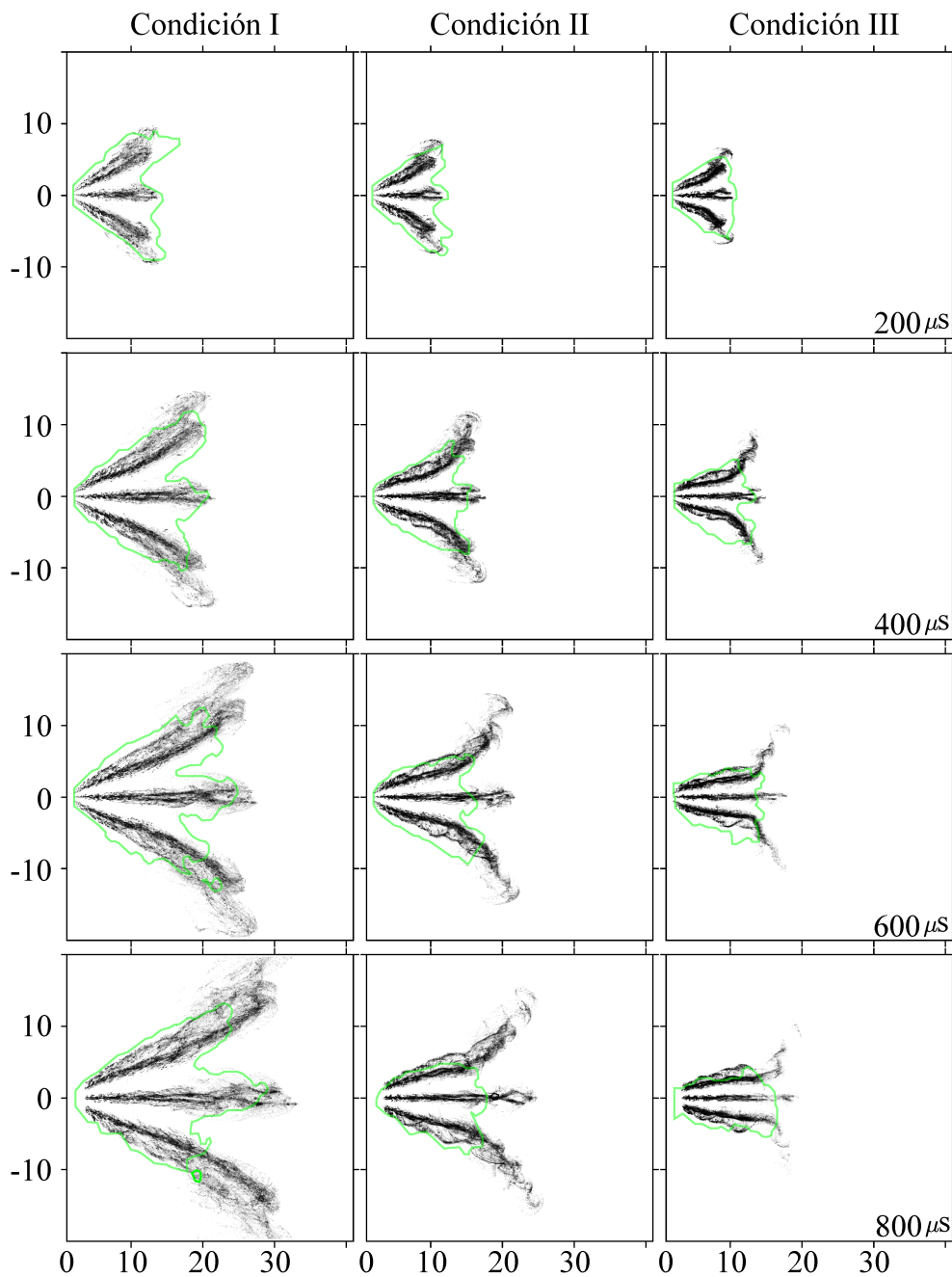


Figura 7.21: Evolución del *spray* líquido para diferentes instantes temporales en las tres condiciones ambientales estudiadas.

La evolución del líquido y vapor del *spray* utilizando esta configuración de parámetros se muestra en las Figs. 7.21 y 7.22 respectivamente. En estas figuras se presentan diferentes estados temporales del *spray* líquido y contornos de fracción de vapor igual a 0,1 % para las tres condiciones de inyección. En todos los cuadros presentados se muestra el *spray* desde el punto de vista definido como orientación I en el trabajo de Manin *et al.* [101]. En las gráficas 7.21 y 7.22 se incluyen los contornos exteriores del líquido y vapor resultantes de las pruebas experimentales del trabajo de Manin *et al.*. De la comparación

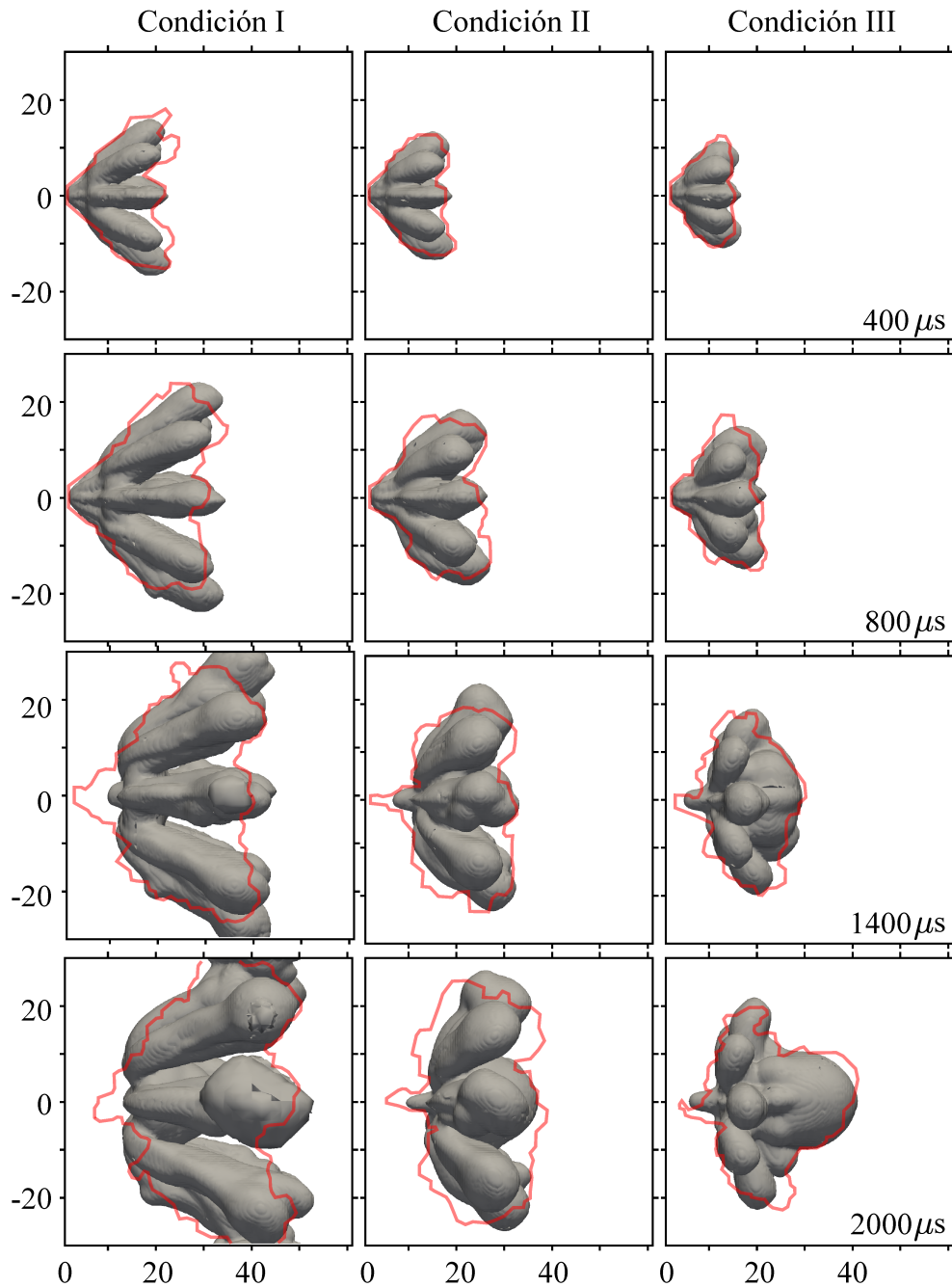


Figura 7.22: Evolución de la isosuperficie de vapor igual a 0,1% para diferentes instantes temporales sobre las tres condiciones ambientales estudiadas.

se concluye de forma general que existe un muy buen ajuste de los resultados lográndose captar de forma coherente la morfología del *spray* para los diferentes instantes y condiciones de inyección. En la figura respectiva al *spray* líquido se consigue capturar la variación del ángulo de apertura que se observa entre las diferentes condiciones de inyección. Por otro lado, en las isosuperficies de vapor se capturan los cambios de morfología que se suceden, principalmente en la condición III. Relativamente, se encuentra un mejor ajuste para los contornos de vapor que para el caso del *spray* líquido en donde se observa una

sobreestimación de la penetración.

Capítulo 8

Simulación computacional de un motor de pistones opuestos

8.1. Introducción

Los motores de pistones opuestos poseen ventajas relativas en comparación con motores de cuatro tiempos equivalentes. El fundamento de estas ventajas es la carencia de la tapa de pistón del motor y sus respectivas válvulas lo que conduce a motores más livianos, económicos y con mayor rendimiento térmico. En contraposición, los motores de pistones opuestos padecen las desventajas propias de los motores con ciclo de dos tiempos en relación a las emisiones contaminantes. Esto ha provocado un descenso importante de la fabricación de este tipo de motores a partir de la segunda mitad del siglo pasado. Sin embargo, el avance de la tecnología ha permitido mejorar el desempeño de estos motores lo cual se ha demostrado en un trabajo reciente [16]. Si bien las ventajas de los motores de pistones opuestos son importantes para aplicaciones en donde su bajo peso y robustez son cualidades imprescindibles, su rendimiento térmico y su potencial de cumplir los estándares de emisiones, posicionan a este tipo de motores en una línea importante de investigación dentro del área de los ICE.

En la literatura se encuentran numerosos ejemplos de aplicación de la mecánica de fluidos computacional para la simulación de motores de pistones opuestos. En vistas de comparar con un motor de cuatro tiempos equivalente, Mattarelli et al. [106] presenta un estudio computacional entre motores Diesel en donde el motor de pistones opuestos demuestra menor consumo y menores emisiones de NOx. Asimismo, Shokrollahihassanbarough et al.[107] demuestra mayor rendimiento térmico a través de un análisis termodinámico. El proceso de entrada y salida de gases en motores de pistones opuestos es de fundamental importancia para aumentar su eficiencia volumétrica. En este contexto, Liu et al. [108] diseñó un modelo sintetizado del flujo desarrollado en los puertos de un motor de pistones opuestos para su

uso en simulaciones multidimensionales basado en experimentos. En relación al proceso de inyección y combustión, Ma et al. [109] estudia el efecto de múltiples puntos de ignición sobre la velocidad de llama. En la misma línea de investigación, Tulwin et al. [110] analiza el efecto en la eficiencia de la combustión según la cantidad de *swirl* presente en el cilindro y la forma geométrica de la cabeza de pistón. Por su parte, Venugopal et al. [111] evalúa el efecto sobre la combustión de distintas estrategias de inyección por medio de simulación computacional y experimentos. Un motor comercial de pistones opuestos Diesel de tres cilindros de la Firma Achates Power, concebido para aplicaciones de carga liviana, demostró poseer un sobresaliente rendimiento térmico por encima del 50 % cumpliendo normativas de emisiones [112]. En su diseño se aplicó la mecánica de fluidos computacional para el desarrollo y optimización del proceso de barrido, cabeza de pistones y altura de los puertos.

Dentro de este marco, este capítulo integra las herramientas desarrolladas en la tesis con el fin de realizar simulaciones fluidodinámicas sobre el motor de pistones opuestos JLA. En una primera parte, se describe la configuración del modelo computacional profundizando sobre los detalles de configuración de las interfaces de pseudo-supermallas y de la técnica de *layering*. Posteriormente se realiza una prueba de escalabilidad computacional y de forma seguida se evalúa la eficiencia computacional y estabilidad del *solver* de flujo compresible en una simulación fluidodinámica de un ciclo completo de funcionamiento del motor. Finalmente, se realiza un análisis del proceso de inyección de combustible estudiando la influencia de la geometría de la cabeza de pistón y el punto temporal de comienzo de la inyección.

8.2. Modelado computacional del motor JLA

La simulación computacional de un motor de pistones opuestos es compleja a razón de la presencia de partes móviles cuya interacción es variable. El cilindro del motor experimenta grandes variaciones volumétricas debido al movimiento de los pistones. A lo largo del ciclo de funcionamiento del motor, el cilindro varía su conectividad con los puertos de admisión y escape generando interfaces con partes acopladas y desacopladas. Dentro de este contexto, se aplican las herramientas diseñadas e implementadas en esta tesis con el fin de resolver los inconvenientes propios de la naturaleza dinámica del motor. Se utiliza la estrategia de deformación de malla en combinación con *layering* para resolver las deformaciones en el cilindro y por otro lado, se adopta la estrategia de pseudo-supermallas para efectuar el acople numérico entre los subdominios del motor. El modelo computacional del motor de pistones opuestos se presenta en las Fig. 8.1 donde se pueden apreciar la disposición del cilindro y de los colectores de escape y admisión haciendo foco en sus respectivas lumbreras.

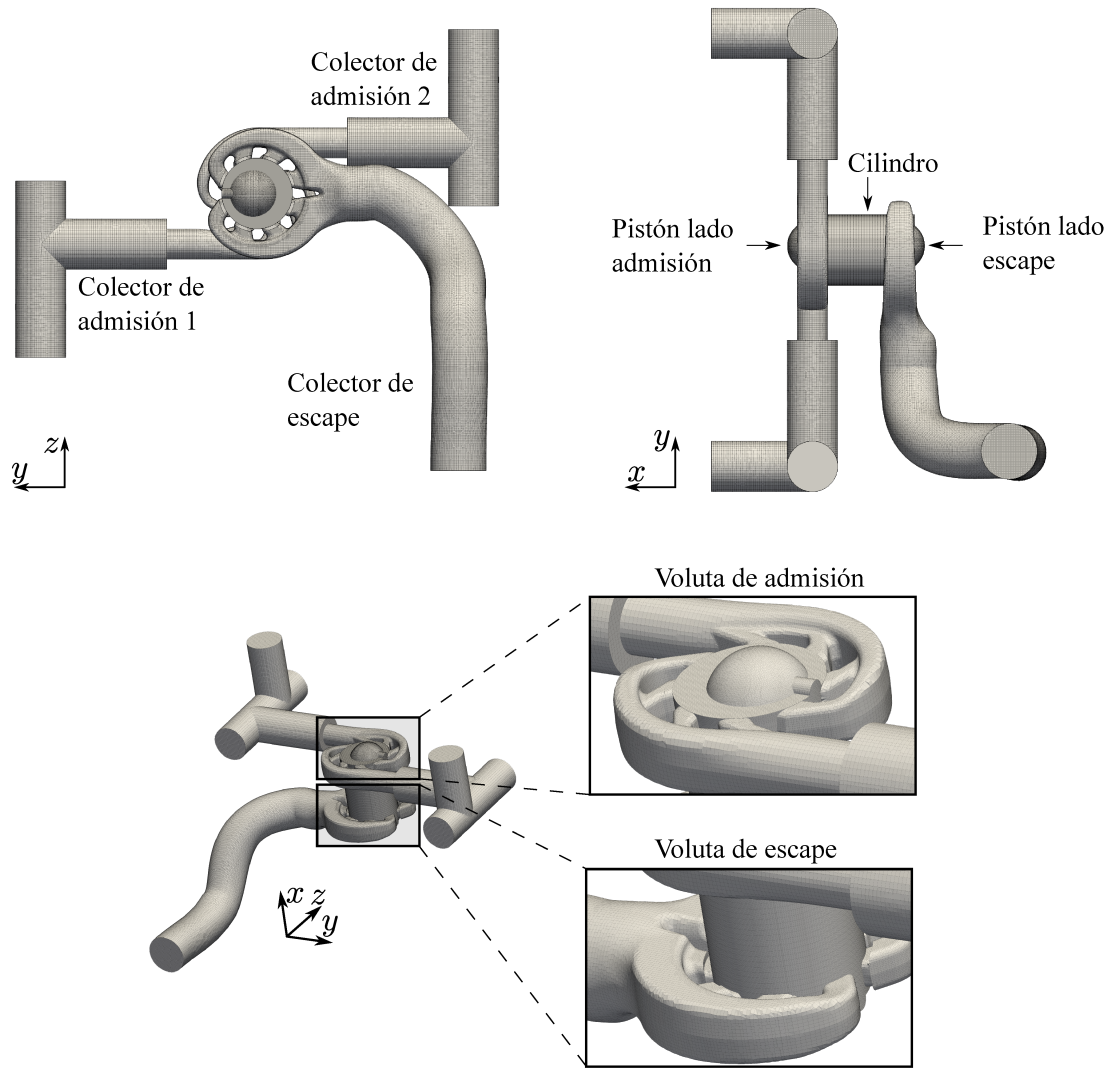


Figura 8.1: Vistas y perspectiva de los dominios que componen el modelo computacional del motor de pistones opuestos.

8.2.1. Cinemática del motor

Las lumbreras y los puertos están tallados en el interior del bloque motor siendo su posición determinada al momento de la fabricación. Por esta razón, el reglaje del motor se define por medio del desfase relativo entre los cigüeñales que manejan cada grupo de pistones opuestos. Cada conjunto de pistón y biela del motor son idénticos por lo que el desfase angular entre los cigüeñales es el parámetro que controla la posición relativa entre los pistones enfrentados. Las funciones de velocidad que determinan el movimiento de los pistones en el interior del cilindro se definen a continuación,

$$\begin{aligned}
 P_1(\theta) &= \sqrt{l^2 - a^2 \sin^2(\theta - \alpha)} + a \cos(\theta - \alpha) - (l + a) - \frac{h_{\text{gap}}}{2} \\
 P_2(\theta) &= -\sqrt{l^2 - a^2 \sin^2(\theta + \alpha)} - a \cos(\theta + \alpha) + (l + a) + \frac{h_{\text{gap}}}{2},
 \end{aligned}
 \tag{8.1}$$

donde θ es el ángulo de giro del cigüeñal y h_{gap} es la distancia mínima entre los pistones si se los considera a ambos en su punto muerto superior. La definición de los restantes parámetros geométricos del motor y sus valores respectivos se presentan en el Cuadro 8.1. El parámetro h_{gap} depende de la distancia entre centros de cigüeñales, la longitud de la biela y la distancia entre cabeza y perno de pistón:

$$\begin{aligned} h_{\text{gap}} &= h_c - 2(a + l + h_p) \\ &= 0,98 \text{ mm.} \end{aligned} \quad (8.2)$$

El movimiento de los pistones definido en la Ec. (8.1) genera la expansión y compresión del cilindro en donde su longitud axial se corresponde con la distancia entre pistones,

$$H(\theta) = P_2(\theta) - P_1(\theta). \quad (8.3)$$

Para mayor claridad, se muestra en la Fig. 8.2 la función $H = f(\theta)$ en función del ángulo de giro del cigüeñal indicando los puntos de mayor distancia (PME, punto muerto exterior) y de menor distancia (PMI, punto muerto interior) entre los pistones. Estas distancias extremas dentro del ciclo del motor son iguales a 106 mm y 1,7 mm respectivamente lo que es equivalente a una relación entre máxima y mínima separación de aproximadamente 62 veces.

8.2.2. Interfaces de pseudo-supermallas en el motor de pistones opuestos

La configuración de las interfaces de pseudo-supermallas en el motor de pistones opuestos se describe de forma gráfica en la Fig. 8.3. Aquí se observa que la interfaz fuente está compuesta por las superficies de los puertos de admisión y escape. Estas están constituidas a su vez por ocho lumbreras rectangulares por puerto respectivamente. Las lumbreras se comunican con la superficie exterior del cilindro la cual constituye la interfaz destino. En el estado de malla mostrado en la figura, los puertos de admisión y escape están totalmente abiertos. En esta posición, la interfaz fuente está totalmente acoplada mientras

Parámetro	Símbolo	Valor
Diámetro del cilindro	d_c	70 mm
Radio de cigüeñal	a	26,5 mm
Longitud de biela	l	125 mm
Distancia entre cigüeñales	h_c	386,78 mm
Desfase entre cigüeñales	α	18° mm
Distancia entre perno y cabeza de pistón	h_p	41,4 mm
Volumen de cavidad	V_c	14,59 cm ³

Cuadro 8.1: Principales parámetros del motor de pistones opuestos JLA.

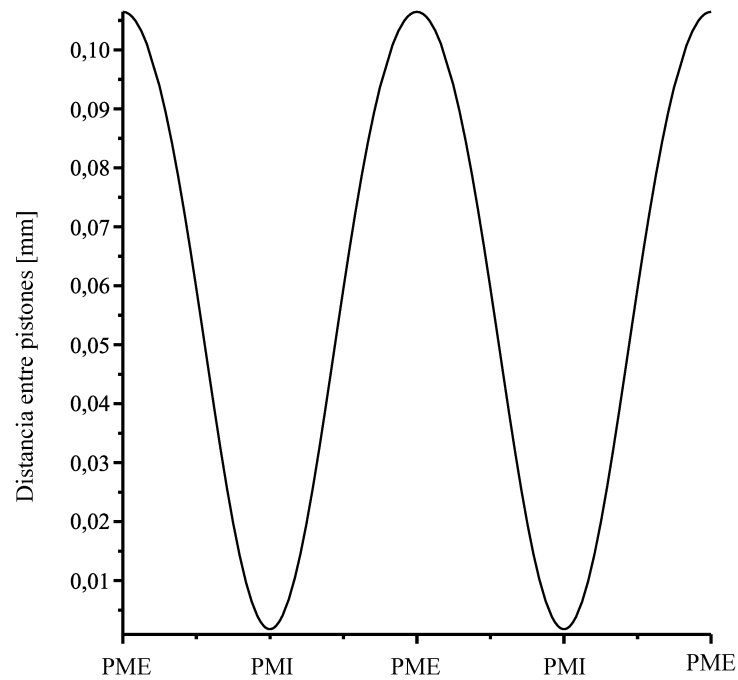


Figura 8.2: Distancia entre pistones en función del ángulo de cigüeñal

que la interfaz destino tiene zonas acopladas y desacopladas. A partir de un cierto grado de compresión del cilindro, los puertos se cubren totalmente quedando ambas interfaces desacopladas.

En la Fig. 8.3 se observa que la cantidad de caras de la interfaz fuente es considerablemente menor a las caras correspondientes a la interfaz destino. Según se explicó en el capítulo 4, la construcción de las interfaces de pseudo-supermallas se realiza generando una supermalla local sobre la interfaz fuente. Por

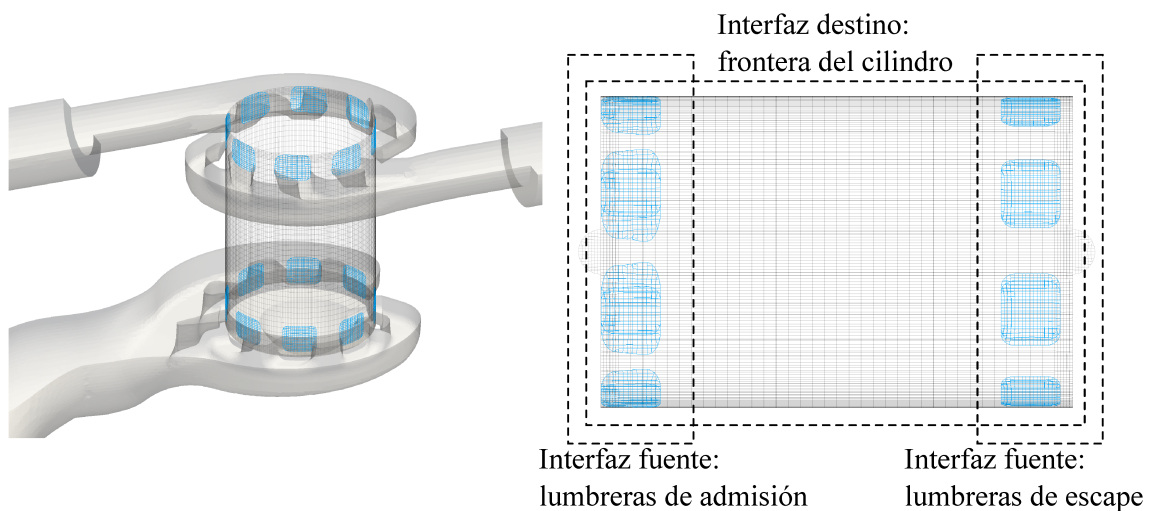


Figura 8.3: Interfaces destino y fuente en el motor de pistones opuestos.

esta razón, es conveniente elegir como interfaz fuente a aquella compuesta con el menor número de caras, ya que una vez encontradas todas las caras en intersección de la interfaz destino, se asume que las caras no procesadas de esta última interfaz se corresponden con su sector no acoplado. Con este concepto, se evitan realizar búsquedas de intersección innecesarias sobre las caras no acopladas de la interfaz destino.

8.2.3. Deformación de malla y *layering* en el motor de pistones opuestos

El recinto del motor está conformado físicamente por el cilindro al cual se le suman las cavidades presentes en ambos pistones. Cuando los pistones se acercan o alejan se varía la longitud del cilindro disminuyendo o aumentando su volumen. Sin embargo, el volumen de las cavidades de los pistones permanece invariable ya que estas se mueven de forma rígida con los pistones. Debido a esto, para lograr una relación de compresión determinada, la distancia entre las partes planas de los pistones se reduce a un valor que es 62 veces más pequeño en comparación con su valor máximo. En consecuencia, la malla del sector cilíndrico comprendido entre los pistones varía su volumen de una forma muy pronunciada. Por esta razón, la deformación volumétrica del sector cilíndrico del motor se resuelve utilizando la técnica de *layering* en combinación con deformación de malla. Para este caso en particular, la combinación de *layering* con deformación de malla es necesaria ya que de otra forma se tendría un número de celdas excesivo cuando el cilindro se encuentra expandido. Además del sector cilíndrico, la técnica de malla dinámica impone el movimiento rígido sobre las cavidades del motor. Para explicar la configuración de las distintas zonas de movimiento se presenta la Fig. 8.4 donde se muestran las zonas de movimiento y la distribución de velocidades de los nodos en función de la posición. Se distinguen dos zonas de movimiento rígido para cada una de las cavidades respectivamente, dos zonas de deformación de malla ubicadas aguas arriba de los frentes de avance y una zona central deformable en donde se remueven o adicionan celdas. En la función velocidad se observa la discontinuidad presente en los puntos en donde se localizan los frentes de avance. Estas discontinuidades son las que generan la compresión y expansión de las capas de celdas adyacentes a los frentes dando lugar a la remoción y adición de celdas. La evolución de un corte transversal al cilindro mostrando las líneas de malla se presenta en la Fig. 8.5 que muestra la evolución de la malla en la fase de compresión.

8.3. Eficiencia en la paralelización de las herramientas de malla dinámica

8.3.1. Descomposición de dominios

En esta sección se evalúa la eficiencia computacional de las estrategias de malla dinámica. El cómputo en paralelo de la técnica de *layering* en combinación con pseudo-supermallas es una tarea compleja ya que se efectúan múltiples cambios topológicos en la malla que deben ser sincronizados apropiadamente.

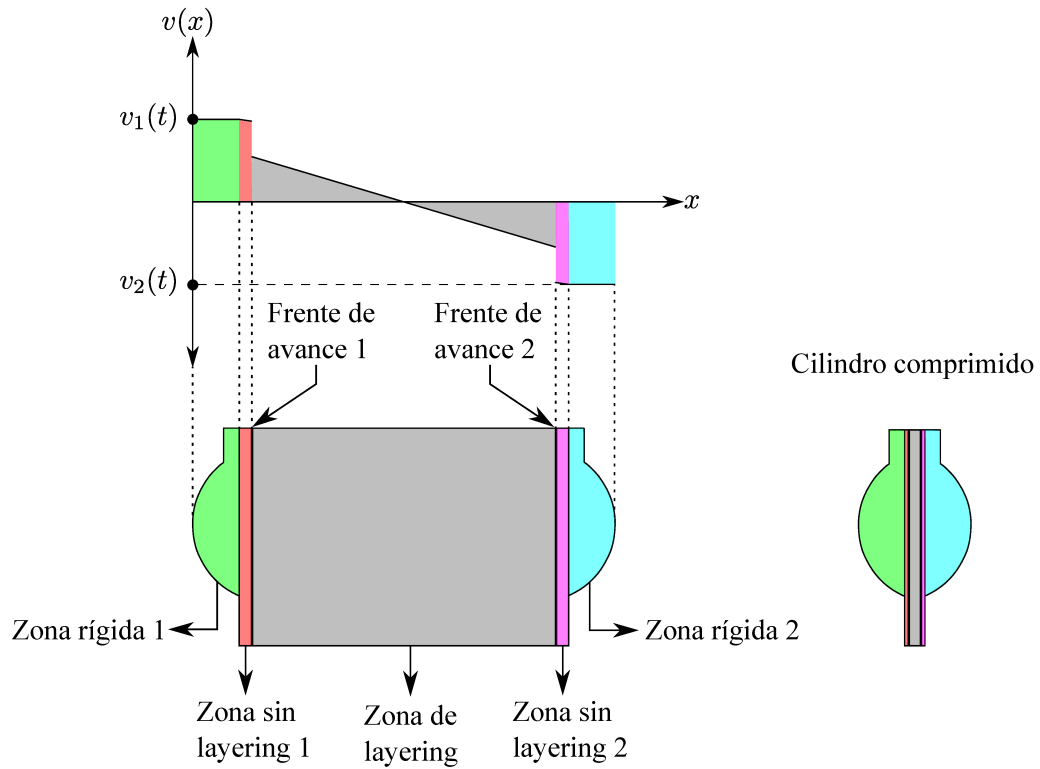


Figura 8.4: Distribución de las velocidades de los puntos en función de la posición para el cilindro del motor de pistones diferenciando las zonas de movimiento.

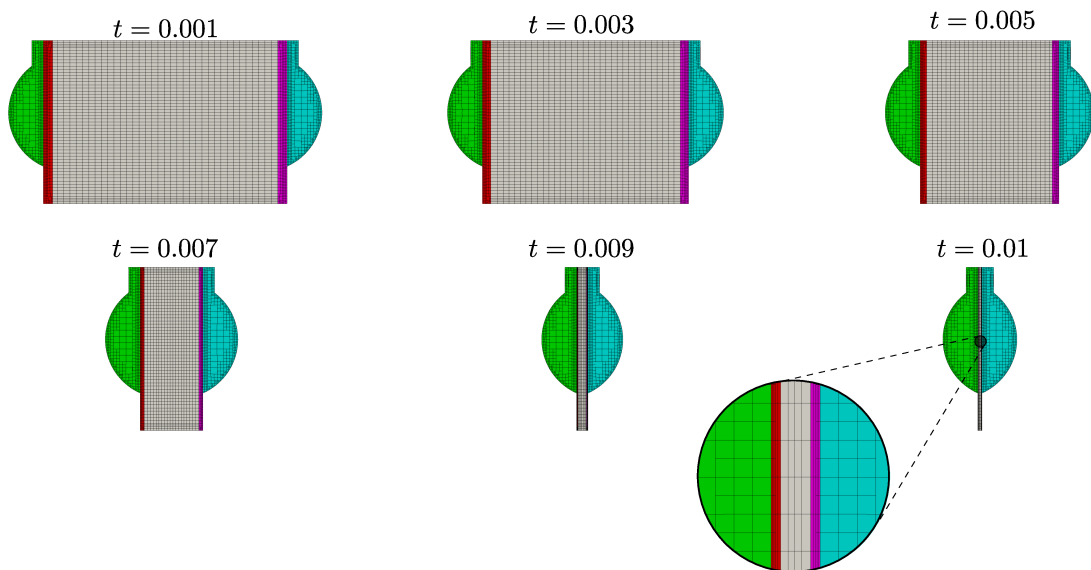


Figura 8.5: Evolución del proceso de deformación del cilindro en la fase de compresión.

Pero además, esta combinación impone una dificultad adicional al momento de realizar el preproceso de las simulaciones, principalmente en lo que respecta a la descomposición del dominio necesaria para el cómputo en paralelo. En este sentido, se diseña una herramienta de preproceso especialmente destinada a

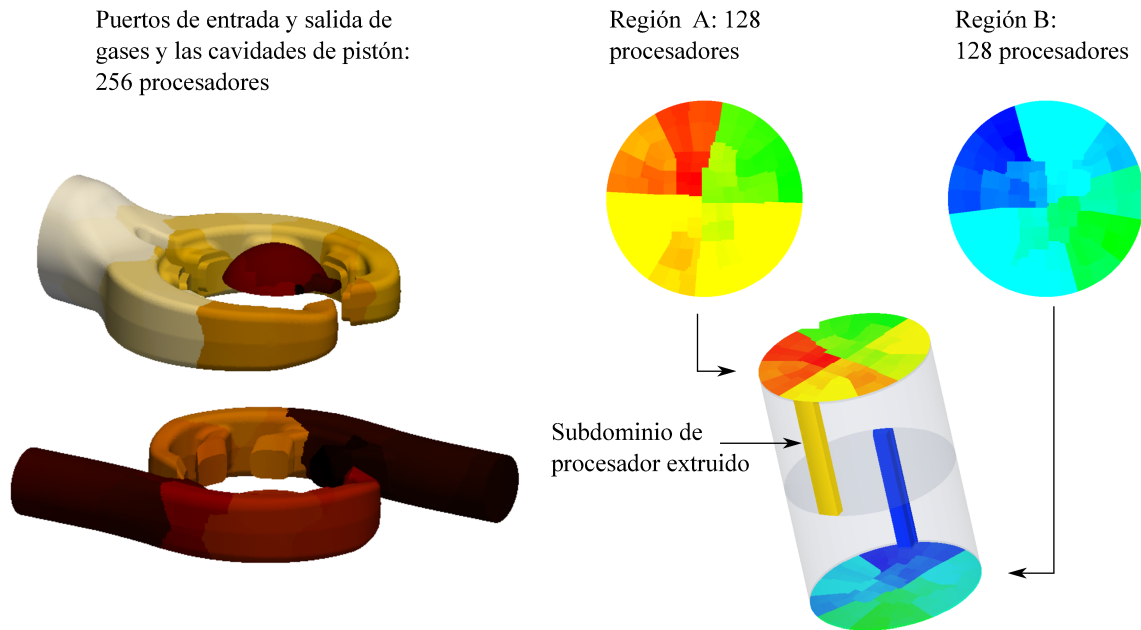


Figura 8.6: Descomposición del dominio para el caso del motor de pistones opuestos utilizando 256 procesadores. El dominio completo se divide en tres regiones combinando zonas estructuradas para *layering* y zonas no estructuradas.

particionar el dominio de acuerdo a las necesidades de la técnica de *layering*. En esta técnica se necesita que el particionamiento del dominio se base sobre una sección bidimensional tal cual se explicó por medio de la Fig. 5.22. Considerando esta restricción, se diseña un particionador automático que descompone cada zona de *layering* a partir de una subdivisión bidimensional inicial. Para cada zona se puede elegir de forma independiente el método de descomposición de dominios. Luego, cada una de las divisiones bidimensionales se extruyen a lo largo de sus zonas respectivas. Por otro lado, el resto de las regiones se descomponen de forma independiente utilizando el esquema de particionamiento que se desee. Un ejemplo de aplicación de esta herramienta se muestra en la Fig. 8.6 donde se descompone el dominio computacional del motor JLA. Este se divide en tres regiones: el cilindro A, el cilindro B y las restantes partes del motor que son el puerto de admisión y escape y las cavidades de los pistones. Cada una de estas regiones se descomponen de forma independiente teniendo en cuenta que los cilindros se dividen a partir de un esquema bidimensional inicial. Cada cilindro se descompone utilizando 128 procesadores mientras que las regiones restantes (colectores y cavidades de pistón) se subdividen en 256 procesadores. Con este esquema de particionamiento se asegura un óptimo balance de la simulación en lo que respecta al número de celdas de malla por procesador para todos los instantes de la simulación.

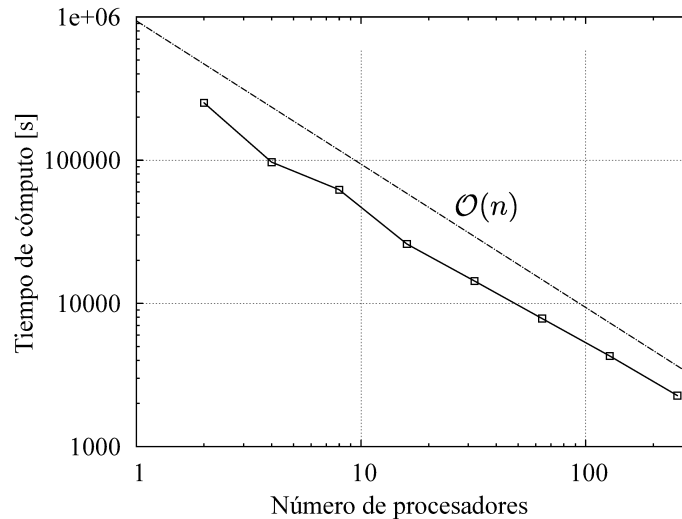


Figura 8.7: Tiempo de cómputo necesario para completar un ciclo del motor en función del número de procesadores utilizando una malla de 18,5 millones de celdas y 2000 pasos temporales.

8.3.2. Escalabilidad computacional

Se evalúa la escalabilidad del cómputo en paralelo de las herramientas de malla dinámica simulando un ciclo completo del motor. El dominio computacional tiene un número de celdas totales de aproximadamente 18,5 millones de celdas y para reproducir el ciclo completo se utilizan 2000 pasos de tiempo. Los resultados de esta prueba se presentan en la Fig. 8.7. en donde se concluye que la eficiencia de la implementación en paralelo es del orden del 86 %.

8.4. Convergencia en malla y estabilidad numérica

Se realiza un estudio fluidodinámico del motor de pistones opuestos resolviendo la admisión y escape de gases sin considerar los fenómenos de inyección y combustión. En este sentido, se considera que el motor se acciona por medio de una fuente de movimiento externa, como lo puede ser un motor eléctrico acoplado al cigüeñal. El objetivo principal de estas simulaciones es evaluar la estabilidad de las estrategias de malla dinámica y la convergencia de los resultados por medio de un estudio de convergencia en malla. Para esto se simula el motor con tres discretizaciones diferentes utilizando 1, 4 y 16 millones de celdas las cuales definen la configuración gruesa, fina y media respectivamente. En la Fig. 8.8, se muestran las mallas a través de cortes localizados en el plano medio del puerto de admisión.

8.4.1. Configuración

Se configura una velocidad de cigüeñal de 3000 revoluciones por minuto correspondiente a una duración total del ciclo de motor de 0,02 s. El paso de la discretización temporal se define en 10^{-5} s.

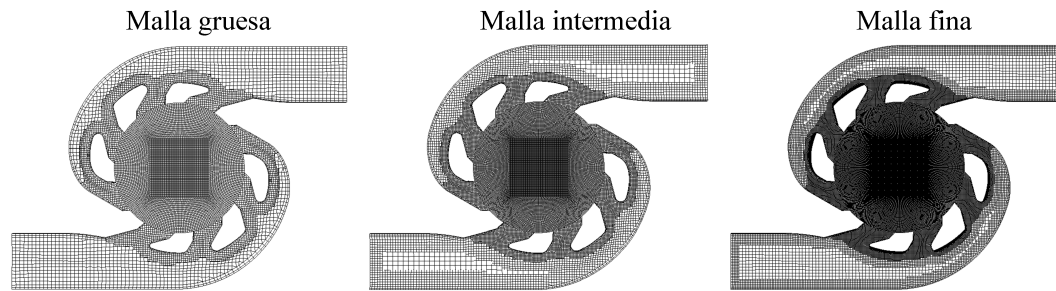


Figura 8.8: Cortes de malla sobre el colector de admisión que muestran los refinamientos utilizados para estudiar la convergencia de las simulaciones del motor de pistones opuestos.

Parámetro	Valor
Constante del gas ideal (R)	287 (J/Kg K)
Calor específico a presión constante (C_p)	1005 (J/Kg K)
Coefficiente de Sutherland (A_s)	$1,45 \times 10^{-6}$
Temperatura de Sutherland (T_s)	110,4 K

Cuadro 8.2: Parámetros físicos del fluido.

El fluido se modela como gas ideal con propiedades físicas del aire. La dependencia de la viscosidad y la conductividad térmica se computan por medio del modelo de transporte de Sutherland [113] con los parámetros detallados en la Tabla 8.2. El problema se resuelve utilizando el algoritmo combinado SIMPLE-PISO descrito en el capítulo 2 mientras que la turbulencia se modela con el modelo $k-\epsilon$ [114]. La discretización de los operadores diferenciales se definen a continuación: la convección se resuelve por medio del método *upwind* de segundo orden, los operadores difusivos se computan con un esquema lineal y el término temporal se discretiza por medio del esquema Euler de primer orden. Las condiciones de borde del problema son: presión total en la entrada (120000 Pa) y presión estática en la salida (101300 Pa). Para la temperatura, se fija un valor de entrada de 343 K mientras que en la salida y en las paredes, se asumen condiciones adiabáticas. Para la velocidad se impone gradiente nulo en las entradas y salidas. Por su lado, en las paredes se configura una condición de no resbalamiento. La turbulencia en las paredes se modela con funciones de pared.

8.4.2. Resultados

Se realiza un análisis cuantitativo de las simulaciones. En este contexto, se calculan los promedios pesados en masa de la presión y temperatura dentro del cilindro. Además, se computa el flujo total que ingresa y egresa de los puertos de admisión y escape respectivamente. La evolución de estas cantidades en función del ángulo de giro del cigüeñal se presentan en la Fig. 8.9. De forma complementaria, se realiza un estudio cualitativo de los resultados en donde se analizan las distribuciones de valores de la velocidad y de la viscosidad turbulenta sobre dos cortes. Uno de estos se localiza en la mitad del puerto

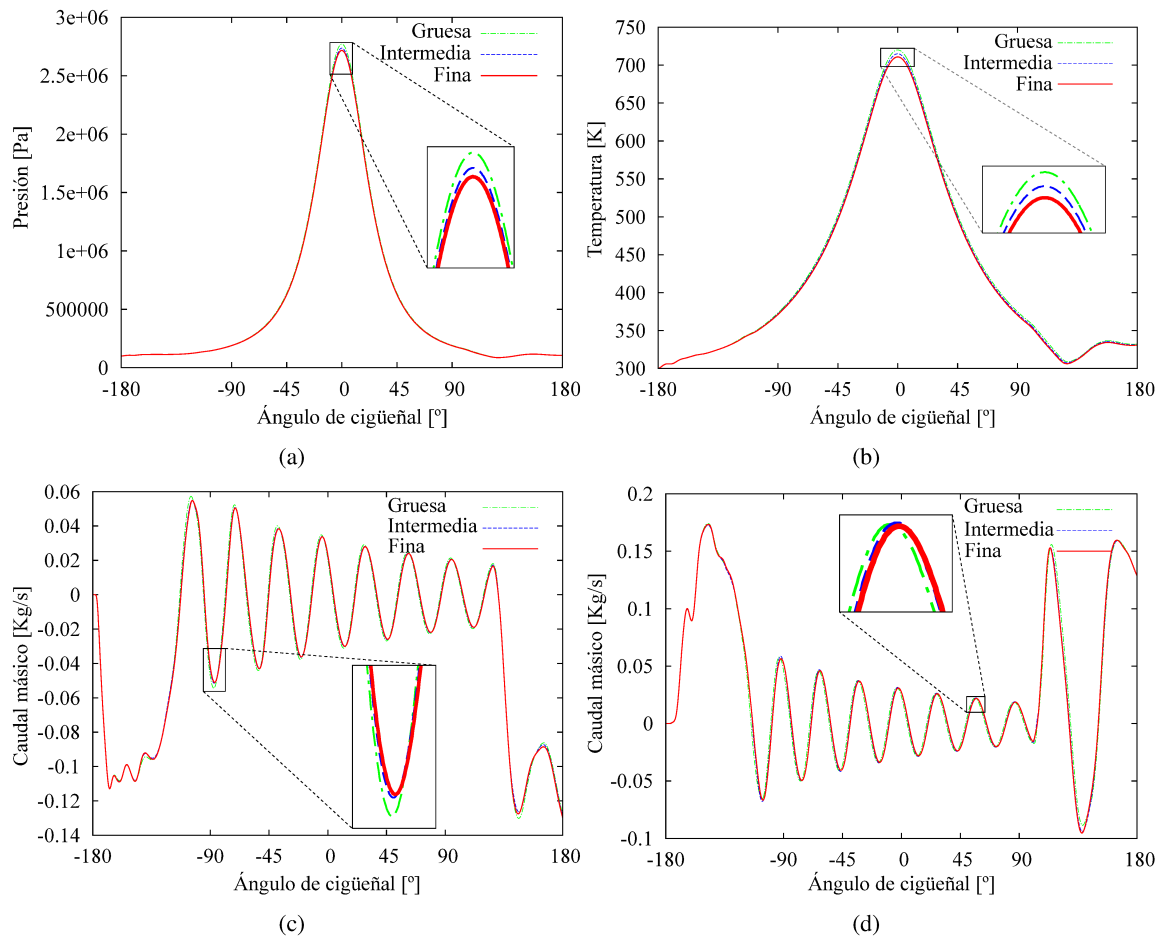


Figura 8.9: Evolución de la presión y temperatura del cilindro y de los caudales de entrada y salida al motor para el primer ciclo de motor simulado: (a) promedio pesado en masa de la presión dentro del cilindro; (b) promedio pesado en masa de la temperatura dentro del cilindro; (c) caudal de entrada; (d) caudal de salida.

de admisión y el restante se lo posiciona en el centro del cilindro en su estado de mayor compresión. Ambos planos se colorean de acuerdo a los valores de velocidad y viscosidad turbulenta respectivamente en la Fig. 8.10. Los estudios cuantitativo y cualitativo realizados sobre los resultados indican una muy buena convergencia en malla de las simulaciones. Adicionalmente, se resalta el grado de eficiencia computacional de las nuevas herramientas de malla dinámica en donde la fracción de tiempo necesaria para efectuar las acciones de malla dinámica requieren aproximadamente un 7,5 % del tiempo total de simulación.

8.4.3. Comentarios sobre la estabilidad numérica y convergencia

Otras propiedades importantes de las simulaciones es su estabilidad numérica y la convergencia obtenida de los algoritmos de acople velocidad-presión. Estas simulaciones se resolvieron también utilizando la técnica de interfaces ACMI [57] basada en interpolaciones no conservativas. En estas simulaciones,

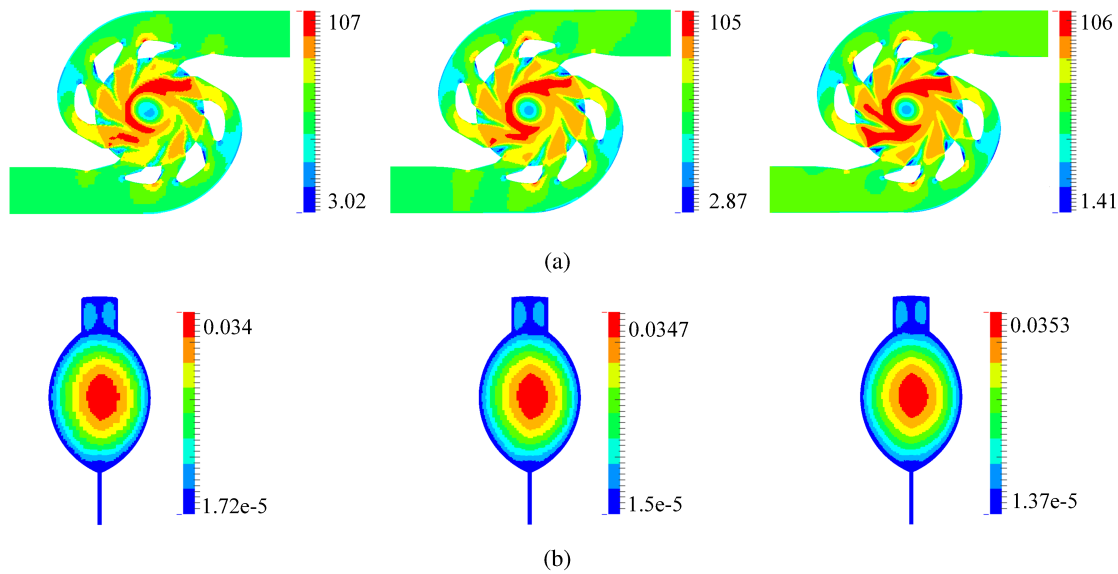


Figura 8.10: Cortes indicando valores de velocidad y viscosidad turbulenta para los tres niveles de refinamiento utilizados: (a) magnitud de la velocidad en el puerto de entrada para la fase de admisión del motor; (b) viscosidad turbulenta en una sección transversal al cilindro para su máximo estado de compresión.

la resolución de la ecuación de masa es inestable ya que el *solver* lineal diverge frecuentemente. Las inestabilidades se suceden, por ejemplo, cuando el pistón descubre las lumbreras, momento en el cual se genera un flujo de aire de elevada velocidad. Estos inconvenientes se producen debido a la falta de conservación de flujos en la interfaz. Tal como se explicó en el capítulo 3, la interpolación de flujos por métodos no conservativos, convierte sistemas de ecuaciones lineales simétricos en no simétricos. En otras palabras la discretización del operador difusivo introduce flujos convectivos espurios. Por otro lado, en sistemas de ecuaciones no simétricos, como en un transporte escalar general, donde se esperan flujos convectivos, las soluciones por métodos numéricos basados en matrices transpuestas son computados de forma incorrecta. Contrariamente, la estrategia conservativa de pseudo-supermallas soluciona estos inconvenientes logrando estabilidad y convergencia de los *solvers* lineales.

8.5. Inyección directa de combustible en el motor de pistones opuestos

En esta sección, se presenta un análisis del proceso de inyección de gasolina dentro del motor de pistones opuestos JLA. Este estudio tiene como objetivo evaluar la efectividad de las herramientas computacionales desarrolladas en un problema de ingeniería aplicado. Por otro lado, se examina el fenómeno de inyección con el fin de maximizar la evaporación de combustible y lograr un mezclado homogéneo dentro del motor de pistones opuestos JLA. Bajo esta premisa, se busca mejorar el proceso de combustión de la mezcla para reducir el consumo de combustible y las emisiones contaminantes.

Parámetro	Valor
Presión de admisión	150000 Pa
Temperatura de admisión	343 K
Régimen de giro	3000 RPM
Cantidad de combustible inyectado	30 mg
Duración de la inyección	2.340 ms
Volumen de cavidad de pistón	14550 mm ³

Cuadro 8.3: Valores usados en la simulación de la inyección de combustible en el motor de pistones opuestos.

8.5.1. Parámetros de estudio

El proceso de inyección de combustible en motores de combustión interna posee una gran cantidad de parámetros que permiten a los diseñadores ajustar el rendimiento de la inyección de acuerdo a los regímenes de funcionamiento del motor. Entre varios de ellos, uno de los más importantes es la curva de inyección la cual define el caudal de combustible inyectado en función del tiempo. Por medio de esta curva se configura la duración y la posición relativa del periodo de inyección al ciclo del motor. Otra área de estudio relevante es el diseño geométrico de la cámara de combustión la cual influye sobre el flujo de aire, el mezclado del combustible y su combustión. En el motor de pistones opuestos, la cámara de combustión esta constituida por las paredes del cilindro y las cavidades de los pistones.

En el presente estudio se analiza específicamente la influencia del punto temporal de comienzo de la inyección y la sensibilidad del proceso de mezclado de combustible a las características geométricas de la cabeza del pistón. Se adopta el inyector definido en el *Spray G* el cual se detalló en el capítulo previo. Se adopta el mismo caudal de salida definido para el *Spray G* pero triplicando su tiempo de inyección para ajustar la cantidad de combustible inyectado a los requerimientos de alimentación del motor JLA. En consecuencia, se inyecta por cada ciclo de motor una cantidad igual a 30 mg de combustible. Para el diseño de la cabeza de los pistones, se utiliza el mismo volumen de cavidad en todos los modelos estudiados. A modo de resumen, la Tabla 8.3 describe los parámetros adoptados en este estudio con sus respectivos valores.

8.5.2. Punto de comienzo de la inyección

El punto de comienzo de la inyección es un parámetro muy importante que condiciona el desarrollo del *spray* y su posterior vaporización y mezclado con el aire. Cuanto más próximo se inyecta el combustible en relación al punto muerto interior, mayor será la densidad y temperatura del aire en el cilindro. Estas características favorecen a los fenómenos de atomización de las gotas de combustible y además, debido a la mayor temperatura de aire, se incrementa la tasa de vaporización por mayor transferencia de energía térmica. Otra condición favorable es la reducción del combustible que alcanza a las paredes del cilindro

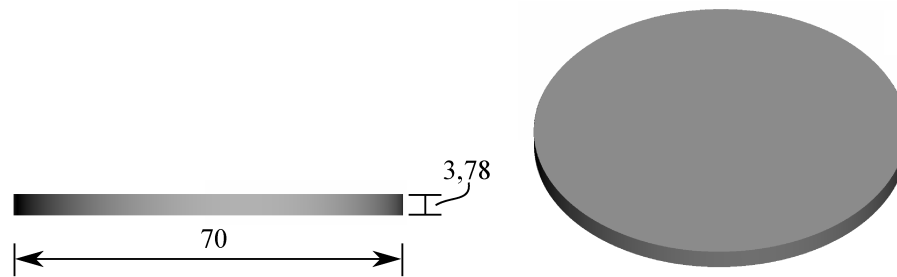


Figura 8.11: Dimensiones de la cavidad cilíndrica (pistón con caras planas). Vista lateral al eje axial del pistón y perspectiva del volumen correspondiente a la cavidad.

debido a una menor penetración del líquido a causa de una mayor densidad del aire. Por otro lado, debido a que los puertos han sido cerrados con mayor tiempo de anticipación se evitan corrientes de flujo en el interior del cilindro que puedan desplazar la masa inyectada hacia el pistón del lado de escape y por consiguiente depositar combustible en la cabeza de dicho pistón. Sin embargo, una inyección demasiado tardía reduce el tiempo disponible para la evaporación del combustible y su posterior mezclado con el aire lo que compromete la homogeneidad de la mezcla al momento de la ignición.

En este contexto, se estudian cuatro puntos temporales de comienzo de inyección: -102, -90, -72 y -54 grados de cigüeñal previo al punto muerto interior del motor (0 grados de cigüeñal). El motor se simula a un régimen de 3000 revoluciones por minuto en donde los 18 grados de separación de los puntos de inyección se corresponden con 1 ms. de tiempo físico. El período de inyección tiene una duración de 2.340 ms. que equivalen aproximadamente a 51 grados de cigüeñal.

8.5.3. Cavidades de pistón

Se generan tres formas distintas de la cavidad del pistón con el fin de evaluar su influencia en el mezclado del combustible. En el diseño de las geometrías se conserva el volumen de la cavidad para no afectar la relación de compresión. El primer modelo propuesto es una cavidad correspondiente a un pistón de cabeza plana con la finalidad de tener un modelo simple que sirva de referencia para el resto de las geometrías. Un pistón de cabeza plana es equivalente a una cavidad cilíndrica tal cual se define y dimensiona en la Fig. 8.11. A este modelo de cavidad se lo denomina como “Modelo I”. El segundo modelo propuesto es una cavidad semiesférica de profundidad igual a 15 milímetros la cual se ubica descentrada del eje axial del cilindro. La cavidad se conecta al punto de ignición por medio de un conducto semicircular. Las dimensiones de este modelo de cavidad se especifican en la Fig. 8.12. A este modelo de cavidad se lo denomina como “Modelo II”. Finalmente, se propone un tercer modelo de cavidad según se grafica en la Fig. 8.13. Este modelo se diferencia del modelo II en que el ancho de la cavidad es constante y su altura es menor. A este modelo de cavidad se lo denomina como “Modelo III”.

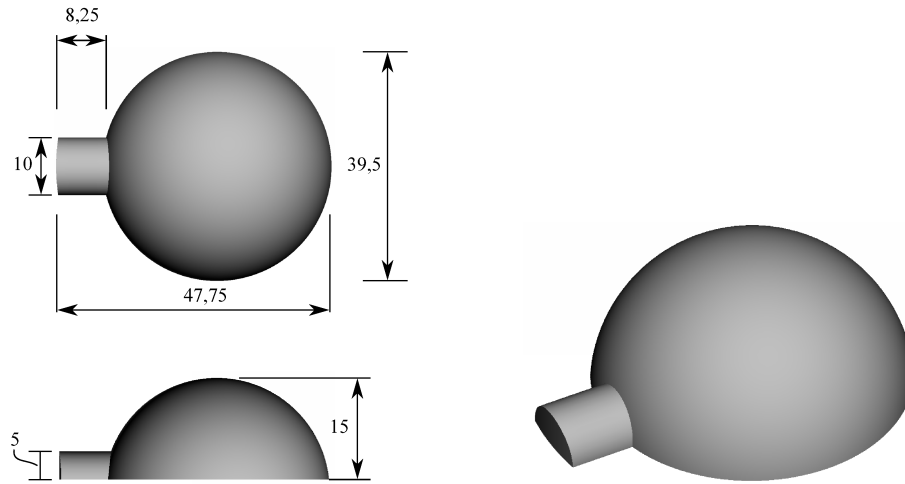


Figura 8.12: Dimensiones del segundo modelo de cavidad. Se muestra la vista normal al eje axial, una vista lateral y perspectiva del volumen correspondiente a la cavidad.

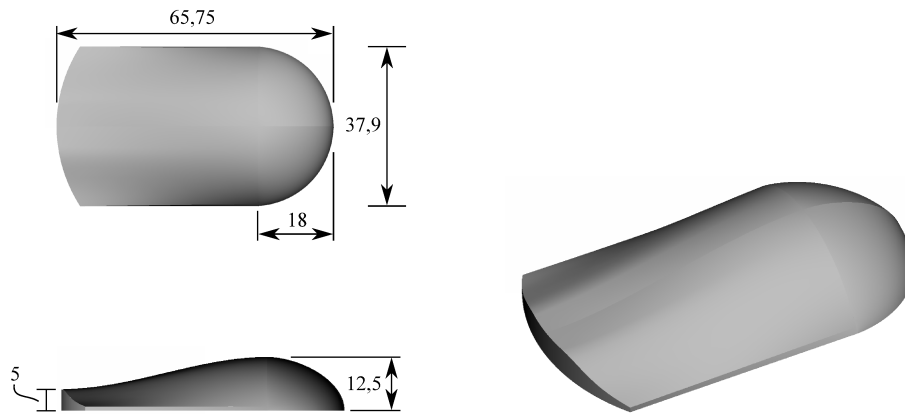


Figura 8.13: Dimensiones del tercer modelo de cavidad. Se muestra la vista normal al eje axial, una vista lateral y perspectiva del volumen correspondiente a la cavidad.

8.5.4. Metodología

Se proponen múltiples indicadores cuantitativos que tienen como objetivo precisar la calidad de la mezcla de combustible. Uno de los principales parámetros es la cantidad total de combustible evaporado m_c calculada como,

$$m_c = \sum_{P \in \Omega_C} m_{cP}, \quad (8.4)$$

donde Ω_C es la región del dominio determinada por el cilindro y las cavidades del pistón. Considerando la masa total de mezcla presente en Ω_C como m_t , se calcula la fracción media de combustible \bar{y}_c según:

$$\bar{y}_c = \frac{m_c}{m_t}. \quad (8.5)$$

A partir de este último valor se calcula el error medio cuadrático de las fracciones másicas locales y_{RMS} ,

$$y_{\text{RMS}} = \sqrt{\frac{\sum_P m_{cP} [y_{cP} - \bar{y}_c]^2}{m_c}}. \quad (8.6)$$

Posteriormente se define a la desviación estándar relativa del combustible DER_c como el porcentaje del error medio cuadrático en relación a la fracción de masa media,

$$\text{DER}_c = \frac{y_{\text{RMS}}}{\bar{y}_c} \times 100 \%. \quad (8.7)$$

Otro parámetro relevado es la posición del centro de masa del vapor de combustible, \mathbf{r}_c , calculado según:

$$\mathbf{r}_c = \frac{1}{m_c} \sum_{P \in \Omega_C} m_{cP} \mathbf{x}_P, \quad (8.8)$$

donde \mathbf{x}_P es el centroide de la celda P . Una vez definido este valor se calcula el radio equivalente, r_{eq} , de aquella superficie esférica centrada en \mathbf{r}_c que tiene el mismo momento de inercia que la masa de combustible,

$$r_{\text{eq}} = \sqrt{\frac{\sum_P m_{cP} \|\mathbf{x}_P - \mathbf{r}_c\|^2}{m_c}}. \quad (8.9)$$

A partir de los valores de posición del centro de masas y radio equivalente de la masa de vapor se calculan dos distancias de interés con respecto a la posición de la bujía. En un primer lugar se define a d_b como la distancia entre el centro de masas del vapor y la posición de la bujía \mathbf{P}_b ,

$$d_b = \|\mathbf{r}_c - \mathbf{P}_b\|, \quad (8.10)$$

y en segundo lugar se define como d_m a la distancia máxima de la superficie esférica equivalente de la masa de vapor y \mathbf{P}_b ,

$$d_m = d_b + r_{\text{eq}} \quad (8.11)$$

Finalmente se incluyen indicadores que tienen como objetivo cuantificar el combustible cercano a las paredes de la cámara de combustión. Para esto se determina la cantidad total de combustible presente en

celdas adyacentes a las fronteras de la región cilíndrica definida como $m_{c\Gamma}$:

$$m_{c\Gamma} = \sum_{P \in \Gamma_c} m_{cP}, \quad (8.12)$$

donde Γ_c es la frontera de la región Ω_c siendo las celdas $P \in \Gamma_c$ adyacentes a esta frontera. A partir de definir $m_{c\Gamma}$ se computa el porcentaje representado por el vapor cercano a los bordes en relación al total,

$$m_{c\Gamma} [\%] = \frac{m_{c\Gamma}}{m_c} \times 100 \% \quad (8.13)$$

Asimismo, se define la fracción másica de la mezcla de combustible en los bordes:

$$y_{c\Gamma} = \frac{m_{c\Gamma}}{m_{t\Gamma}} \quad (8.14)$$

Es necesario aclarar que la definición de $m_{c\Gamma}$ depende del tamaño de la discretización. No obstante, en el presente análisis se comparará de forma relativa diferentes geometrías de la cabeza del pistón utilizando discretizaciones análogas en tamaño.

8.5.5. Comentarios generales sobre las simulaciones

Se simulan los tres modelos de cavidad definidos previamente donde para cada uno de ellos se utilizan cuatro puntos temporales de comienzo de la inyección: 54, 72, 90 y 108 grados previo al punto muerto interior. El estudio paramétrico define un total de 12 simulaciones. Las mallas utilizadas tienen un tamaño inicial cercano a los 3 millones de celdas y el número máximo de parcelas alcanzado se aproxima a 200000. En cada simulación se efectúan unos 1200 pasos temporales asumiendo convergencia del paso temporal cuando los residuos iniciales de presión y velocidad descienden por debajo de dos órdenes de magnitud. Las simulaciones se resuelven en paralelo distribuyendo el cómputo sobre 40 procesadores. Bajo estas condiciones de simulación, el tiempo total de cómputo es del orden de 18 horas por cada caso.

A partir de las simulaciones realizadas se destaca la importancia de resolver de forma acoplada la transferencia de momento entre la fase líquida y continua según las Ecs. (7.38) y (7.39). En caso de resolver el intercambio de momento de forma desacoplada, se detecta una interacción inestable entre el intercambio de momento y el modelo de atomización de Rayleigh-Taylor. Específicamente, se identifica como caso problemático aquellas parcelas que contienen gran cantidad de partículas y que tienen una elevada velocidad relativa con la fase continua. Estas condiciones generan a su vez un valor elevado de la aceleración computada por medio de la Ec. (7.75). Ya que en el modelo de RT el proceso de atomización se traduce en un incremento del número de partículas, se genera un aumento de la superficie total de intercambio de momento. El ciclo es inestable concluyendo con la divergencia de la ecuación

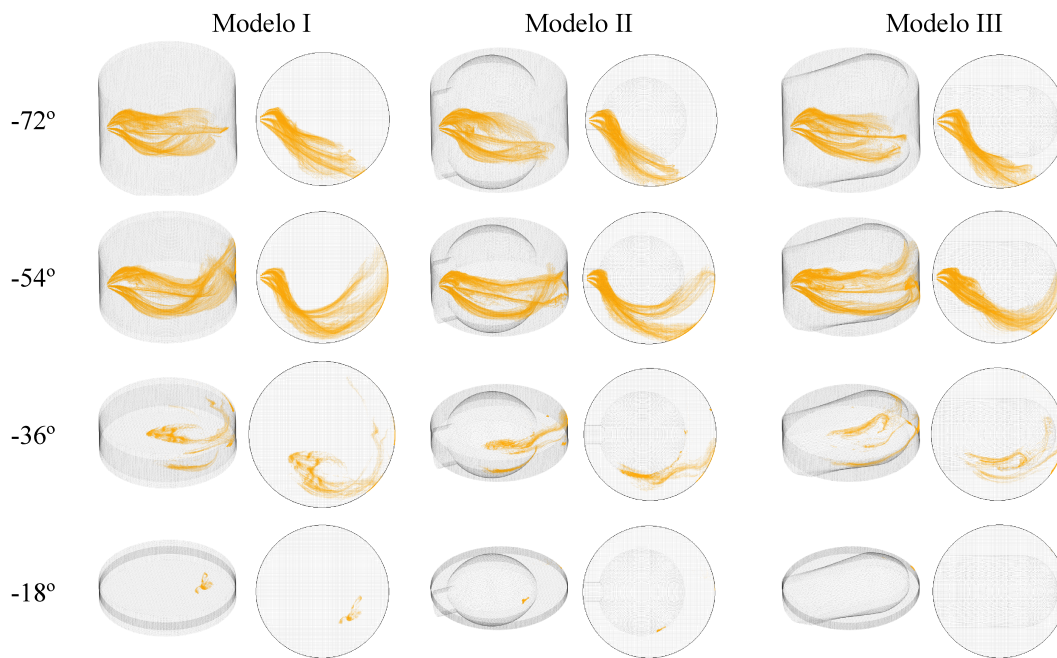


Figura 8.14: Evolución del combustible líquido para los diferentes modelos de cavidad en función del ángulo de giro del cigüeñal. En cada columna se muestra una vista en perspectiva y una vista perpendicular al eje axial del cilindro.

de momento debido a un incremento excesivo del momento transferido entre fases. Contrariamente, el acople propuesto en las Ecs. (7.38) y (7.39) estabiliza el intercambio entre las fases debido al tratamiento implícito de las ecuaciones diferenciales.

8.5.6. Sensibilidad a la geometría de la cabeza del pistón

En un primer análisis se comparan los resultados de los tres modelos de cavidades correspondientes al instante de inyección de 90 grados previos al PMI. El desarrollo del *spray* para cada uno de los modelos geométricos de la cavidad del pistón se presenta en la Fig. 8.14. En esta figura se observa que el movimiento general del *spray* es similar para los tres modelos de cavidad aunque se aprecian mayores diferencias en la parte final de la carrera de compresión previo a su evaporación completa.

En la Fig. 8.15 se presenta la evolución de la cantidad de combustible evaporado m_c y la tasa instantánea de evaporación \dot{m}_c . De los resultados se observa que el perfil temporal de evaporación es similar para los tres modelos de cavidad. La evaporación instantánea crece hasta llegar a un valor máximo que es coincidente con el instante en que finaliza la inyección. Luego disminuye abruptamente hasta por debajo de una tasa de evaporación cercana al 10 % de su valor máximo. Finalmente, el combustible líquido remanente en el cilindro se evapora en un período de tiempo equivalente a 20 grados de cigüeñal.

Seguidamente se presentan en la Fig. 8.16 indicadores para el análisis del grado de mezclado del

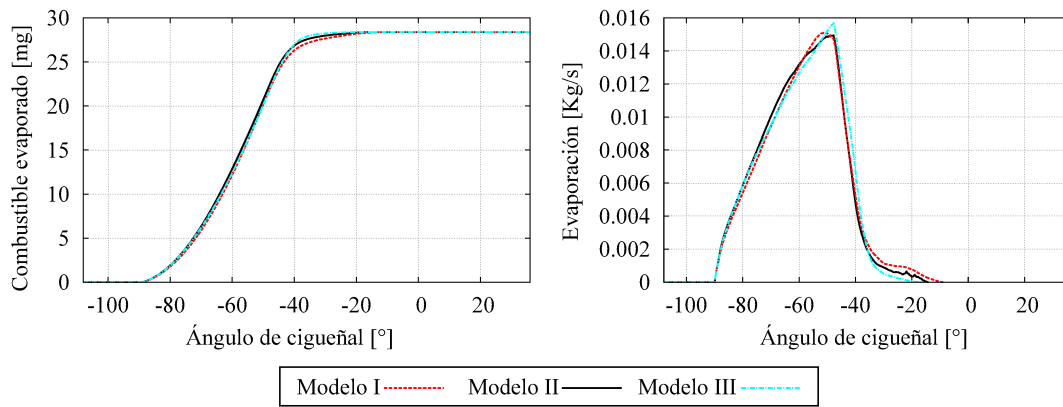


Figura 8.15: Combustible evaporado y tasa de evaporación instantánea para los tres modelos de cavidades comenzando la inyección 90 grados previo al PMI.

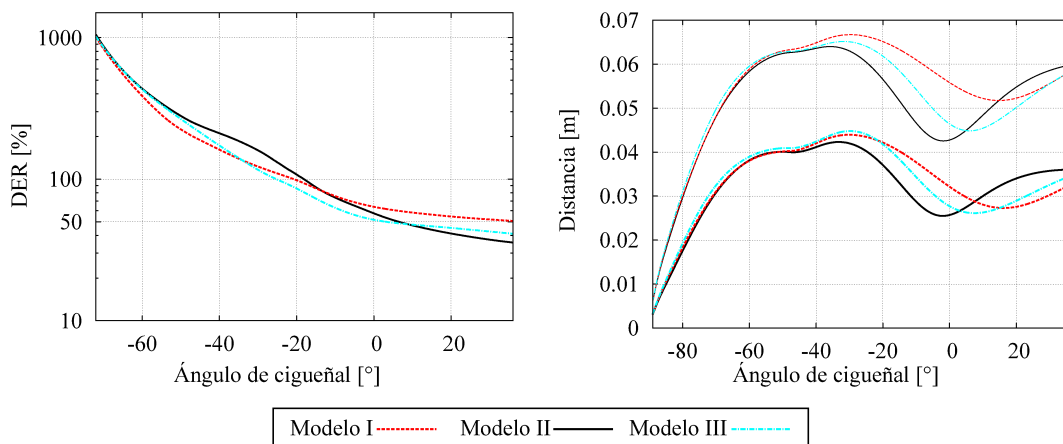


Figura 8.16: Desviación estándar relativa y distancia al punto de ignición de la masa evaporada para los tres modelos de cavidades comenzando la inyección 90 grados previo al PMI.

combustible. A la izquierda se grafica la desviación estándar relativa porcentual DER_c . En estas curvas se aprecian valores cercanos al 75 % previo al punto muerto interior para todas las cavidades, siendo el modelo III el que genera el mínimo valor. Por otro lado, en el sector derecho de la Fig. 8.16, se muestran dos conjuntos de curvas que describen la distancia de la masa de combustible evaporada al punto de ubicación de la bujía. Las curvas de trazo grueso indican la distancia d_b y las curvas de trazo más fino describen la distancia d_m . Se observa en los primeros instantes de la inyección que la masa de vapor se aleja del punto de ignición, como consecuencia de la penetración del *spray* para luego acercarse a partir de los 30 grados previos al punto muerto interior. En este período temporal se observa que en el modelo II la mezcla evaporada se posiciona más cerca que el resto de los modelos.

Por último se estudia la distribución del vapor de combustible en las celdas adyacentes a los bordes del cilindro en la Fig. 8.17. Se aprecia que el porcentaje de vapor m_{c_T} [%] tiene un máximo en el punto muerto interior. De la misma forma sucede para la concentración relativa y_{c_T} la cual es menor a la unidad.

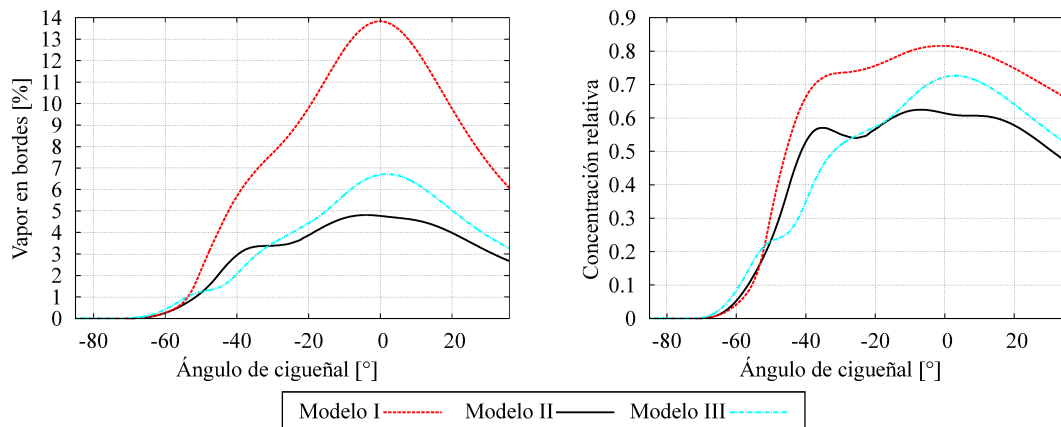


Figura 8.17: Cantidad de combustible evaporado sobre los bordes y su concentración para los tres modelos de cavidades comenzando la inyección 90 grados previo al PMI.

De ambas gráficas mostradas en la Fig. 8.17 se concluye de la presencia de una mayor cantidad de vapor en los bordes para el modelo I.

8.5.7. Sensibilidad al punto de comienzo de la inyección

Se analiza la sensibilidad al punto temporal de comienzo de la inyección. Se simula el modelo de cavidad I con inyecciones que comienzan en -108 , -90 , -72 y 54 grados de cigüeñal previo al PMI. El desarrollo del *spray* líquido para estas simulaciones se presenta en la Fig. 8.18. Aquí se agrupan las capturas de pantalla en forma de tabla donde las columnas indican el instante temporal correspondiente y en las filas se disponen los resultados acordes al tiempo de comienzo de inyección (SOI). Cualitativamente se aprecia mayor penetración de líquido para los casos de inyección temprana. De forma contraria, las simulaciones con inyección tardía muestran una mayor velocidad de evaporación y menor penetración de combustible. La cantidad de combustible evaporado en función del tiempo se analiza cuantitativamente en la Fig. 8.19 mostrando las curvas de m_c y \dot{m}_c . Se observa que los perfiles de evaporación tienen máximos similares aunque se aprecia un mayor crecimiento inicial de la tasa de evaporación para las inyecciones tardías (-72° y -54°). Sin embargo, se obtiene mayor masa de combustible evaporado a mayor anticipo del comienzo de la inyección. La capacidad de mezclado del combustible se estudia a partir de la Fig. 8.20 la cual muestra las curvas de DER_c y las distancias d_b y d_m . El desfase temporal de la inyecciones se traduce en un desfase de las curvas de mezclado sobre el eje de las abscisas. Sin embargo, este desfase se reduce en cierta medida en la fase posterior al punto muerto interior. Con respecto a la posición del vapor de combustible, se aprecia una mayor penetración cuanto más temprano es el punto de comienzo de la inyección. También se observa que cuanto más anticipada es la inyección, menor es la mínima distancia alcanzada por la mezcla para instantes cercanos al punto muerto interior.

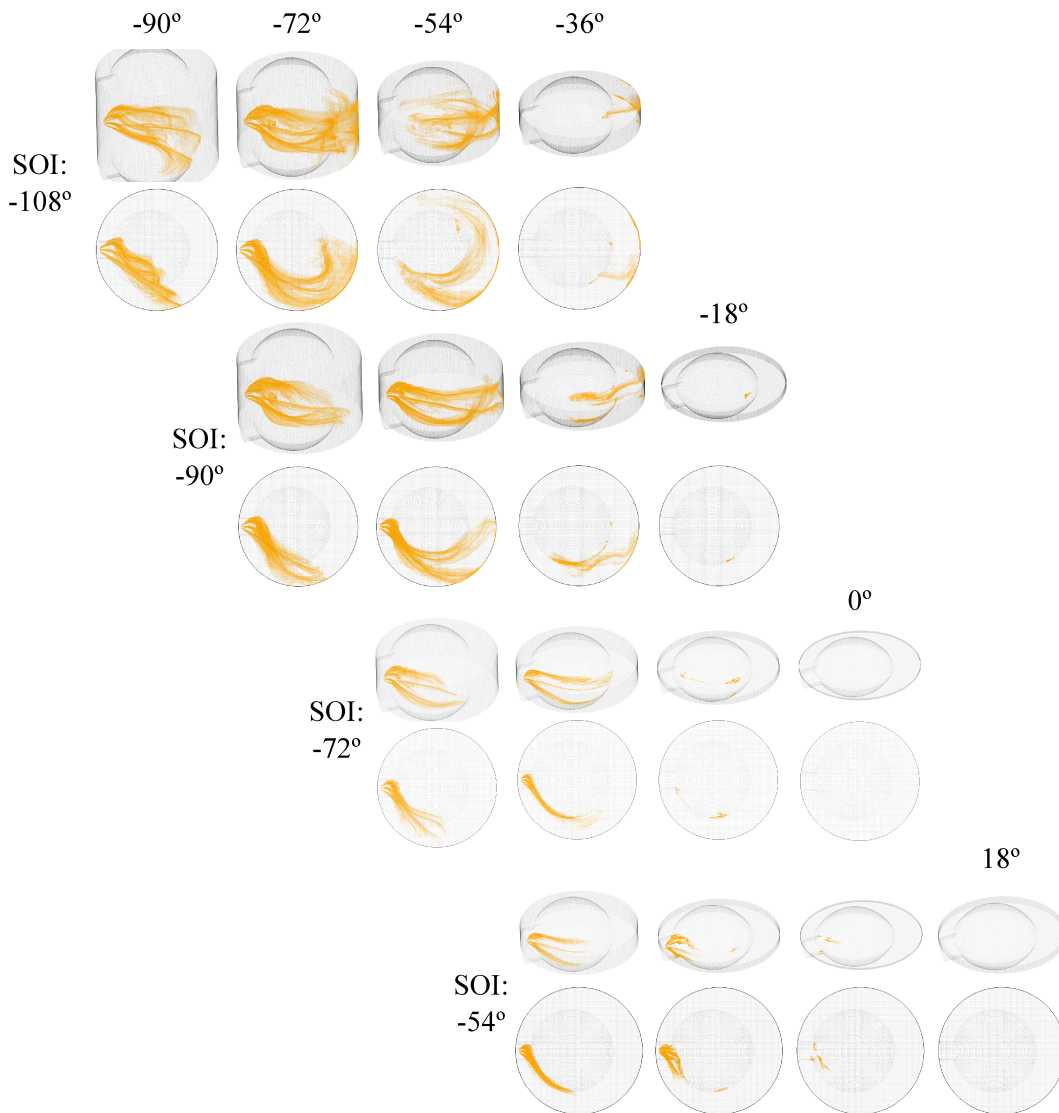


Figura 8.18: Capturas de pantalla del *spray* líquido de combustible. Se muestra la evolución temporal del *spray* líquido para diferentes puntos de comienzo de la inyección.

Finalmente se analiza el vapor próximo a los bordes del cilindro en la Fig. 8.21 mostrando las curvas de las funciones $m_{cT} [\%]$ y y_{cT} . En las gráficas se observa que el caso con la inyección más tardía es el que más cantidad de vapor y mayor concentración acumula en las celdas adyacentes a los bordes de la cámara de combustión.

8.5.8. Evolución temporal del vapor de combustible

El desarrollo temporal de la masa de combustible evaporado se presenta en la Fig. 8.22 por medio de tres cortes normales a los ejes cartesianos que contienen al centro geométrico del cilindro. Las gráficas de contornos representan la relación entre la concentración local del vapor de combustible y la concentración media. Bajo esta definición, la mezcla se considera totalmente mezclada u homogénea cuando se

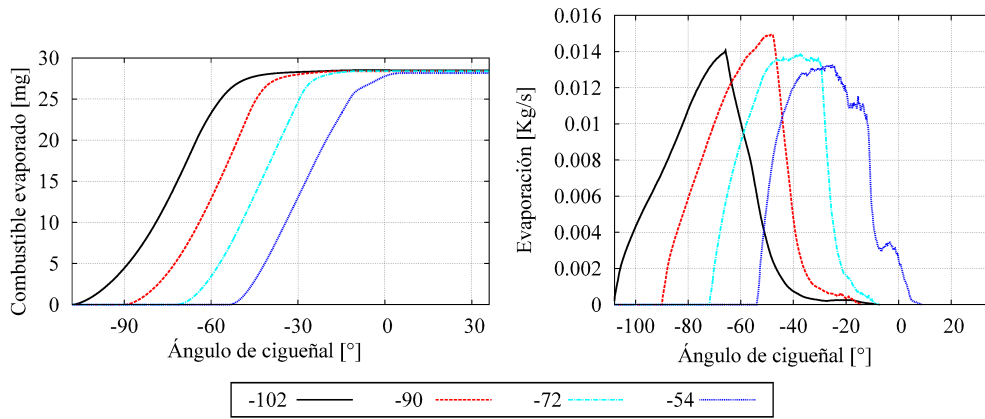


Figura 8.19: Combustible evaporado y tasa de evaporación instantánea para los cuatro puntos temporales de comienzo de la inyección.

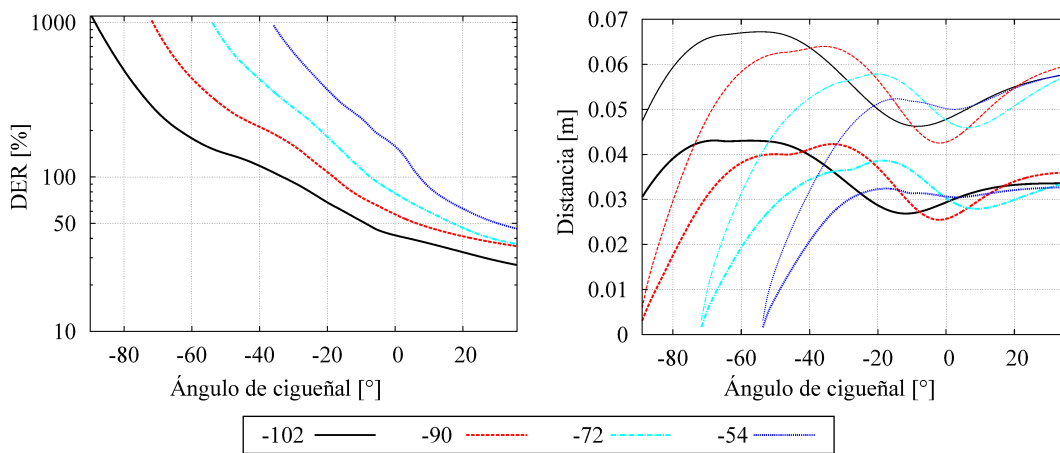


Figura 8.20: Desviación estándar relativa y distancia al punto de ignición de la masa evaporada para los cuatro puntos temporales de comienzo de la inyección.

tiene un valor unitario sobre todo el dominio. Para este caso se utilizan los resultados de la simulación correspondiente al modelo de cavidad II para un tiempo de comienzo de la inyección de 104 grados de cigüeñal previos al punto muerto interior.

Analizando los cortes normales al eje x (primera fila) se infiere un patrón de flujo rotante o *swirl* direccionado en el sentido del semieje x negativo (hacia adentro del papel). A medida que el ciclo se acerca al PMI, el vapor de combustible se ubica cerca de las paredes del cilindro y se desplaza girando alrededor del eje x de acuerdo al patrón de flujo de *swirl* observado. Este movimiento produce que la concentración en el punto de ignición varíe por efectos convectivos en pocos grados de cigüeñal tal cual se aprecia entre los instantes de -54 y -18 grados de cigüeñal. Esta situación se puede observar también en los cortes normales al eje z dispuestos en la parte inferior de la Fig. 8.22. En los instantes cercanos al PMI se observa que la concentración de combustible es simétrica respecto al eje x pero es asimétrica

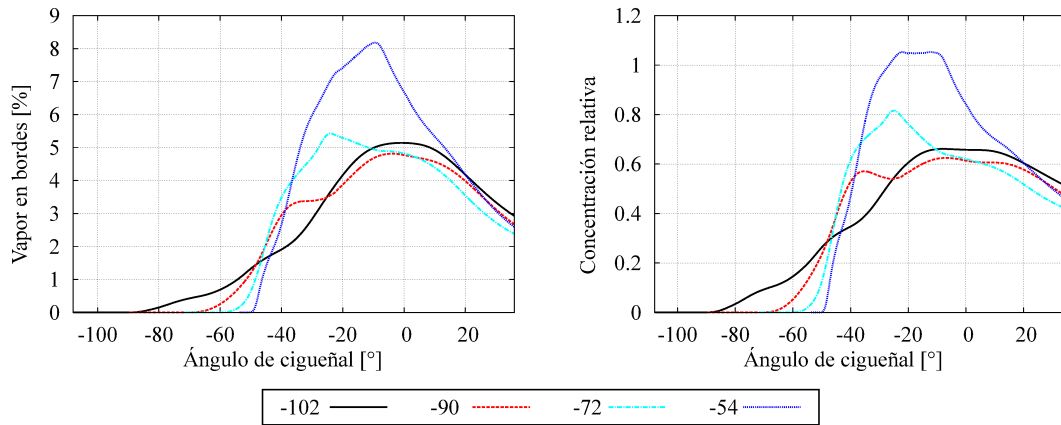


Figura 8.21: Cantidad de combustible evaporado sobre los bordes y su concentración para los cuatro puntos temporales de comienzo de la inyección.

en los ejes restantes. En los mismos instantes temporales se aprecia que la región determinada por las cavidades tiene una concentración de combustible inferior a aquellas zonas externas a la cavidad.

8.5.9. Comentarios finales

En la Fig. 8.23 se presenta la desviación estándar relativa DER_c incluyendo todas las simulaciones realizadas en este estudio. Se evalúan tres instantes temporales correspondientes a -18, 0 y 18 grados de ángulo de cigüeñal. Para los tres modelos de cavidad, las curvas expresan la DER_c en función del ángulo de comienzo de inyección representado por el eje de abscisas. De esta gráfica se desprenden los siguientes conceptos generales del estudio realizado:

- El mezclado del combustible en los instantes cercanos al PMI es fuertemente dependiente del avance temporal del punto de inyección.
- La forma geométrica de la cabeza de pistón afecta al proceso de mezclado de combustible pero su influencia es relativamente menor a los grados de avance de la inyección.
- En el punto muerto interior la sensibilidad del mezclado en función del modelo de cavidad de pistón es mínima en comparación con los otros puntos temporales.

Si bien el mezclado resultante para todos los modelos de cavidad es de un orden similar, se concluye que el modelo de cavidad II genera condiciones favorables en lo que respecta a una futura combustión de la mezcla. Esto se fundamenta por:

- Menor cantidad relativa de vapor de combustible en la proximidades de los bordes.
- Mayor cercanía relativa del combustible evaporado al punto de ignición.

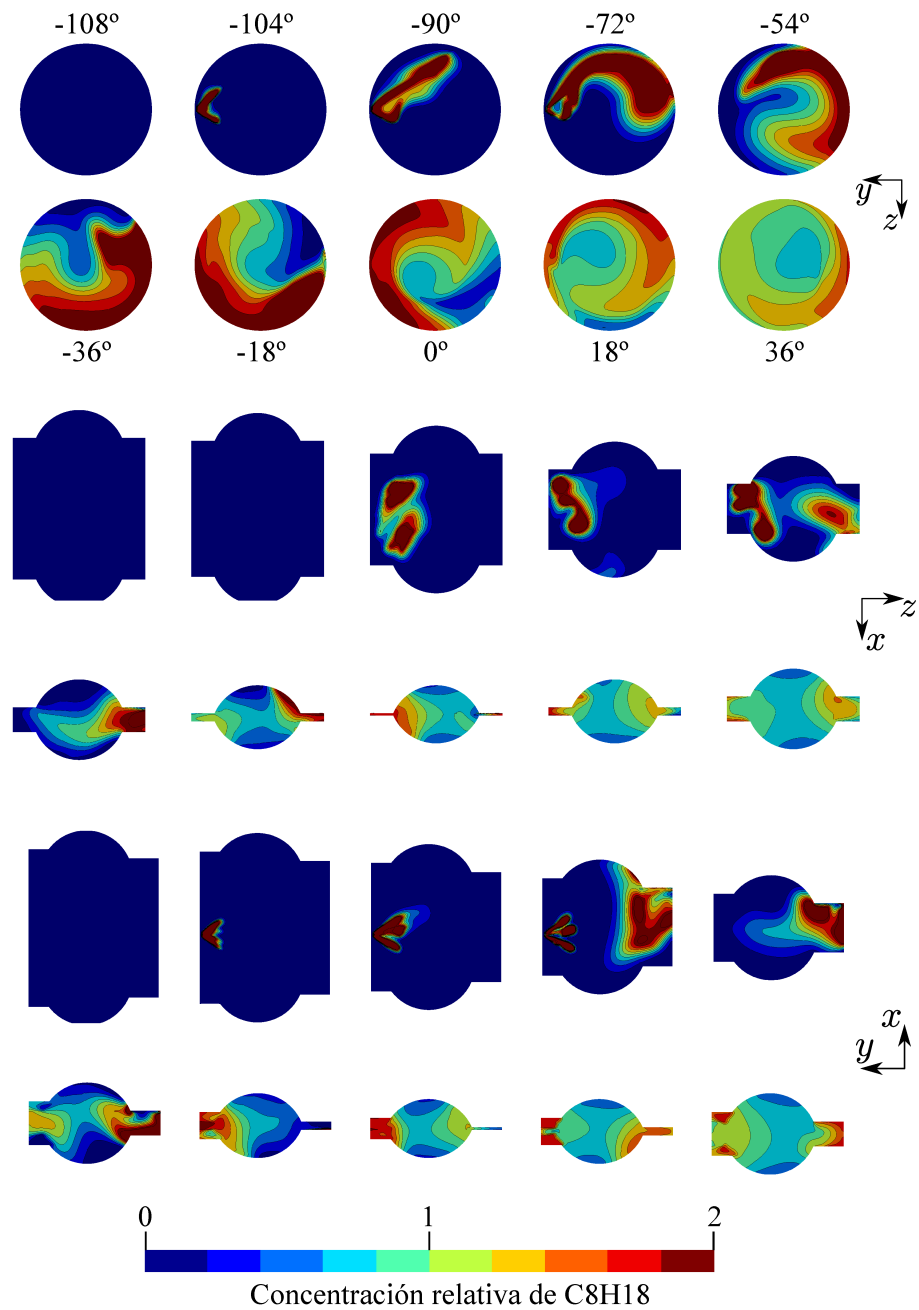
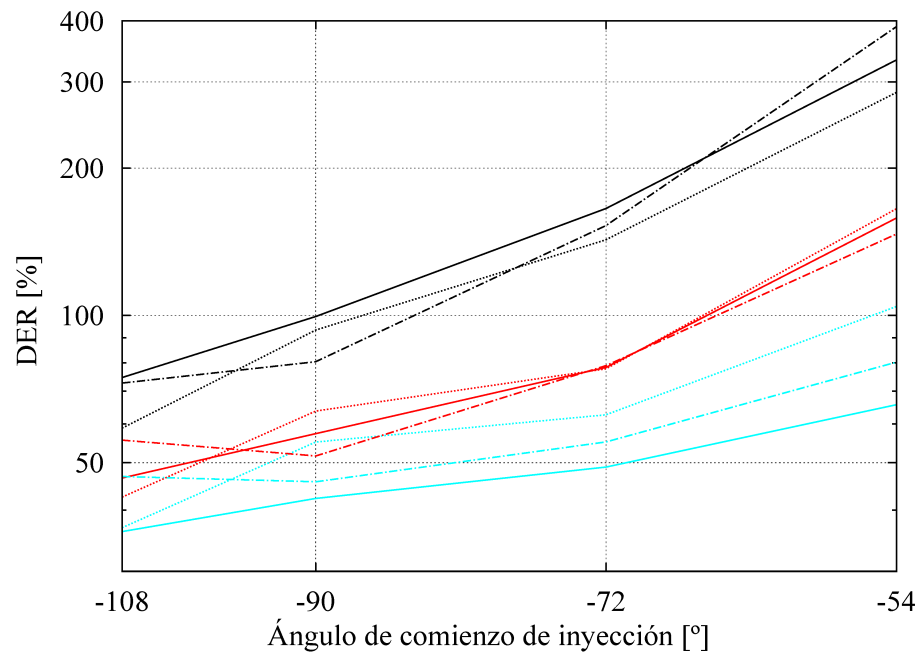


Figura 8.22: Evolución temporal de la concentración relativa de combustible dispuestas sobre cortes normales a los ejes cartesianos y coincidentes con el centro geométrico del cilindro.

Por último se concluye que la inyección más temprana definida 108 grados previos al punto muerto interior es la más propicia a los efectos de conseguir un mejor mezclado.



$t = -18^\circ$	$t = 0^\circ$	$t = 18^\circ$
Modelo I (black dotted)	Modelo I (red dotted)	Modelo I (cyan dotted)
Modelo II ——— (black solid)	Modelo II ——— (red solid)	Modelo II ——— (cyan solid)
Modelo III - - - - (black dashed)	Modelo III - - - - (red dashed)	Modelo III - - - - (cyan dashed)

Figura 8.23: Desviación estándar relativa evaluada para diferentes instantes del ciclo del motor en función del punto temporal de inyección y del modelo de cavidad.

Capítulo 9

Conclusiones

9.1. Resumen de la tesis

En este trabajo se presentaron técnicas numéricas para el modelado computacional de los motores de combustión interna, en particular, para la simulación de motores de dos tiempos en donde se combinan los problemas de grandes deformaciones de dominios y acople variable entre el cilindro y los puertos del motor. Los desarrollos numéricos se basaron en el método de los volúmenes finitos utilizando una formulación Euleriana-Lagrangiana-Arbitraria para resolver las ecuaciones de gobierno dentro de un marco de referencia relativo a las partes móviles del motor. Por su lado, la inyección de combustible se resuelve por medio de un enfoque Lagrangiano basado en partículas.

Se investiga en profundidad el problema de acople entre subdominios mediante interfaces de malla no conformes. Aquí, se desarrolla una teoría general que define las relaciones necesarias entre los coeficientes del sistema de ecuaciones y los coeficientes de interpolación para asegurar la conservación local y global de flujos a través de interfaces no conformes en forma acotada. Las expresiones propuestas se aplican por medio de un método basado en proyecciones de coeficientes y se validan con ejemplos numéricos. Una estrategia efectiva y simple para resolver el acople numérico entre las interfaces es su reemplazo por una supermalla que asegure un acople uno-a-uno entre las celdas adyacentes a la interfaz. En este trabajo se presentó un método optimizado que utiliza pseudo-supermallas con el objetivo de aumentar la eficiencia computacional del método sin perder las propiedades de conservación y precisión. La estrategia se diseñó para trabajar con interfaces con solapamiento parcial de forma de resolver la interacción variables entre los puertos y el cilindro del motor de pistones opuestos. La técnica se valida por medio de varios ejemplos numéricos obteniendo muy buenos resultados.

En referencia a las grandes deformaciones volumétricas del cilindro se presentan avances sobre la técnica de *layering*. Se desarrolla una estrategia de mapeo de campos al momento de realizar cambios

topológicos para asegurar segundo orden de precisión temporal utilizando los esquemas de discretización de diferencias descentradas hacia atrás de segundo orden y Crank-Nicolson. La estrategia de adición y remoción de celdas se combina con un método de deformación de malla que permite abordar deformaciones extremas de dominio manteniendo la calidad y refinamiento adecuado para cada estado de la malla a lo largo de su evolución temporal.

En un *solver* compresible basado en presión y que utiliza un algoritmo segregado es posible que se generen oscilaciones en el campo de velocidades. Con el objetivo de eliminar estos errores, se propuso una estrategia de definición de la velocidad a partir de una reconstrucción de los flujos localizados en las caras. A partir de este enfoque, se determina la velocidad en centro de celdas sin oscilaciones espurias. Los beneficios del nuevo *solver* se demuestran eliminando las oscilaciones de velocidad en problemas donde estas subyacen de forma espúrea cuando se utiliza el *solver* de flujo con su formulación estándar.

La inyección de combustible se simula por medio de un modelo Lagrangiano que utiliza partículas para representar la fase líquida de combustible. Para resolver el intercambio de masa, momento y energía entre las cantidades localizadas en la partícula y aquellas presentes en la malla se debe conocer continuamente la posición relativa de las partículas dentro la malla. Con este fin, se utilizó un algoritmo de seguimiento basado en coordenadas baricéntricas. Dentro de este contexto, se implementan algoritmos específicos que resuelven las situaciones de adición y remoción de celdas que se suceden en la técnica de *layering*. Además, se habilitó el cruce de partículas a través de interfaces no conformes con sectores acoplados y no acoplados explicando la metodología utilizada cuando las interfaces separan subdominios localizados en múltiples procesadores.

El proceso de atomización del combustible se estudia implementando un modelo híbrido que agrupa los métodos fenomenológicos de Huh-Gosman, Kelvin-Helmholtz y Rayleigh-Taylor con el fin de poder predecir separadamente los procesos de atomización primaria y secundaria. El modelo implementado se ajustó y validó simulando la inyección de combustible por medio de un inyector multiorificio que es explorado exhaustivamente en varios trabajos experimentales reportados en la bibliografía. Se propuso una parametrización del modelo híbrido en tres parámetros importantes que regulan el comportamiento de cada uno de los métodos fenomenológicos utilizados. A partir de esta parametrización, se simuló el proceso de inyección para tres condiciones de ambiente de la cámara de inyección. Del análisis de los resultados, se definió la configuración que más se ajustó a los resultados experimentales.

Finalmente, se aplicaron las herramientas computacionales desarrolladas en la simulación del motor de pistones opuestos de desarrollo regional denominado JLA. En una primera parte se explicó el uso de las técnicas de *layering* con deformación de malla y las técnicas de pseudo-supermalla para resolver la cinemática del motor. Se realizó un estudio de escalabilidad obteniendo una muy buena eficiencia. Con el fin de probar la robustez de las estrategias computacionales y sus propiedades de convergencia

se realizaron simulaciones fluidodinámicas utilizando tres resoluciones de malla. En estos problemas se obtuvo convergencia en malla y se resaltan las propiedades de estabilidad numérica y convergencia del *solver*. Seguidamente se resuelve la inyección directa de gasolina dentro del motor JLA usando el mismo inyector analizado en la sección correspondiente al modelado de la atomización. En estas simulaciones se analizó la forma de la cabeza de pistón y la sensibilidad al punto temporal de comienzo de la inyección sobre el mezclado, en vistas de definir la mejor configuración en función de la calidad del mezclado del combustible inyectado.

9.2. Contribuciones realizadas

9.2.1. Objetivo general

Como resultado de esta tesis se desarrolló un conjunto de herramientas computacionales para la simulación fluidodinámica de un motor de pistones opuestos. Sus capacidades abarcan la simulación de flujo compresible e inyección de combustible considerando todos los volúmenes de interés del motor en todas sus etapas de funcionamiento. Se destaca de los desarrollos realizados su eficiencia computacional permitiendo realizar simulaciones de gran tamaño computacional en tiempos de cómputo del orden de un día. Además, las herramientas disponen de una muy buena escalabilidad para el cómputo paralelizado permitiendo reducir los tiempos de simulación ante un incremento de los recursos computacionales. Otro aspecto positivo de los nuevos desarrollos es su estabilidad numérica y robustez general por la cual se aumenta de forma significativa la efectividad de las simulaciones evitando inestabilidades y errores varios que anulen las simulaciones. Finalmente, se resalta la exactitud numérica de las estrategias utilizadas donde se realizaron múltiples validaciones con resultados de referencia numéricos y experimentales.

9.2.2. Contribuciones en el área de interfaces no conformes

Una parte importante de esta tesis es el estudio del acople numérico entre interfaces no conformes. En primer lugar se describió una formalización teórica del acople numérico entre interfaces no conformes que asegura conservación local y global. A partir de este desarrollo se diseñó un método basado en proyección de coeficientes por el cual se verifican las propiedades de conservación. Si bien esta estrategia cumple con los requisitos buscados, su implementación requiere actualizar los pesos de interpolación en todos los pasos temporales de la simulación lo cual exige un amplio rediseño del código computacional utilizado. Bajo este marco se creó la técnica de pseudo-supermalla la cual incluye la funcionalidad de acoplar interfaces con solapamiento parcial. Su diseño se basa en crear un acople uno-a-uno entre las interfaces mediante la unión virtual de las interfaces originales definiendo lo que se denomina como supermalla. La estrategia es conservativa, eficiente computacionalmente, de segundo orden de exactitud

y paralelizable con alta escalabilidad.

9.2.3. Contribuciones en el área de mallas dinámicas

En esta tesis se realizó un estudio de la técnica de *layering* para resolver las grandes deformaciones presentes en el cilindro del motor de pistones opuestos. Se trabajó en dos áreas: la resolución del enfoque ALE en un contexto de mallas dinámicas con cambios topológicos, y en segundo lugar, se analizó la gestión de la resolución de malla para grandes cambios volumétricos del cilindro. En este contexto, se desarrolló un algoritmo de actualización de la malla junto con las ecuaciones de transformación respectivas para resolver la técnica de *layering* con esquemas de integración temporal de segundo orden. Por otro lado, se definió un algoritmo que combina la técnica de deformación de malla con *layering* apto para resolver grandes deformaciones volumétricas definiendo de forma versátil el tamaño de celda a lo largo del tiempo de simulación.

9.2.4. Contribuciones relacionadas al modelado computacional de la inyección de combustible

La inyección de combustible se modeló con un enfoque Lagrangiano basado en partículas. Se trabajó en tres áreas:

- Seguimiento de partículas en mallas dinámicas
- Acople numérico entre las fases líquida y gaseosa
- Atomización de combustible

En un primer lugar se diseñó e implementó un código de seguimiento de partículas basado en posicionarlas por medio de coordenadas baricéntricas de una descomposición tetraédrica de la malla. El algoritmo contempla las situaciones de cambio topológico y cruce de partículas a través de las interfaces de pseudo-supermalla y funciona en paralelo con buenas propiedades de escalabilidad.

Con respecto al acople entre fases se implementó un algoritmo que resuelve de forma acoplada los intercambios de masa y energía entre las parcelas del modelo Lagrangiano y los valores de la fase continua en las celdas de la malla mediante el uso de una simplificación de las ecuaciones diferenciales de la fase continua.

Por último, se implementó un modelo de atomización híbrido que combina los modelos fenomenológicos de Huh-Gosman, Kelvin-Helmholtz y Rayleigh-Taylor. Los parámetros de control del modelo se ajustaron de acuerdo a resultados experimentales realizados sobre el *Spray G*. La evolución global del

spray y el desarrollo de la masa evaporada se simularon a través del modelo computacional con un muy buen grado de exactitud.

9.2.5. Contribuciones relacionadas a la estabilidad numérica

Se diseñó un nuevo *solver* de flujo que elimina las oscilaciones de velocidad que aparecen en ciertos problemas resueltos con el algoritmo de acople velocidad-presión SIMPLE-PISO. El nuevo método define la velocidad por medio de la reconstrucción de los flujos localizados en las caras a través de un nuevo operador de reconstrucción. La nueva formulación demostró no afectar la exactitud del acople velocidad-presión como también se verificaron sus propiedades anti-oscilatorias en la resolución de un par de problemas de flujo compresible.

Por otro lado, se concluyó la importancia de realizar un acople numérico conservativo entre interfaces no conformes con el fin de asegurar convergencia y estabilidad del *solver* de flujo. Se analizaron los inconvenientes de usar una formulación no conservativa sobre los sistemas de ecuaciones lineales. Principalmente, se enfatizó sobre la generación de flujos convectivos espurios y sobre el cálculo incorrecto de la matriz transpuesta debido a una proyección deficiente de los coeficientes ensamblados en la interfaz. Estos problemas fueron reproducidos en la simulación del motor de pistones opuestos por medio de un método de interfaces basado en interpolaciones no conservativas.

En referencia al acople entre fases en el modelo de inyección se destacó la importancia de resolver el intercambio de momento de forma acoplada entre las fases debido a problemas de estabilidad motivados por la transferencia de fuerza entre las fases y los modelos de atomización. Por otra parte, se destaca la importancia del uso de coordenadas baricéntricas para determinar la posición de las partículas en la malla. En primera instancia, se trabajó con coordenadas globales en el algoritmo de seguimiento de las partículas, en donde se apreciaron de forma frecuente inconvenientes asociados con el extravío de partículas en celdas de mala calidad. La adopción de coordenadas baricéntricas resolvió estos inconvenientes aumentando la robustez del algoritmo de seguimiento.

9.2.6. Contribuciones relacionadas al cómputo en paralelo

En esta tesis se hizo énfasis en la capacidad de cómputo en paralelo de las herramientas computacionales desarrolladas. En este sentido, se realizaron aportes sobre la estrategia de pseudo-supermalla, la técnica de *layering* y sobre el algoritmo de seguimiento de partículas.

La estrategia de pseudo-supermallas se implementó para cómputo en paralelo sin necesidad de imponer restricciones geométricas en el proceso de descomposición de dominios. La implementación demostró tener una excelente escalabilidad. Por otra parte, la construcción en paralelo de estas interfaces no in-

crementa de forma significativa los tiempos de cómputo en comparación con una simulación en modo serial.

La técnica de *layering* se paralelizó por medio del uso de una estrategia de comunicadores de MPI que permite independizar cada zona de movimiento y en consecuencia, se aumenta la versatilidad al momento de descomponer los dominios.

Se implementó el algoritmo de seguimiento de partículas coexistiendo en modo de cómputo en paralelo con las técnicas de *layering* y pseudo-supermalla. Con respecto a las interfaces de pseudo-supermalla, se habilitó la posibilidad de cambiar de procesador para una partícula atraviesa una interfaz. De esta forma, el algoritmo de seguimiento de partículas no impone ninguna restricción adicional en el proceso de descomposición de dominios.

Se desarrolló una herramienta de preproceso automática para descomponer dominios especialmente diseñado para trabajar con múltiples zonas de movimiento de *layering*. Esta herramienta se utilizó para facilitar un estudio de escalabilidad de las estrategias de malla dinámica sobre el motor de pistones opuestos. En esta prueba se demostró una muy buena escalabilidad del cómputo en paralelo realizando simulaciones distribuidas en hasta 256 procesadores.

Finalmente, se simuló la inyección de combustible dentro del motor de pistones opuestos por medio de una simulación distribuida sobre 40 procesadores obteniéndose tiempos de cómputo reducidos de acuerdo al tamaño computacional del problema.

9.2.7. Contribuciones relacionadas al motor de pistones opuestos JLA

Se realizaron múltiples simulaciones fluidodinámicas del motor de pistones opuestos JLA. Se estudió la influencia de la configuración temporal de la inyección y de la geometría de la cabeza de los pistones sobre el mezclado del combustible inyectado. Para esto, se analizaron múltiples indicadores cuantitativos para decidir sobre la calidad del mezclado. En vistas de los resultados obtenidos se determinó, dentro de las variantes estudiadas, la forma de la cabeza de pistón y el instante temporal de comienzo de la inyección con los que se obtienen las mejores condiciones de la mezcla, en función de su homogeneidad, su posición dentro de la cámara de combustión y su concentración cercana a las paredes.

Bibliografía

- [1] R. D. Reitz, Directions in internal combustion engine research, *Combustion and Flame* 1 (160) (2013) 1–8.
- [2] Y. Shi, H.-W. Ge, R. D. Reitz, *Computational optimization of internal combustion engines*, Springer Science and Business Media, 2011.
- [3] R. Reitz, C. Rutland, Development and testing of diesel engine CFD models, *Progress in Energy and Combustion Science* 21 (2) (1995) 173–196.
- [4] D. Torres, M. Trujillo, KIVA-4: An unstructured ALE code for compressible gas flow with sprays, *Journal of Computational Physics* 219 (2) (2006) 943–975.
- [5] G. Bella, F. Bozza, A. De Maio, F. Del Citto, S. Filippone, An enhanced parallel version of Kiva-3V, coupled with a 1D CFD code, and its use in general purpose engine applications, in: *International Conference on High Performance Computing and Communications*, Springer, 2006, pp. 11–20.
- [6] D. J. Torres, Y. H. Li, S.-C. Kong, Partitioning strategies for parallel KIVA-4 engine simulations, *Computers & Fluids* 39 (2) (2010) 301–309.
- [7] A. Velghe, N. Gillet, J. Bohbot, A high efficiency parallel unstructured solver dedicated to internal combustion engine simulation, *Computers & Fluids* 45 (1) (2011) 116–121.
- [8] H. Weller, G. Tabor, H. Jasak, C. Fureby, A tensorial approach to computational continuum mechanics using object oriented techniques, *Computers in Physics* 12 (6) (1998) 620 – 631.
- [9] H. Jasak, H. G. Weller, N. Nordin, n-cylinder CFD simulation using a C++ object-oriented toolkit, Tech. rep., SAE Technical Paper (2004).
- [10] T. Lucchini, G. D’Errico, H. Jasak, Z. Tukovic, Automatic mesh motion with topological changes for engine simulation, Tech. rep., SAE Technical Paper (2007).
- [11] F. Piscaglia, A. Montorfano, A. Onorati, A moving mesh strategy to perform adaptive Large Eddy Simulation of IC engines in OpenFOAM, in: *International Multidimensional Engine Modeling User’s Group Meeting, The Detroit Downtown Courtyard by Marriott Hotel, Detroit, MI (USA)*, 2014.
- [12] F. Piscaglia, A. Montorfano, A. Onorati, S. Aithal, A Compressible Dynamic Solver for the Simulation of Turbulent Flows in IC Engine Geometries, in: *International Multidimensional Engine Modeling User’s Group Meeting, The Detroit Downtown Courtyard by Marriott Hotel, Detroit, MI (USA)*, 2015.
- [13] J.-P. Pirault, M. Flint, *Opposed piston engines: evolution, use, and future applications*, SAE international, 2010.
- [14] Achates Power, <http://achatespower.com> (2017).
- [15] F. Redon, *Exploring the Next Frontier in Efficiency with the Opposed-Piston Engine*, SIA Powertrain, Rouen, France.

- [16] S. Naik, D. Johnson, L. Fromm, J. Koszewnik, F. Redon, G. Regner, N. Abani, Achieving Bharat Stage VI Emissions Regulations While Improving Fuel Economy with the Opposed-Piston Engine, *SAE International Journal of Engines* 10 (2017-26-0056) (2017) 17–26.
- [17] FairDiesel, <http://www.fairdiesel.co.uk> (2017).
- [18] Pinnacle Engines, <http://www.pinnacle-engines.com> (2017).
- [19] J. Alonso, Monoblock valveless opposing piston internal combustion engine, wO Patent App. PCT/US2008/082,563 (Jul. 23 2009).
- [20] H. Jasak, Z. Tuković, Automatic mesh motion for the unstructured Finite Volume Method, *Transactions of FAMENA* 30 (2) (2007) 1–18.
- [21] F. Piscaglia, A. Montorfano, A. Onorati, Development of fully-automatic parallel algorithms for mesh handling in the OpenFOAM®-2.2.x technology, Tech. rep., SAE Technical Paper (2013).
- [22] W. Gropp, E. Lusk, N. Doss, A. Skjellum, A high-performance, portable implementation of the MPI message passing interface standard, *Parallel computing* 22 (6) (1996) 789–828.
- [23] C. Hirt, A. Amsden, J. Cook, An arbitrary-Lagrangian-Eulerian computing method for all flow speeds, *Journal of Computational Physics* 135 (1997) 203–216.
- [24] R. Löhner, C. Yang, Improved ALE mesh velocities for moving bodies, *Communications in Numerical Methods in Engineering* 12 (10) (1998) 599–608.
- [25] R. I. Issa, Solution of implicitly discretized fluid flow equations by operator-splitting, *Journal of Computational Physics* 62 (1986) 40–65.
- [26] P. Farrell, M. Piggott, C. Pain, G. Gorman, C. Wilson, Conservative interpolation between unstructured meshes via supermesh construction, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 198 (2009) 2632–2642.
- [27] J. K. Dukowicz, A particle-fluid numerical model for liquid sprays, *Journal of computational physics* 35 (2) (1980) 229–253.
- [28] Z.-H. Li, B.-Q. He, H. Zhao, Application of a hybrid breakup model for the spray simulation of a multi-hole injector used for a DISI gasoline engine, *Applied Thermal Engineering* 65 (1) (2014) 282–292.
- [29] I. Demirdžić, M. Perić, Space conservation law in Finite Volume calculations of fluid flow, *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 8 (9) (1988) 1037–1050.
- [30] S. Patankar, *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*, Hemisphere Publishing Company, 1980.
- [31] I. Gatin, V. Vukčević, H. Jasak, H. Rusche, Enhanced coupling of solid body motion and fluid flow in finite volume framework, *Ocean engineering* 143 (2017) 295–304.
- [32] H. Jasak, Error analysis and estimation in the finite volume method with applications to fluid flows, Ph.D. thesis, Imperial College, University of London (1996).
- [33] N. Qin, G. Carnie, A. LeMoigne, X. Liu, S. Shahpar, Buffer layer method for linking two non-matching multi-block structured grids, in: 47th AIAA Aerospace Sciences Meeting Including the New Horizons Forum and Aerospace Exposition, Orlando, FL, January, 2009, pp. 5–8.
- [34] Y. Wang, N. Qin, G. Carnie, S. Shahpar, Zipper layer method for linking two dissimilar structured meshes, *Journal of Computational Physics* 255 (2013) 130–148.

-
- [35] Z. Wang, N. Hariharan, R. Chen, Recent development on the conservation property of chimera, *International Journal of Computational Fluid Dynamics* 15 (4) (2001) 265–278.
- [36] M. Berger, On conservation at grid interfaces, *SIAM Journal on Numerical Analysis* 24 (5) (1987) 967–984.
- [37] M. M. Rai, A relaxation approach to patched-grid calculations with the euler equations, *Journal of Computational Physics* 66 (1) (1986) 99–131.
- [38] M. M. Rai, Navier-stokes simulations of rotor/stator interaction using patched and overlaid grids, *Journal of Propulsion and Power* 3 (5) (1987) 387–396.
- [39] A. Lerat, Z. Wu, Stable conservative multidomain treatments for implicit euler solvers, *Journal of computational physics* 123 (1) (1996) 45–64.
- [40] Y. Zhang, H. Chen, S. Fu, Improvement to patched grid technique with high-order conservative remapping method, *Journal of Aircraft* 48 (3) (2011) 884–893.
- [41] S. Mathur, Unsteady flow simulations using unstructured sliding meshes, in: *Fluid Dynamics Conference*, 1994, p. 2333.
- [42] C. Y. Loh, W. M. To, A. Himansu, A Conservative Treatment of Sliding Interface for Upwind Finite Volume Methods, in: *47th AIAA Aerospace Sciences Meeting including The New Horizons Forum and Aerospace Exposition*, 2009, p. 861.
- [43] L. Ramírez, C. Foulquié, X. Nogueira, S. Khelladi, C. J. I. Colominas, New high-resolution-preserving sliding mesh techniques for higher-order finite volume schemes, *Journal of Computers and Fluids* 118 (2015) 114–130.
- [44] J. McNaughton, I. Afgan, D. Apsley, S. Rolfo, T. Stallard, P. Stansby, A simple sliding-mesh interface procedure and its application to the cfd simulation of a tidal-stream turbine, *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 74 (4) (2014) 250–269.
- [45] M. Beaudoin, H. Jasak, Development of a generalized grid interface for turbomachinery simulations with OpenFOAM, in: *Open source CFD International conference*, Berlin, 2008.
- [46] R. Steijl, G. Barakos, Sliding mesh algorithm for cfd analysis of helicopter rotor–fuselage aerodynamics, *International journal for numerical methods in fluids* 58 (5) (2008) 527–549.
- [47] H. A. Van der Vorst, Iterative solution methods for certain sparse linear systems with a non-symmetric matrix arising from PDE-problems, *Journal of computational physics* 44 (1) (1981) 1–19.
- [48] P. Farrell, J. Maddison, Conservative interpolation between volume meshes by local Galerkin projection, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 200 (2011) 89–100.
- [49] P. E. Farrell, The addition of fields on different meshes, *Journal of Computational Physics* 230 (9) (2011) 3265–3269.
- [50] J. Maddison, P. Farrell, Directional integration on unstructured meshes via supermesh construction, *Journal of Computational Physics* 231 (12) (2012) 4422–4432.
- [51] S. Menon, D. Schmidt, Conservative interpolation on unstructured polyhedral meshes: An extension of the supermesh approach to cell-centered finite-volume variables, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 200 (41) (2011) 2797–2804.
- [52] S. Menon, K. G. Mooney, K. Stapf, D. P. Schmidt, Parallel adaptive simplicial re-meshing for deforming domain CFD computations, *Journal of Computational Physics* 298 (2015) 62–78.
- [53] D. H. Eberly, *3D game engine design: a practical approach to real-time computer graphics*, CRC Press, 2006.

- [54] G. Wang, F. Duchaine, D. Papadogiannis, I. Duran, S. Moreau, L. Gicquel, An overset grid method for large eddy simulation of turbomachinery stages, *Journal of Computational Physics* 274 (2014) 333–355.
- [55] G. Taylor, A. Green, Mechanism of the production of small eddies from large ones, *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences* 158 (895) (1937) 499–521.
- [56] Z. Wang, K. Fidkowski, R. Abgrall, F. Bassi, D. Caraeni, A. Cary, H. Deconinck, R. Hartmann, K. Hillewaert, H. Huynh, et al., High-order CFD methods: current status and perspective, *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 72 (8) (2013) 811–845.
- [57] ACMI source code, <https://github.com/OpenFOAM/OpenFOAM-dev/tree/master/src/finiteVolume/fields/fvPatchFields/constraint/cyclicACMI> (2016).
- [58] B. Armaly, F. Durst, J. Pereira, B. Schönung, Experimental and theoretical investigation of backward-facing step flow, *Journal of Fluid Mechanics* 127 (1983) 473–496.
- [59] T. Chiang, T. Sheu, A numerical revisit of backward-facing step flow problem, *Physics of Fluids* 11 (4) (1999) 862–874.
- [60] S. Márquez Damián, N. Nigro, Comparison of single phase laminar and Large Eddy Simulation (LES) solvers using the OpenFOAM® suite, in: *Mecánica Computacional Vol XXIX*, 2010, pp. 269 – 289.
- [61] W. Shyy, A study of finite difference approximations to steady-state, convection-dominated flow problems, *Journal of Computational Physics* 57 (3) (1985) 415–438.
- [62] T. J. Barth, D. C. Jespersen, The design and application of upwind schemes on unstructured meshes, in: *27th AIAA Aerospace Sciences Meeting*, Nevada, January, 1989.
- [63] A. Vissers, Port size, geometry and layout design in a Two-Stroke JaqEngine, Master's thesis, Eindhoven University of Technology, Eindhoven, the Netherlands (2007).
- [64] M. Johnsson, Stratified scavenging computations in two-stroke engines using OpenFOAM, Master's thesis, Chalmers University of Technology, Goteborg, Sweden (2010).
- [65] S. Gundmalm, CFD modeling of a four stroke S.I. engine for motorcycle application , Master's thesis, KTH Industrial Engineering and Management, Stockholm, Sweden (2009).
- [66] Y.-d. Huang, G. Wei, K. Chang-Nyung, numerical study of the train-induced unsteady airflow in a subway tunnel with natural ventilation ducts using the dynamic layering method, *Journal of hydrodynamics, Ser. B* 22 (2) (2010) 164–172.
- [67] H. Jia, P. Zhang, Mass transfer of a rising spherical bubble in the contaminated solution with chemical reaction and volume change, *International Journal of Heat and Mass Transfer* 110 (2017) 43–57.
- [68] Q. Qin, X. Zhang, Numerical investigation on combustion in muzzle flows using an inert gas labeling method, *International Journal of Heat and Mass Transfer* 101 (2016) 91–103.
- [69] H. Aguerre, S. Márquez Damián, J. Gimenez, N. Nigro, Engine simulation using layering and sliding interfaces mesh dynamics technologies, in: *Mecánica Computacional Vol XXXIII*, 2014, pp. 27 – 49.
- [70] G. Tessi, Reingeniería de métodos de cálculo paralelo para operaciones sobre mallas dinámicas en OpenFOAM(R), Master's thesis, Facultad de Ingeniería y Ciencias Hídricas, Universidad Nacional del Litoral (2015).
- [71] J. Ferziger, M. Perić, *Computational Methods for Fluid Dynamics*, Springer London, 2002.
- [72] H. Versteeg, W. Malalasekera, *An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method*, Pearson Education Limited, 2007.

-
- [73] M. Shashkov, B. Swartz, B. Wendroff, Local reconstruction of a vector field from its normal components on the faces of grid cells, *Journal of Computational Physics* 139 (2) (1998) 406–409.
- [74] H. Weller, Non-orthogonal version of the arbitrary polygonal C-grid and a new diamond grid, *Geoscientific Model Development* 7 (3) (2014) 779–797.
- [75] H. Weller, A. Shahrokhi, Curl-free pressure gradients over orography in a solution of the fully compressible Euler equations with implicit treatment of acoustic and gravity waves, *Monthly Weather Review* 142 (12) (2014) 4439–4457.
- [76] J. Perot, D. Vidovic, P. Wesseling, Mimetic reconstruction of vectors, *Compatible Spatial Discretizations* (2006) 173–188.
- [77] C. Rhie, W. L. Chow, Numerical study of the turbulent flow past an airfoil with trailing edge separation, *AIAA journal* 21 (11) (1983) 1525–1532.
- [78] N. Mirkov, B. Rašuo, S. Kenjereš, On the improved finite volume procedure for simulation of turbulent flows over real complex terrains, *Journal of Computational Physics* 287 (2015) 18–45.
- [79] T. Gradinger, K. d. Boulouchos, A zero-dimensional model for spray droplet vaporization at high pressures and temperatures, *International journal of heat and mass transfer* 41 (19) (1998) 2947–2959.
- [80] T. Ménard, S. Tanguy, A. Berlemont, Coupling level set/VOF/ghost fluid methods: Validation and application to 3D simulation of the primary break-up of a liquid jet, *International Journal of Multiphase Flow* 33 (5) (2007) 510–524.
- [81] J. Shinjo, A. Umemura, Simulation of liquid jet primary breakup: dynamics of ligament and droplet formation, *International Journal of Multiphase Flow* 36 (7) (2010) 513–532.
- [82] B. Duret, J. Reveillon, T. Menard, F. Demoulin, Improving primary atomization modeling through DNS of two-phase flows, *International Journal of Multiphase Flow* 55 (2013) 130–137.
- [83] A. Vallet, R. Borghi, Modélisation eulerienne de l’atomisation d’un jet liquide, *Comptes Rendus de l’Académie des Sciences-Series IIB-Mechanics-Physics-Astronomy* 327 (10) (1999) 1015–1020.
- [84] M. Gorokhovski, M. Herrmann, Modeling primary atomization, *Annu. Rev. Fluid Mech.* 40 (2008) 343–366.
- [85] J. C. Beale, R. D. Reitz, Modeling spray atomization with the Kelvin-Helmholtz/Rayleigh-Taylor hybrid model, *Atomization and sprays* 9 (6).
- [86] T. Lucchini, G. D’Errico, D. Ettore, F. Brusiani, G. M. Bianchi, A. Montanaro, L. Allocca, Experimental and numerical investigation of high-pressure diesel sprays with multiple injections at engine conditions, *Tech. rep., SAE Technical Paper* (2010).
- [87] G. Bianchi, P. Pelloni, F. Corcione, L. Allocca, F. Luppino, Modeling atomization of high-pressure diesel sprays, *Journal of engineering for gas turbines and power* 123 (2) (2001) 419–427.
- [88] D. B. Spalding, The combustion of liquid fuels, in: *Symposium (international) on combustion*, Vol. 4, Elsevier, 1953, pp. 847–864.
- [89] G. Hubbard, V. Denny, A. Mills, Droplet evaporation: effects of transients and variable properties, *International Journal of Heat and Mass Transfer* 18 (9) (1975) 1003–1008.
- [90] N. Frossling, Uber die verdunstung fallender tropfen, *Beitr. Geophys. Gerlands* 52 (1938) 170–216.
- [91] R. REITZ, et al., Modeling atomization processes in high-pressure vaporizing sprays, *Atomisation and Spray Technology* 3 (4) (1987) 309–337.

- [92] O. Kaario, M. Larmi, F. Tanner, Non-evaporating liquid spray simulations with the ETAB and WAVE droplet breakup models, *Zaragoza* 9 (11).
- [93] J. Xin, L. Ricart, R. Reitz, Computer modeling of diesel spray atomization and combustion, *Combustion science and technology* 137 (1-6) (1998) 171–194.
- [94] J.-K. Yeom, M.-J. Lee, S.-S. Chung, J.-Y. Ha, J. Senda, H. Fujimoto, A proposal for diesel spray model using a TAB breakup model and discrete vortex method, *KSME international journal* 16 (4) (2002) 532–548.
- [95] C. S. Lee, H. J. Kim, S. W. Park, Atomization characteristics and prediction accuracies of hybrid break-up models for a gasoline direct injection spray, *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part D: Journal of Automobile Engineering* 218 (9) (2004) 1041–1053.
- [96] M. Turner, S. Sazhin, J. Healey, C. Crua, S. Martynov, A breakup model for transient Diesel fuel sprays, *Fuel* 97 (2012) 288–305.
- [97] Y. Yu, G. Li, Y. Wang, J. Ding, Modeling the atomization of high-pressure fuel spray by using a new breakup model, *Applied Mathematical Modelling* 40 (1) (2016) 268–283.
- [98] C. Baumgarten, *Mixture formation in internal combustion engines*, Springer Science & Business Media, 2006.
- [99] G. Taylor, The instability of liquid surfaces when accelerated in a direction perpendicular to their planes. I, in: *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, Vol. 201, The Royal Society, 1950, pp. 192–196.
- [100] Engine Combustion Network, <https://ecn.sandia.gov/> (2017).
- [101] J. Manin, Y. Jung, S. A. Skeen, L. M. Pickett, S. E. Parrish, L. Markle, Experimental characterization of DI gasoline injection processes, Tech. rep., SAE Technical Paper (2015).
- [102] R. Payri, F. J. Salvador, P. Martí-Aldaraví, D. Vaquerizo, ECN Spray G external spray visualization and spray collapse description through penetration and morphology analysis, *Applied Thermal Engineering* 112 (2017) 304–316.
- [103] J. Lacey, F. Poursadegh, M. Brear, R. Gordon, P. Petersen, C. Lakey, B. Butcher, S. Ryan, Generalizing the behavior of flash-boiling, plume interaction and spray collapse for multi-hole, direct injection, *Fuel* 200 (2017) 345–356.
- [104] D. J. Duke, A. L. Kastengren, K. E. Matusik, A. B. Swantek, C. F. Powell, R. Payri, D. Vaquerizo, L. Itani, G. Bruneaux, R. O. Grover Jr, et al., Internal and near nozzle measurements of Engine Combustion Network “Spray G” gasoline direct injectors, *Experimental Thermal and Fluid Science* 88 (2017) 608–621.
- [105] E. T. Baldwin, R. Grover, S. E. Parrish, D. Duke, K. Matusik, C. Powell, A. Kastengren, D. Schmidt, String flash-boiling in gasoline direct injection simulations with transient needle motion, *International Journal of Multiphase Flow* 87 (2016) 90–101.
- [106] E. Mattarelli, G. Cantore, C. A. Rinaldini, T. Savioli, Combustion System Development of an Opposed Piston 2-Stroke Diesel Engine, *Energy Procedia* 126 (2017) 1003–1010.
- [107] F. Shokrollahihassanbarough, A. Alqahtani, M. Wyszynski, Thermodynamic simulation comparison of opposed two-stroke and conventional four-stroke engines, *Combustion Engines* 162 (2015) 78–84.
- [108] Y. Liu, F. Zhang, Z. Zhao, Y. Dong, F. Ma, S. Zhang, Study on the synthetic scavenging model validation method of opposed-piston two-stroke diesel engine, *Applied Thermal Engineering* 104 (2016) 184–192.
- [109] F. Ma, C. Zhao, S. Zhang, Study on dual-spark ignition rapid combustion characteristic of opposed-piston two-stroke gdi engine, *Energy Procedia* 61 (2014) 722–725.

-
- [110] T. Tulwin, M. Wendeker, Z. Czyż, The swirl ratio influence on combustion process and heat transfer in the opposed piston compression-ignition engine, *Combustion Engines* 170 (2017) 3–7.
- [111] R. Venugopal, N. Abani, R. MacKenzie, Effects of injection pattern design on piston thermal management in an opposed-piston two-stroke engine, Tech. rep., SAE Technical Paper (2013).
- [112] N. Abani, M. Chiang, I. Thomas, N. Nagar, R. Zermeno, G. Regner, Developing a 55+ bte commercial heavy-duty opposed-piston engine without a waste heat recovery system, in: *Heavy-Duty-, On-und Off-Highway-Motoren 2016*, Springer, 2017, pp. 292–310.
- [113] W. Sutherland, The viscosity of gases and molecular force, *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science* 36 (223) (1893) 507–531.
- [114] B. Launder, D. Spalding, The numerical computation of turbulent flows, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 3 (2) (1974) 269 – 289.

Doctorado en Ingeniería
Mención Mecánica Computacional

Título de la obra:

**Simulación de la inyección directa
de combustible en motores
de combustión interna**

Autor: Horacio Javier Aguerre

Lugar: Santa Fe, Argentina

Palabras Claves:

Inyección Directa de Combustible, Motores de Combustión Interna,
Motor de Pistones Opuestos, Simulación Computacional,
Método de los Volúmenes Finitos, Interfaces de Malla, Supermalla
Métodos Conservativos, Oscilaciones Numéricas, Partículas,
Cómputo en Paralelo, Eficiencia Computacional.