

ESQUEMA TVD PARA FLUJOS COMPRESIBLES NO VISCOSOS CONSIDERANDO GAS EN EQUILIBRIO QUIMICO

Juan P. Saldía^{a,b,c}, Sergio A. Elaskar^{a,b}, José Tamagno^a y Oscar Falcinelli^a

^a*Departamento de Aeronáutica, FCEFYN, Universidad Nacional de Córdoba,
Av. Vélez Sarsfield 1601 (5000), Córdoba, Argentina*

^b*Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas – CONICET, Argentina*

^c*saldiajp(at)gmail.com*

Palabras Clave: Ecuaciones de Euler, flujo compresible, esquemas TVD, equilibrio químico

Resumen. Se presenta en este trabajo un esquema de cálculo que emplea volúmenes finitos para la solución de las ecuaciones de Euler unidimensionales (1D) inestacionarias, considerando que en el gas siempre se alcanza el estado de equilibrio químico. Se utiliza el "solver" de Riemann de Roe, junto con el esquema *Total Variation Diminishing* (TVD) desarrollado por los co-autores, que aplica diferentes funciones limitadoras a cada onda del problema de Riemann con el objetivo de reducir la viscosidad numérica en la captación de discontinuidades de contacto sin perder robustez en la captura de las ondas de choque. Se asume que el gas satisface la ecuación de estado de gases ideales, obteniéndose las propiedades termodinámicas del equilibrio químico a través de la minimización de la energía de Helmholtz o Gibbs. Bajo esta hipótesis, se generaliza el "solver" de Roe, de acuerdo a la metodología propuesta por Vinokur. Con el objetivo de evaluar la metodología desarrollada, se presentan resultados para diferentes problemas de Riemann unidimensionales específicamente diseñados para gas real.

1. INTRODUCCION

En el sistema de ecuaciones de Euler emergen discontinuidades en la solución, cuya captación numérica precisa, representa un constante desafío en el desarrollo de nuevos métodos. Esquemas de segundo orden de aproximación resuelven con alta precisión estas discontinuidades, pero presentan el inconveniente de generar oscilaciones en la solución alrededor de las mismas. Por otro lado, esquemas de primer orden no generan oscilaciones, a expensas de difundir excesivamente las discontinuidades. Los esquemas de alto orden que se clasifican como TVD (Total Variation Diminishing), satisfacen la condición de no introducir nuevos extremos en la solución, resolviendo las discontinuidades con alta precisión sin generar oscilaciones. No obstante, la condición TVD ha sido únicamente demostrada en la ecuación de convección escalar (Harten, 1983). Su extensión a sistemas de ecuaciones no lineales se ha realizado con anterioridad mediante diferentes técnicas. En la técnica introducida por (Yee et al., 1985; Yee, 1987b,a, 1989), a partir de la descomposición espectral del sistema de Euler, y la introducción de las variables características, es posible obtener un sistema de ecuaciones escalares no lineales desacopladas. Luego, si se asume un estado constante tal que permita linealizar localmente este sistema, es posible aplicar el esquema TVD original.

En la descomposición espectral del sistema de ecuaciones de Euler aparece una familia de ondas linealmente degeneradas. Las discontinuidades de contacto asociadas a esta familia de ondas son muy difíciles de capturar con precisión, a menos que en el esquema TVD de Yee se utilicen funciones limitadoras altamente compresivas, que en desventaja, introducen oscilaciones y no son robustas en la captura de discontinuidades asociadas las ondas no lineales, e.g. ondas de choque, (C.Hirsch, 1992).

En este trabajo se utiliza un nuevo esquema adaptivo en volúmenes finitos del esquema *upwind* de Yee (Yee, 1987b) propuesto por (Falcinelli et al., 2008), que aplica una función limitadora altamente compresiva, conocida como *superbee*, en la familia de ondas linealmente degeneradas, en el caso que la intensidad de las mismas sea mayor que las ondas no linealmente degeneradas, bajo un criterio de comparación. Caso contrario, se utiliza el esquema *upwind* de Yee original, que utiliza la función limitadora (más difusiva) *minmod* en todas las ondas. Esta modificación adaptiva ha mostrado la capacidad de resolver con precisión discontinuidades de contacto, sin sacrificar robustez en la captación de ondas de choque.

El objetivo de este trabajo es la extensión del mencionado esquema al caso donde se considera gas en equilibrio termoquímico. Se utiliza para ello un programa desarrollado por NASA (Gordon y McBride, 1994,1996), que calcula las propiedades termodinámicas en el equilibrio químico de mezcla de gases, mediante la minimización de la energía libre de Gibbs o Helmholtz. Se introduce la generalización del estado que linealiza el sistema de ecuaciones, el estado promedio de Roe, al caso donde no se asume gas calórico perfecto, de acuerdo a la metodología propuesta por (Vinokur y Montagné, 1990).

Se presentan resultados del problema de Riemann 1D para diferentes casos diseñados con el objetivo de que en el dominio aparezcan condiciones tales, que el estado termodinámico del gas difiera significativamente del caso de gas calórico perfecto.

La evaluación del esquema adaptivo extendido a gas real presentada en este trabajo, tiene como natural motivación y continuación su aplicación en la solución de las ecuaciones de Euler 2D y 3D en régimen hipersónico sobre cuerpos, en los cuáles la hipótesis de gas en equilibrio químico permite realizar cálculos más precisos de importantes variables de diseño, como por ejemplo, la distribución de temperatura sobre el cuerpo (Anderson, 1989).

2. SISTEMA DE ECUACIONES Y DISCRETIZACION

2.1. Ecuaciones de Euler

Las ecuaciones de Euler forman un sistema de ecuaciones diferenciales hiperbólicas no lineales que describen la dinámica de un fluido compresible, donde son despreciados los efectos de fuerzas másicas, viscosas y transferencia de calor por conducción y radiación. Las ecuaciones de Euler unidimensionales pueden ser escritas en forma conservativa como,

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}(\mathbf{U})}{\partial x} = \mathbf{0} \quad (2.1a)$$

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ E \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F} = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ u(E + p) \end{pmatrix} \quad (2.1b)$$

donde ρ es la densidad, u es la velocidad, y E es la energía total del flujo que se encuentra dada por,

$$E = \rho \left(\frac{1}{2} u^2 + e \right) \quad (2.2)$$

Al sistema de ecuaciones (2.1). debe adicionarse una ecuación que relacione la presión p con las variables conservativas que supondremos de la forma general,

$$p = p(\rho, \rho u, E) \quad (2.3)$$

2.2. Discretización en volúmenes finitos

En el esquema de volúmenes finitos, se discretiza el dominio del problema $\Omega = [x_L, x_R]$ en un número finito N de celdas $\Omega_i = [x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}]$, ($i = 1, 2, \dots, N$)

En el interior de cada celda Ω_i , se asume que las variables conservativas no son función de la posición espacial y sólo dependen del tiempo. De esta manera la forma integral de las leyes de conservación son escritas para cada celda Ω_i en la forma discreta,

$$\frac{d\mathbf{U}_i}{dt} = -\frac{1}{\Delta x} \left(\mathbf{F}_{i+\frac{1}{2}} - \mathbf{F}_{i-\frac{1}{2}} \right) \quad (2.4)$$

donde $\Delta x = x_{i+\frac{1}{2}} - x_{i-\frac{1}{2}} > 0$ se asume constante, y donde

$$\mathbf{F}_{i+\frac{1}{2}} = \mathbf{F}(\mathbf{U}_{i-I_L}, \dots, \mathbf{U}_{i+I_R}) \quad (2.5)$$

con I_L, I_R dos enteros positivos, es una aproximación numérica consistente (Leveque, 1992) del flujo físico $\mathbf{F}(\mathbf{U})$ evaluado en la interface entre celdas $x_{i+\frac{1}{2}}$.

3. CALCULO DEL FLUJO NUMERICO

3.1. Esquema TVD

Para el cálculo de los flujos numéricos se utiliza la técnica de *aproximación local por características* introducida en (Yee et al., 1985; Yee, 1987b,a, 1989). Esta técnica extiende el esquema escalar de segundo orden espacial y temporal *upwind TVD (Total Variation Diminishing)* de Yee a sistemas de ecuaciones utilizando las variables características.

Considérese la matriz jacobiana de un sistema de m ecuaciones de la forma 2.1a

$$\mathbf{A}(\mathbf{U}) = \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{U}} \quad (3.1)$$

En sistemas de ecuaciones hiperbólicos la matriz $\mathbf{A}(\mathbf{U})$ tiene m valores propios reales $\lambda^l(\mathbf{U})$ y un conjunto asociado de vectores propios derechos linealmente independientes $\mathbf{R}^l(\mathbf{U})$, ($l = 1, \dots, m$). Debido a la independencia lineal de los vectores $\mathbf{R}^l(\mathbf{U})$ puede escribirse,

$$\mathbf{R}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{R} = \text{diag} (\lambda^l) \quad (3.2)$$

Definimos ahora las variables características \mathbf{W} ,

$$\mathbf{W} = \mathbf{R}^{-1} \mathbf{U} \quad (3.3)$$

Escribimos luego, la Ec. (2.1a) en su forma cuasilineal

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{U}} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} = \mathbf{0} \quad (3.4)$$

Sea ahora un estado constante $\mathbf{U}_{i+\frac{1}{2}}$, promedio simétrico de los estados $(\mathbf{U}_i, \mathbf{U}_{i+1})$. Sean $\lambda_{i+\frac{1}{2}}^l$ los valores propios y $\mathbf{R}_{i+\frac{1}{2}}^l$ los vectores propios derechos de la matriz jacobiana (Ec. 3.1) evaluada en $\mathbf{U}_{i+\frac{1}{2}}$. Utilizando esta linealización local de la matriz jacobiana en las Ecs. (3.2, 3.3) e introduciendo éstas en la Ec. (3.4), se llega a un sistema de m ecuaciones desacopladas con coeficientes constantes para las variables características,

$$\frac{\partial w^l}{\partial t} + \lambda_{i+\frac{1}{2}}^l \frac{\partial w^l}{\partial x} = 0 \quad (3.5)$$

Es posible aplicar ahora el esquema escalar TVD de Yee a cada una de las ecuaciones desacopladas (3.5), y extenderlo de esta forma al caso de sistemas de ecuaciones hiperbólicas, donde ahora la propiedad TVD se satisface en el sentido de coeficientes localmente congelados (Yee et al., 1985). La forma final del flujo numérico TVD de Yee que se obtiene al invertir la transformación para obtener nuevamente el esquema en las variables originales se encuentra dada por,

$$\mathbf{F}_{i+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} (\mathbf{F}_i + \mathbf{F}_{i+1}) + \frac{1}{2} \mathbf{R}_{i+\frac{1}{2}} \Phi_{i+\frac{1}{2}} \quad (3.6)$$

Las componentes de $\Phi_{i+\frac{1}{2}}$ se encuentran definidas por,

$$\Phi_{i+\frac{1}{2}}^l = g_i^l + g_{i+1}^l - \psi \left(\lambda_{i+\frac{1}{2}}^l + \gamma_{i+\frac{1}{2}}^l \right) \alpha_{i+\frac{1}{2}}^l \quad (3.7)$$

En este trabajo, el estado promedio necesario para linealizar la matriz jacobiana y evaluar los valores y vectores propios $\lambda_{i+\frac{1}{2}}$ y $\mathbf{R}_{i+\frac{1}{2}}$ se elige igual al estado promedio de Roe (Roe, 1981), (véase Sec. 3.2). $\alpha_{i+\frac{1}{2}}$ son los coeficientes de la descomposición espectral del problema de Riemann en la interface y se encuentran dados por,

$$\alpha_{i+\frac{1}{2}} = \mathbf{R}_{i+\frac{1}{2}}^{-1} (\mathbf{U}_{i+1} - \mathbf{U}_i) \quad (3.8)$$

La función g se conoce como función limitadora del flujo y se encuentra relacionada con la propiedad TVD del esquema. En la elección de las funciones limitadoras, se utiliza la metodología

propuesta en (Falcinelli et al., 2008), que mejora la captación de las discontinuidades de contacto asociadas a la familia de ondas características linealmente degeneradas, que surgen del estudio del problema de Riemann de las ecuaciones de Euler. En esta nueva metodología, si la intensidad de las ondas características linealmente degeneradas es mayor que la intensidad de las ondas no linealmente degeneradas, bajo cierto criterio de comparación, se aplica la función limitadora *superbee* (Harten, 1978) en las primeras, y la función limitadora *minmod* (Sweby, 1984) en el resto. En caso contrario, se utiliza el esquema original de Yee que aplica la función *minmod* en todas las ondas. Esta metodología busca aprovechar las mejores características de ambas funciones limitadoras, robustez y ausencia de oscilaciones en el caso de la función *minmod*, y alta resolución en la captación de discontinuidades de contacto, en el caso de la función *superbee*.

La función *minmod* se encuentra definida por,

$$g_i^l = S \cdot \max \left[0, \min \left(\sigma(\lambda_{i+\frac{1}{2}}^l) |\alpha_{i+\frac{1}{2}}^l|, S \cdot \sigma(\lambda_{i-\frac{1}{2}}^l) \alpha_{i-\frac{1}{2}}^l \right) \right] \quad (3.9a)$$

$$S = \text{sign}(\alpha_{i+\frac{1}{2}}^l) \quad (3.9b)$$

Por otro lado la función *superbee* se define por,

$$g_i^l = \begin{cases} \frac{1}{2} \max [0, \min(2r, 1), \min(r, 2)] |\lambda_{j-\frac{1}{2}}^l| \alpha_{j-\frac{1}{2}}^l & \text{si } r \geq 0 \\ 0 & \text{si } r < 0 \end{cases} \quad (3.10a)$$

$$r = \frac{|\lambda_{i+\frac{1}{2}}^l| \alpha_{i+\frac{1}{2}}^l}{|\lambda_{i-\frac{1}{2}}^l| \alpha_{i-\frac{1}{2}}^l} \quad (3.10b)$$

donde para cálculos con precisión temporal, $\sigma(z)$ se define por (Yee, 1989)

$$\sigma(z) = \frac{1}{2} \left(\psi(z) - \frac{\Delta t}{\Delta x} z^2 \right) \quad (3.11)$$

La función $\psi(z)$ es el coeficiente de viscosidad numérica, y tiene que ser modificada de forma que el esquema satisfaga la condición de entropía, y la solución numérica converja a la solución físicamente posible (Harten y Hyman, 1983). Se encuentra definida por,

$$\psi(z) = \begin{cases} |z| & \text{si } |z| \geq \delta_1 \\ (z^2 + \delta_1^2) / 2\delta_1 & \text{si } |z| < \delta_1 \end{cases} \quad (3.12)$$

donde δ_1 es un parámetro pequeño y positivo, que depende de la solución.

Finalmente, la definición del esquema se completa con,

$$\gamma_{i+\frac{1}{2}}^l = \begin{cases} (g_{i+1}^l - g_i^l) / \alpha_{i+\frac{1}{2}}^l & \text{si } \alpha_{i+\frac{1}{2}}^l \neq 0 \\ 0 & \text{si } \alpha_{i+\frac{1}{2}}^l = 0 \end{cases} \quad (3.13)$$

3.2. Evaluación del estado promedio de Roe considerando gas en equilibrio químico

El problema de hallar el estado promedio de Roe en la interface $U_{i+\frac{1}{2}}$, consiste en encontrar una matriz jacobiana de coeficientes constantes $\tilde{A}(\tilde{U})$, donde $\tilde{U} \equiv U_{i+\frac{1}{2}}(U_i, U_{i+1})$ es función de los estados a la izquierda y derecha de la interface. La matriz jacobiana de Roe \tilde{A} de un sistema de m ecuaciones debe satisfacer las siguientes propiedades (Roe, 1981):

- Propiedad (A). *Hiperbolicidad del sistema*. El sistema debe preservar las características matemáticas del sistema no lineal original. Se requiere que $\tilde{\mathbf{A}}$ tenga m valores propios reales $\tilde{\lambda}^l = \tilde{\lambda}^l(\mathbf{U}_i, \mathbf{U}_{i+1})$, los cuales se ordenan de acuerdo a,

$$\tilde{\lambda}^1 \leq \tilde{\lambda}^2 \leq \dots \leq \tilde{\lambda}^m \quad (3.14)$$

y una base de vectores propios derechos linealmente independientes

$$\tilde{\mathbf{R}}^{(1)}, \tilde{\mathbf{R}}^{(2)}, \dots, \tilde{\mathbf{R}}^{(m)} \quad (3.15)$$

- Propiedad (B). *Consistencia con el Jacobiano exacto*.

$$\tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{U}, \mathbf{U}) = \mathbf{A}(\mathbf{U}) \quad (3.16)$$

- Propiedad (C). *Conservación a través de las discontinuidades*. Asegura el cumplimiento de las condiciones de Rankine–Hugoniot.

$$\mathbf{F}(\mathbf{U}_{i+1}) - \mathbf{F}(\mathbf{U}_i) = \tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{U}_{i+1} - \mathbf{U}_i) \quad (3.17)$$

En el caso particular de gas calórico perfecto, la matriz jacobiana promedio de Roe se encuentra definida en forma exacta, (Roe, 1981). Sin embargo, la generalización del estado promedio de Roe para gases reales en condiciones de equilibrio químico no se encuentra unívocamente definida. Diversas extensiones del estado promedio de Roe han sido propuestas, (Grossman y Walters, 1987; Vinokur y Montagné, 1990; Cox y Cinnella, 1994; Liou et al., 1990), dependiendo éstas, de la elección de las variables utilizadas en la ecuación de estado que define la presión. En este trabajo se utiliza la metodología propuesta por (Vinokur y Montagné, 1990), que permite desacoplar el problema fluidodinámico del cálculo de las propiedades de equilibrio químico, además de haber sido ampliamente reportado su uso en esquemas TVD (Yee, 1987b; Montagné et al., 1989), en la solución de flujo hipersónico bidimensional (Montagné et al., 1988), y presentando un menor costo computacional en comparación con las otras técnicas (Mottura et al., 1997).

En la metodología propuesta por (Vinokur y Montagné, 1990) la presión p se expresa como función de la densidad y la energía interna por unidad de volumen $\varepsilon = \rho e$,

$$p = p(\varepsilon, \rho) \quad (3.18)$$

Se definen las derivadas termodinámicas de la ecuación de estado como,

$$\kappa = \left(\frac{\partial p}{\partial \varepsilon} \right)_{\rho}, \quad \chi = \left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_{\varepsilon} \quad (3.19)$$

Utilizando estas últimas definiciones se demuestra que la matriz de Roe $\tilde{\mathbf{A}}$ que satisface las propiedades (A), (B) y (C) se encuentra dada por,

$$\tilde{\mathbf{A}} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -\tilde{u}^2 + \frac{1}{2}\tilde{\kappa}\tilde{u}^2 + \tilde{\chi} & \tilde{u}(2 - \tilde{\kappa}) & \tilde{\kappa} \\ \tilde{u} \left(-\tilde{H} + \frac{1}{2}\tilde{u}^2 + \tilde{\chi} \right) & \tilde{H} - \tilde{u}^2\tilde{\kappa} & \tilde{u}(1 + \tilde{\kappa}) \end{bmatrix} \quad (3.20)$$

donde,

$$\tilde{u} = \text{Ro}(u) \quad \tilde{v} = \text{Ro}(v) \quad \tilde{H} = \text{Ro}(H) \quad (3.21)$$

en la cuál se introdujo el operador promedio de Roe, $\text{Ro}(\bullet)$ definido por,

$$\text{Ro}(\bullet) = \frac{\sqrt{\rho_i} (\bullet)_i + \sqrt{\rho_{i+1}} (\bullet)_{i+1}}{\sqrt{\rho_i} + \sqrt{\rho_{i+1}}} \quad (3.22)$$

y donde $H = \frac{(E+p)}{\rho}$ es la entalpía total del flujo.

La matriz jacobiana de Roe (Ec. 3.20) tiene tres valores propios asociados a las denominadas *ondas características* 1, 2 y 3 dados por,

$$\tilde{\lambda}^1 = \tilde{u} - \tilde{c}, \quad \tilde{\lambda}^2 = \tilde{u}, \quad \tilde{\lambda}^3 = \tilde{u} + \tilde{c} \quad (3.23)$$

y cuya matriz de vectores propios asociados es,

$$\tilde{\mathbf{R}} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ \tilde{u} - \tilde{c} & \tilde{u} & \tilde{u} + \tilde{c} \\ \tilde{H} - \tilde{u}\tilde{c} & \tilde{H} - \frac{\tilde{c}^2}{\tilde{\kappa}} & \tilde{H} + \tilde{u}\tilde{c} \end{bmatrix} \quad (3.24)$$

donde \tilde{c} es la velocidad del sonido promedio de Roe dada por,

$$\tilde{c} = \sqrt{\left[\tilde{\chi} + \left(\tilde{H} - \frac{1}{2}\tilde{u}^2 \right) \tilde{\kappa} \right]} \quad (3.25)$$

Para que la matriz jacobiana satisfaga la propiedad (C), debe cumplirse además la siguiente condición

$$\Delta p = \tilde{\chi}\Delta\rho + \tilde{\kappa}\Delta\varepsilon \quad (3.26)$$

donde $\Delta(\bullet) = (\bullet)_{i+1} - (\bullet)_i$

Con el fin de determinar unívocamente los valores de $\tilde{\chi}$ y $\tilde{\kappa}$, (Vinokur y Montagné, 1990), propusieron un método que utiliza la información que brindan los estados termodinámicos a la izquierda (L) y derecha (R) de la interface.

Integrando la expresión

$$dP = \chi d\rho + \kappa d\varepsilon \quad (3.27)$$

a lo largo de un camino recto entre los estados L y R y usando la (Ec. 3.26) se obtienen las relaciones generales,

$$\tilde{\chi} = \int_0^1 \chi[\varepsilon(\tau), \rho(\tau)] d\tau \quad , \quad \tilde{\kappa} = \int_0^1 \kappa[\varepsilon(\tau), \rho(\tau)] d\tau \quad (3.28)$$

donde el parámetro τ es normalizado de tal forma que $\tau_L = 0$ y $\tau_R = 1$. Es de destacar que la definición anterior no elimina la no unicidad del estado promedio de Roe, debido a que existe una dependencia directa del camino elegido entre los estados L y R. Es decir, diferentes caminos de integración brindan diferentes matrices jacobianas de Roe, tal como se demuestra en (Toumi, 1992). Debido al costo que implicaría la evaluación exacta de las Ecs. (3.28), en

(Vinokur y Montagné, 1990) se propone encontrar primero una aproximación $\hat{\chi}$, $\hat{\kappa}$ para $\tilde{\chi}$ y $\tilde{\kappa}$, mediante una regla de integración numérica de bajo costo, tal como la regla del punto medio o la regla trapezoidal.

Luego, se realiza una proyección de estos valores en el plano $\chi - \kappa$ sobre la línea recta definida por la Ec. (3.26). Finalmente se obtienen las relaciones (Mottura et al., 1997),

$$\tilde{\chi} = \frac{D\hat{\chi} + \hat{s}^2\Delta\rho\delta p}{D - \Delta p\delta p} \quad (3.29a)$$

$$\tilde{\kappa} = \frac{D\hat{\kappa}}{D - \Delta p\delta p} \quad (3.29b)$$

donde,

$$\delta p = \Delta p - \hat{\chi}\Delta\rho - \hat{\kappa}\Delta\varepsilon \quad (3.30a)$$

$$D = (\hat{s}\Delta\rho)^2 + (\Delta p)^2 \quad (3.30b)$$

$$\hat{s} = \hat{\chi} + \overline{\kappa h} \quad (3.30c)$$

y donde $\overline{\kappa h}$ es evaluado aplicando al producto κh la misma fórmula de integración utilizada para $\hat{\chi}$ y $\hat{\kappa}$, siendo $h = e + p/\rho$, la entalpía específica.

3.3. Cálculo de las propiedades en equilibrio químico

En el cálculo de las propiedades termodinámicas de la mezcla de gases en equilibrio termoquímico se ha utilizado el programa CEA2 (*Chemical Equilibrium with Applications*) (Gordon y McBride, 1994,1996), desarrollado por NASA–Glenn Research Center. Este programa permite la obtención del estado termodinámico de la mezcla de gases en equilibrio termoquímico, dadas dos variables de estado del sistema. Utiliza con este objetivo un algoritmo de minimización de la energía libre de Helmholtz o Gibbs dependiendo de cuales son las variables dadas como dato. Para cada especie las funciones termodinámicas se expresan mediante polinomios cuyos coeficientes han sido tabulados para un rango de temperaturas entre 200K y 20000K (Chase, 1985). En última instancia se utiliza la modificación de CEA2, realizada por (Scarpín, 2005), que permite un acoplamiento estandarizado de CEA2 en códigos de cálculo fluidodinámico.

En el contexto de las ecuaciones de Euler, las variables termodinámicas que pueden expresarse en forma explícita a partir del vector de variables conservativas \mathbf{U} de la Ec.(2.1a) son la energía interna e , y la densidad ρ . Afortunadamente, esta combinación coincide con una de las posibles de CEA2. Por lo tanto, a partir de estas, es posible obtener los estados termodinámicos completos en cada celda y en consecuencia obtener el estado promedio de Roe necesario para el cálculo del flujo en las interceldas. No obstante, entre las variables de salida del programa CEA2 no se encuentran incluídas los valores de las derivadas χ y κ . Debido a que CEA2 asume una mezcla de gases térmicamente perfectos, es posible deducir las siguientes expresiones para las derivadas κ y χ ,

$$\kappa = \gamma - 1 \quad (3.31a)$$

$$\chi = \frac{p}{\rho} - (\gamma - 1)e \quad (3.31b)$$

donde $\gamma = \left(\frac{\partial e}{\partial T}\right)_p / \left(\frac{\partial e}{\partial T}\right)_\rho$ es el coeficiente de expansión politrópica del gas y donde todos los términos a la derecha de la Ec. (3.31) pueden ser obtenidos a partir de CEA2.

4. RESULTADOS

4.1. Casos de prueba

Se presentan resultados para un total de 5 problemas de Riemann unidimensionales. Estos casos de prueba se han utilizado previamente en (Montagné et al., 1989; Yee, 1989) para comparar la performance de esquemas TVD donde se considera gas en equilibrio químico. Las condiciones iniciales de los estados a la izquierda (L) y derecha (R) de la discontinuidad inicial para cada uno de los casos de prueba son tabulados en la Tabla 4.1. Se utiliza en todos los casos aire con los siguientes porcentajes molares: ($N_2 = 78.084$, $O_2 = 20.9476$, $Ar = 0.9365$, $CO_2 = 0.0319$).

Caso	Estado	Densidad kg/m^3	Presión N/m^2	Temperatura K	Velocidad m/sec
Caso A	(L)	0.0660	$9.84 \cdot 10^4$	4390.8	0.0
	(R)	0.0300	$1.50 \cdot 10^4$	1741.8	0.0
Caso B	(L)	1.4000	$9.88 \cdot 10^5$	2456.5	0.0
	(R)	0.1400	$9.93 \cdot 10^3$	247.1	0.0
Caso C	(L)	1.2900	$1.00 \cdot 10^5$	270.0	0.0
	(R)	0.0129	$1.00 \cdot 10^4$	2648.9	0.0
Caso D	(L)	1.0000	$6.50 \cdot 10^5$	2263.6	0.0
	(R)	0.0100	$1.00 \cdot 10^3$	348.4	0.0
Caso E	(L)	0.0100	$5.73 \cdot 10^2$	199.6	2200.0
	(R)	0.1400	$2.23 \cdot 10^4$	554.9	0.0

Tabla 4.1: Condiciones iniciales de cada caso de prueba.

El problema de Riemann unidimensional se implementa en un tubo de choque de longitud igual a 14 m. El origen de coordenadas x se sitúa en la mitad del tubo. En todos los casos, excepto el caso D, la discontinuidad inicial que separa los estados (L) y (R) de la Tabla 4.1 coincide con el origen de coordenadas. En el caso D, la discontinuidad inicial se sitúa en $x = -1.0$. Se utiliza una discretización del dominio en 100 celdas de longitud $\Delta x = 0.14m$. El número de $CFL = \Delta t / \Delta x \max(|u_i| + c_i)$ se elige igual a 0.75 en todos los casos. Las condiciones de contorno son tratadas mediante la técnica de las celdas imaginarias (Toro, 1999), y son consideradas en todos los casos como transparentes.

4.2. Experimentos numéricos

Se realiza una comparación de los resultados obtenidos a través de tres esquemas. El esquema (a) utiliza la función limitadora *minmod* (Ec. 3.9) en todas las ondas. El esquema (b) utiliza la función limitadora *minmod* en las ondas características no linealmente degeneradas asociadas a los valores propios 1 y 3 de la (Ec. 3.23) y la función limitadora *superbee* (Ec. 3.10) en la onda linealmente degenerada asociada al valor propio 2. El esquema adaptivo (c) es aquel propuesto en (Falcinelli et al., 2008). En este se evalúan las intensidades de las ondas $I^{(l)}$ del problema de Riemann en la intercelda. Si las intensidades de las ondas 1 ó 3 es mayor que la onda 2 se utiliza el esquema (a), caso contrario se utiliza el esquema (b), es decir el esquema (c) se define

mediante la condición,

$$\text{Esquema (c)} \equiv \begin{cases} \text{Esquema (a)} & \text{si } I^{(2)} \leq \max(I^{(1)}, I^{(3)}) \\ \text{Esquema (b)} & \text{si } I^{(2)} > \max(I^{(1)}, I^{(3)}) \end{cases} \quad (4.1)$$

Las intensidades de las ondas en la intercelda $i + \frac{1}{2}$ se evalúan a través del módulo de la diferencia de las variables conservativas a ambos lados de las ondas características asociadas al problema de Riemann aproximado de Roe,

$$I^l = \|\alpha_{i+\frac{1}{2}}^l \mathbf{R}_{i+\frac{1}{2}}^l\| \quad (4.2)$$

donde $\alpha_{i+\frac{1}{2}}^l$ se encuentran dados por la (Ec. 3.8) y $\mathbf{R}_{i+\frac{1}{2}}^l$ es el vector columna l de la matriz de vectores propios evaluada en el estado promedio de Roe (Ec. 3.24)

En las Figs. (4.1 a 4.5) se presenta la comparación de los resultados obtenidos con los tres esquemas, para la densidad, energía interna, número de Mach y coeficiente politrópico γ , de los casos A a E respectivamente, (veáse Tabla 4.1), considerando gas en equilibrio químico.

En todos los casos, la solución numérica es comparada con la solución pseudo analítica del problema de Riemann, obtenida a partir de la solución de las condiciones de Rankine Hugoniot en los choques y la integración numérica de los invariantes de Riemann a través de las ondas de expansión, de acuerdo al procedimiento propuesto en (Saurel et al., 1994).

4.2.1. Caso A

El esquema de ondas del problema de Riemann del caso A (Fig. 4.1) consiste en una onda de expansión que viaja hacia la izquierda, una discontinuidad de contacto y una onda de choque que se mueven hacia la derecha. Los tres esquemas captan en un ancho de tres celdas la onda de choque, mientras que los esquemas (b) y (c) resuelven significativamente mejor la discontinuidad de contacto. Se presentan grandes variaciones en el coeficiente γ , lo que da una medida de la magnitud de la diferencia con el gas calórico perfecto. Una gran oscilación ocurre en la discontinuidad de contacto para este coeficiente cuya magnitud no logra ser disminuída por los esquemas (b) y (c). Esta oscilación ocurre debido a que entre los estados termodinámicos a la izquierda y derecha de la discontinuidad, existe un mínimo en la función γ , que se presenta para los estados termodinámicos que se obtienen numéricamente detrás de la onda. Finalmente, se obtiene que el esquema (b) y el esquema adaptivo (c) no presentan apreciables diferencias, si bien se puede observar que el esquema adaptivo disminuye levemente un sobrepico en la energía interna que aparece detrás de la discontinuidad de contacto.

4.2.2. Caso B

En este caso (Fig.4.2) el esquema de ondas es similar al caso A, sólo que la intensidad de la onda de choque es mayor, y la de la discontinuidad de contacto es menor. Nuevamente los tres esquemas resuelven en tres celdas la onda de choque, mientras que los esquemas que usan la función *superbee* en la onda 2, mejoran la captación de la discontinuidad de contacto. El esquema adaptivo (c) disminuye las oscilaciones numéricas que aparecen detrás de la onda de contacto. En este caso el coeficiente γ es monótonamente decreciente con respecto a la energía interna en todo el dominio de cálculo, no observándose extremos locales en los estados termodinámicos numéricos entre discontinuidades. Este comportamiento se repete en los casos subsiguientes.

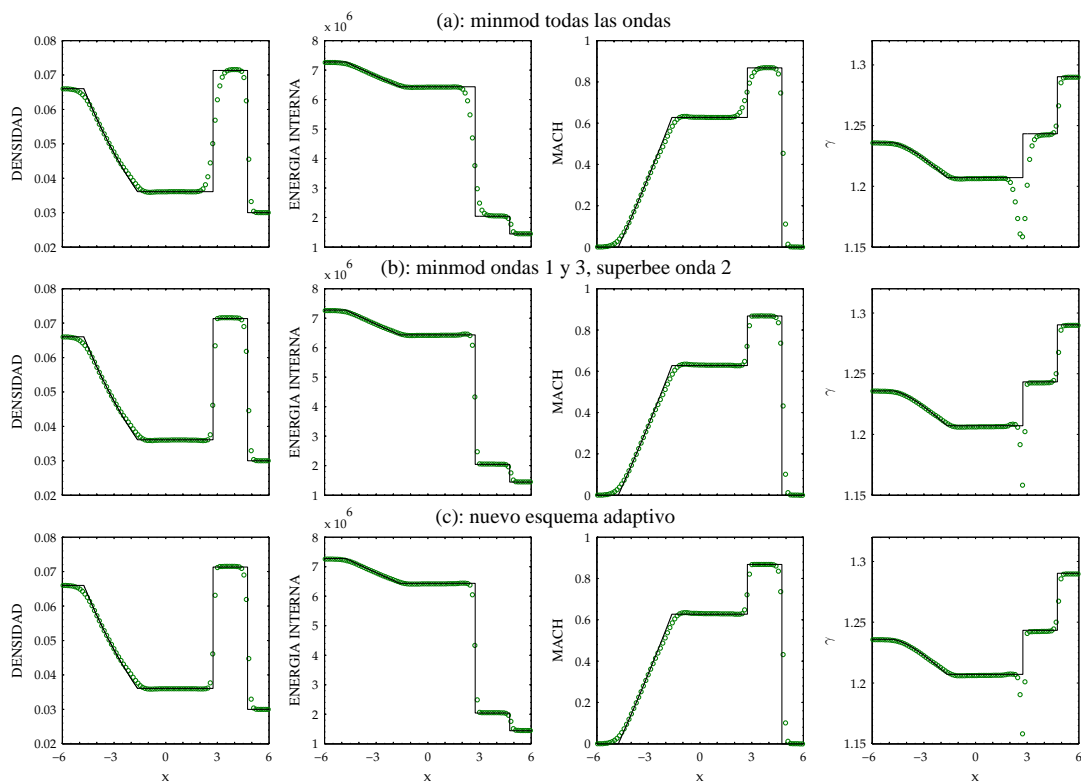


Figura 4.1: Comparación de los esquemas TVD considerando gas en equilibrio químico para el caso de prueba A. Tiempo de salida: 3.5 ms.

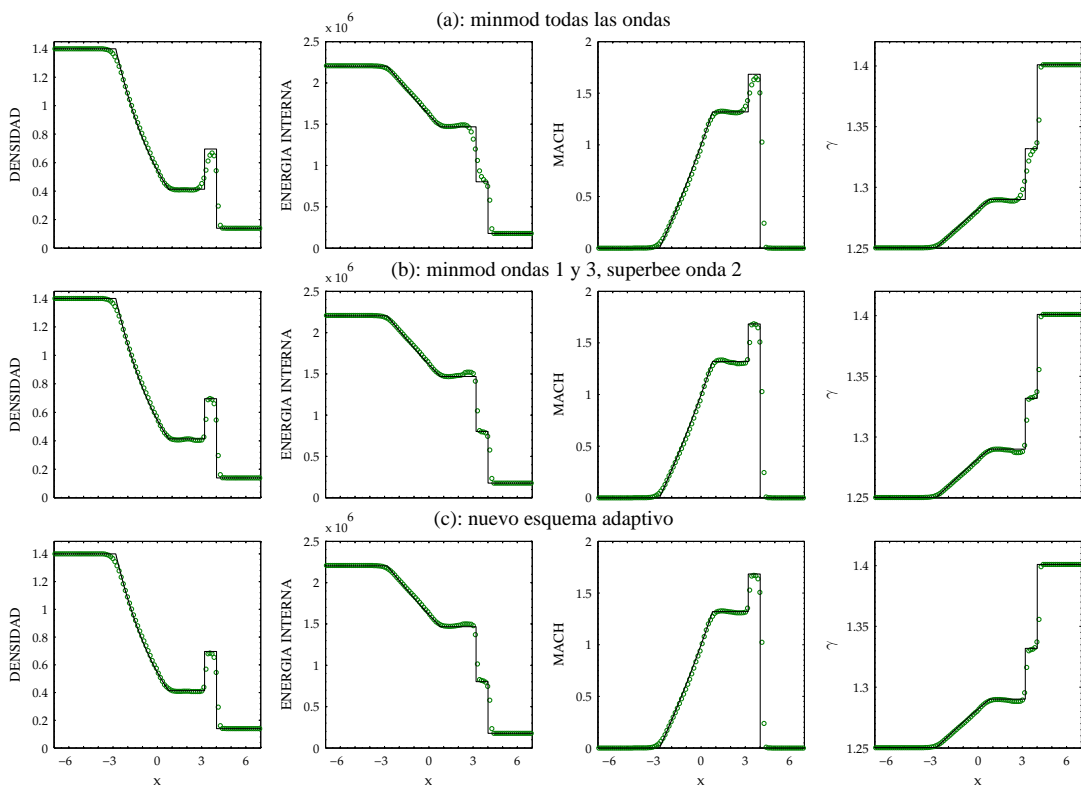


Figura 4.2: Comparación de los esquemas TVD considerando gas en equilibrio químico para el caso de prueba B. Tiempo de salida: 3.0 ms.

4.2.3. Caso C

El caso C (Fig. 4.3) presenta un esquema de ondas similar a los anteriores, con una discontinuidad de contacto intensa lenta y una onda de choque débil. Todos los esquemas sobreestiman la velocidad de la onda de choque. El esquema (a) sobreestima a su vez la velocidad de la discontinuidad de contacto, la cual es significativamente mejor captada con los esquemas (b) y (c). En este caso particular el esquema adaptivo presenta una leve mayor difusión de la onda de contacto que el esquema (b), observable especialmente en la densidad. Ambos esquemas no presentan oscilaciones apreciables en las regiones vecinas a la misma.

4.2.4. Caso D

El caso E (Fig. 4.4) presenta una intensa onda de expansión transónica, una discontinuidad de contacto y onda de choque ambas con grandes cambios en la energía interna, pero con pequeños saltos en la densidad. En este caso existe una sobreestimación y oscilaciones en la energía interna delante del contacto para el esquema (b), las cuales son prácticamente inexistentes en el esquema adaptivo. Puede decirse que en este caso es donde más se pudo apreciar la mejor performance del esquema adaptivo sobre los restantes. El salto de entropía presente en el punto sónico de la rarefacción también se observó en el cálculo considerando gas perfecto (no presentado), y disminuye en ambos casos al aumentar el número de celdas de la discretización, por lo que puede decirse que el corrector de entropía presenta en este caso un comportamiento similar considerando gas en equilibrio o gas perfecto.

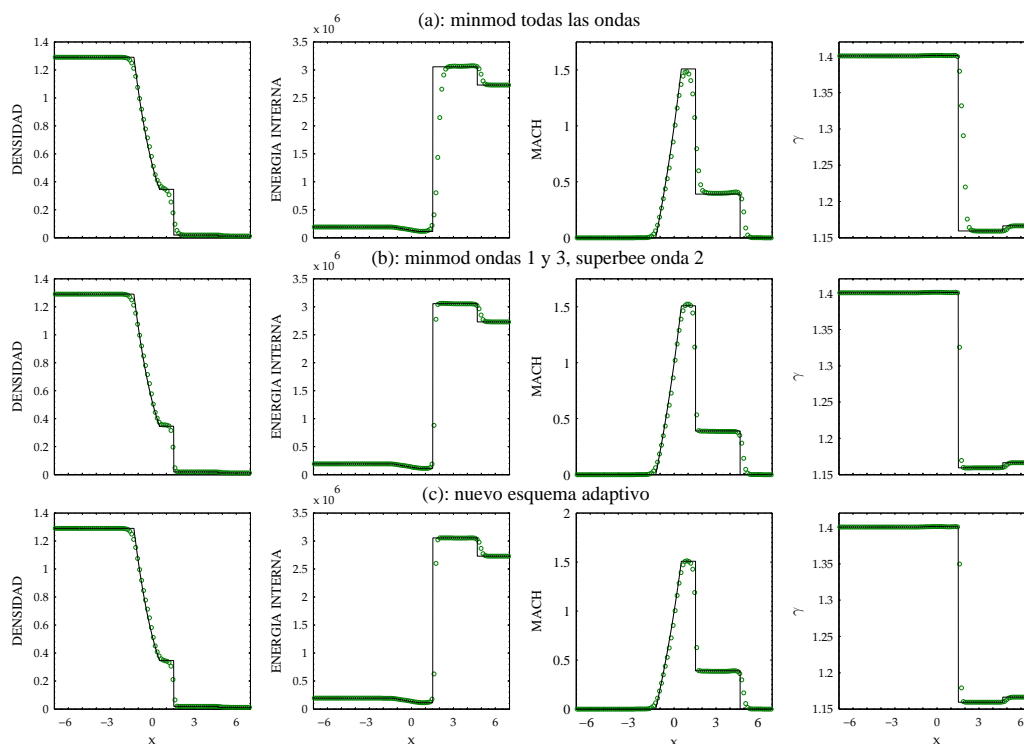


Figura 4.3: Comparación de los esquemas TVD considerando gas en equilibrio químico para el caso de prueba C. Tiempo de salida: 4.0 ms.

4.2.5. Caso E

El caso E (Fig. 4.5) presenta una onda de choque lenta que viaja hacia la izquierda y una discontinuidad de contacto y onda de choque rápidas que viajan hacia la derecha. La captación de la onda de choque izquierda es prácticamente exacta en los tres esquemas, produciéndose sin embargo oscilaciones detrás de la onda, propias de la solución numérica de ondas de choque lentas (Roberts, 1990). En este caso, el esquema (b) introduce una pequeña sobre estimación de la energía interna detrás de la onda de contacto, que es amortiguada por el esquema adaptivo.

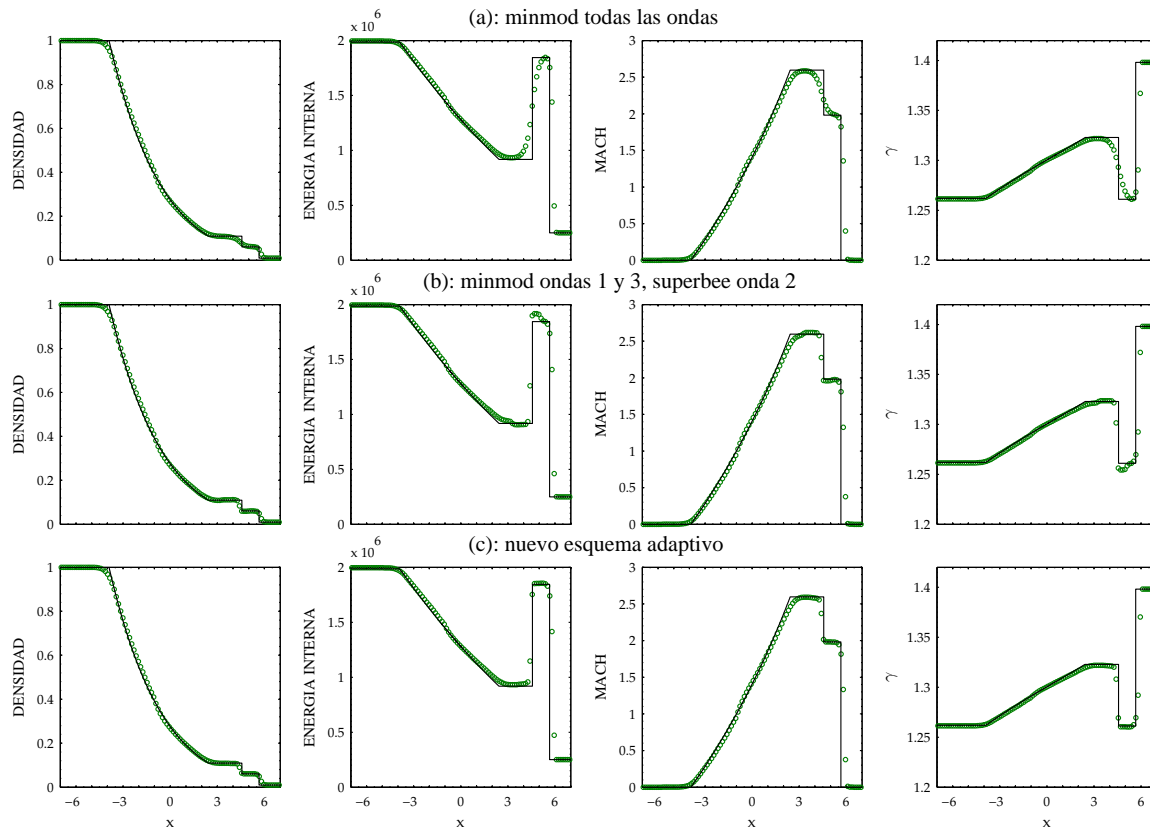


Figura 4.4: Comparación de los esquemas TVD considerando gas en equilibrio químico para el caso de prueba D. Tiempo de salida: 3.2 ms.

4.3. Discusión general

Los experimentos numéricos realizados permiten observar que la función limitadora *superbee*, aplicada únicamente en la onda de contacto, no tiene influencia en la captación de ondas de choque, y mejora significativamente la captación de la discontinuidad de contacto. No obstante, la función *superbee* introduce oscilaciones en regiones vecinas a esta discontinuidad, cuya magnitud y zona de influencia depende de la velocidad e intensidad de la discontinuidad e interacción con otras ondas. Por otra parte, la introducción de la función *superbee* en forma adaptiva logra reducir las oscilaciones, sin perder resolución. Finalmente, se puede concluir que el esquema adaptivo propuesto extendido al caso de gas en equilibrio químico, ha mostrado conservar en los problemas unidimensionales presentados, las propiedades de robustez general y alta resolución en la captación de discontinuidades de contacto, previamente encontradas en flujos con gas calórico perfecto (Falcinelli et al., 2008).

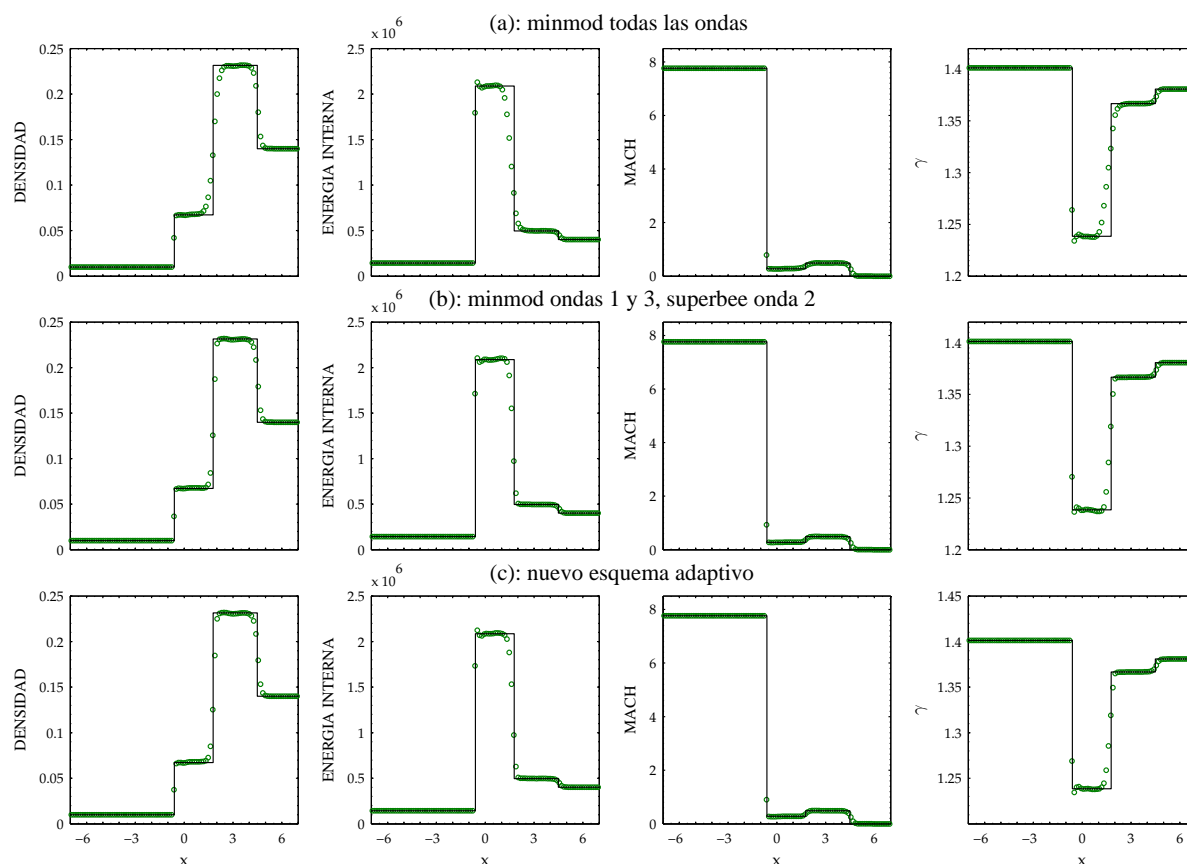


Figura 4.5: Comparación de los esquemas TVD considerando gas en equilibrio químico para el caso de prueba E. Tiempo de salida: 7.0 ms.

5. CONCLUSIONES Y TRABAJO FUTURO

En el presente trabajo se ha extendido el esquema en volúmenes finitos TVD para la solución de las ecuaciones de Euler 1D propuesto en (Falcinelli et al., 2008), al caso donde se considera gas en equilibrio químico. Este esquema, basado en el método *upwind* TVD de Yee (Yee et al., 1985; Yee, 1987b,a), aplica la función limitadora *superbee* en la onda característica linealmente degenerada del problema local de Riemann en las zonas del dominio donde la intensidad de ésta es mayor que la de las ondas no lineales. En caso contrario, se aplica el método original de Yee que utiliza la función limitadora *minmod* en todas las ondas. De esta forma se busca mejorar la captación de las discontinuidades de contacto, a través de la inclusión de funciones compresivas (*superbee*), conservando la robustez general del método que se logra al aplicar funciones limitadoras más difusivas (*minmod*).

La extensión del esquema considerando gas en equilibrio químico, se realizó incluyendo el cálculo del estado termodinámico del gas a través de un programa de la NASA (Gordon y McBride, 1994,1996), el cuál encuentra las condiciones de equilibrio químico minimizando la energía libre de Helmholtz o Gibbs de la mezcla de gases. En la linealización local del problema de Riemann se utilizó el estado promedio de Roe generalizado al caso de gas real, mediante la metodología propuesta por (Vinokur y Montagné, 1990).

Se obtuvieron resultados para cinco problemas de Riemann unidimensionales diseñados especialmente para obtener condiciones donde los efectos de considerar gas en equilibrio químico sean significativos.

Se realizó para cada caso una comparación del esquema adaptivo propuesto con el esquema

original de Yee y un esquema no adaptivo que utiliza la función limitadora *superbee* en la onda linealmente degenerada, en todo el dominio. Todos los resultados se compararon a su vez con la solución pseudo-exacta del problema de Riemann, que se obtiene al resolver las condiciones de Rankine Hugoniot para el choque e integrando numéricamente la ecuación característica en ondas de rarefacción para el caso general de gas real, de acuerdo al procedimiento descrito en (Saurel et al., 1994).

Para todos los casos resueltos, se obtuvo que la inclusión de la función *superbee* mejora significativamente la captación de discontinuidades de contacto. Por otro lado, ésta prácticamente no modifica la captación de ondas no lineales (choque y rarefacción) del esquema original. Se encontró que el esquema adaptivo propuesto reduce en todos los casos las oscilaciones que aparecen en las zonas del dominio vecinas a la onda de contacto, al aplicar la función *superbee* en forma no adaptiva. Esta reducción fue más apreciable en aquellas variables donde la magnitud de las oscilaciones era mayor, producto de las características propias de la onda (intensidad, velocidad e interacción con otras ondas). Se concluye finalmente que la performance de la metodología propuesta conserva sus características cuando se incluye el cálculo del gas en equilibrio químico.

La continuación natural de este trabajo es incluir el cálculo del equilibrio químico en el esquema adaptivo para la solución numérica de las ecuaciones de Euler 2D y 3D, cuya performance ya ha sido estudiada en el caso de gas calórico perfecto (Elaskar et al., 2009). Esto permitiría contar con una herramienta que brinde una estimación más confiable del flujo sobre cuerpos en régimen hipersónico, en los cuales al asumir válida la hipótesis de gas perfecto se obtienen, por ejemplo, significativas sobreestimaciones de la temperatura sobre el cuerpo (Anderson, 1989). Deberá realizarse en esta extensión, un estudio de la influencia del equilibrio químico en la convergencia a la solución estacionaria, así como del incremento del costo computacional que éste representa. Con el fin de reducir el mismo, pueden proponerse métodos aproximados pero menos costosos de calcular las propiedades del equilibrio químico, tales como las curvas de Tannehill (Tannehill y Mugge, 1974), o bien generar una base de datos de variables de estado en equilibrio químico obtenida a través de CEA2, y luego utilizar una interpolación eficiente de los mismos durante el proceso de cálculo.

AGRADECIMIENTOS

A CONICET, MCyT Córdoba y a la UNC por el financiamiento de esta investigación. A Gustavo Scarpín del Instituto Universitario Aeronáutico, por la provisión del programa CEA2 y la subrutina de acoplamiento.

REFERENCIAS

- Anderson J.D. *Hypersonic and High Temperature Gas Dynamics*. McGraw-Hill Book Co., 1989.
- Chase M.W. Janaf thermochemical tables pts. 1 & 2. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, 14:1, 1985.
- C.Hirsch. *Numerical Computation of Internal and External Flows, Vol. 2*. John Wiley & Sons Ltd., 1992.
- Cox C. y Cinnella P. General solution procedure for flows in local chemical equilibrium. *AIAA*, 32:519-527, 1994.
- Elaskar S., Falcinelli O., Tamagno J., y Saldía J. Further applications of scheme for reducing numerical viscosity: 3d hypersonic flow. *Journal of Physics. Conf. Series*, 166:12-18, 2009.

- Falcinelli O., Elaskar S., y Tamagno J. Reducing the numerical viscosity in non structured three-dimensional finite volume computations. *Journal of Spacecraft and Rockets, AIAA*, 45:506–509, 2008.
- Gordon S. y McBride J.B. Computer program for calculation of complex equilibrium compositions and applications. part I (1994) and part II (1996). *NASA RP : 1311*.
- Grossman B. y Walters R.W. Analysis of flux-split algorithms for Euler's equations with real gases. *AIAA*, páginas 87–1117–CP, 1987.
- Harten A. The artificial compression method for computation of shocks and contact discontinuities: III self adjusting hybrid schemes. *Mathematics of Computation*, 32:363–399, 1978.
- Harten A. On a class of high resolution total-variation-stable finite-difference schemes. *Journal of Computational Physics*, 49:357–393, 1983.
- Harten A. y Hyman J.M. Self adjusting grid methods for one-dimensional hyperbolic conservation laws. *Journal of Computational Physics*, 50:235–269, 1983.
- Leveque R. *Numerical Methods for Conservation Law*. Birkäuser Verlag, 1992.
- Liou M.S., Leer B.V., y Shuen J.S. Splitting of inviscid fluxes for real gases. *Journal of Computational Physics*, 87:1–24, 1990.
- Montagné J.L., Yee H.C., Klopfer G.H., y Vinokur M. Hypersonic blunt body computations including real gas effects. *NASA TM*, 100074, 1988.
- Montagné J.L., Yee H.C., y Vinokur M. Comparative study of high-resolution shock-capturing schemes for a real gas. *AIAA Journal*, 27:1332–1346, 1989.
- Mottura L., Vigevano L., y Zaccanti M. An evaluation of Roe's scheme generalizations for equilibrium real gas flows. *Journal of Computational Physics*, 138:354–399, 1997.
- Roberts T.W. The behavior of flux difference splitting schemes near slowly moving shock waves. *Journal of Computational Physics*, 90:141–160, 1990.
- Roe P.L. Approximate Riemann solvers, parameter vectors, and difference schemes. *Journal of Computational Physics*, 43:357–372, 1981.
- Saurel R., Larini M., y Loraud J.C. Exact and approximate Riemann solvers for real gases. *Journal of Computational Physics*, 112:126–137, 1994.
- Scarpín G. Cálculo de las propiedades de mezclas de gases en equilibrio termodinámico. aplicación a flujos no viscosos. *Mecánica Computacional*, páginas 2097–2117, 2005.
- Sweby P. High resolution schemes using flux limiters for hyperbolic conservation laws. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 21:995–1011, 1984.
- Tannehill J.C. y Mugge P.H. Improved curve fits for the thermodynamic properties of equilibrium air suitable for numerical computation using time-dependent or shock-capturing methods. *NASA CR: 2470*, 1974.
- Toro E. *Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics*. Springer-Verlag, 1999.
- Toumi I. A weak formulation of Roe's approximate Riemann solver. *Journal of Computational Physics*, 102:360–373, 1992.
- Vinokur M. y Montagné J.L. Generalized flux-vector splitting and Roe average for an equilibrium real gas. *Journal of Computational Physics*, 89:276–300, 1990.
- Yee H., Warming R., y Harten A. Implicit total variation diminishing (TVD) schemes for steady-state calculations. *Journal of Computational Physics*, 57:327–360, 1985.
- Yee H.C. Construction of explicit and implicit symmetric TVD schemes and their applications. *Journal of Computational Physics*, 68:151–179, 1987a.
- Yee H.C. Upwind and symmetric shock-capturing schemes. *NASA TM*, 89464, 1987b.
- Yee H.C. A class of high-resolution explicit and implicit shock-capturing methods. *NASA TM*, 101088, 1989.