

ACTUALIZACIÓN DEL SOLVER RHOCENTRALRFFOAM Y SU APLICACIÓN AL PROBLEMA DE LA IGNICIÓN POR REFLEXIÓN EN CONFIGURACIÓN FUERTE

ACTUALIZATION OF THE RHOCENTRALRFFOAM SOLVER AND ITS APPLICATION TO THE PROBLEM OF THE STRONG IGNITION CASE BY REFLECTION

Marcelo J. Frias^a, Luis F. Gutiérrez Marcantoni^b y Sergio A. Elaskar^c

^a*Departamento de Aeronáutica, Instituto de Estudios Avanzados en Ingeniería y Tecnología (IDIT), FCEFyN, Universidad Nacional de Córdoba and CONICET, Córdoba, Argentina, marcelo.javier.frias@mi.unc.edu.ar, marcelo.javier.frias@mi.unc.edu.ar*

^b*Facultad de Ingeniería y Ciencias Básicas, Fundación Universitaria los Libertadores, Bogotá 111221, Colombia, luis.gutierrez@libertadores.edu.co, luis.gutierrez@libertadores.edu.co*

^c*Departamento de Aeronáutica, Instituto de Estudios Avanzados en Ingeniería y Tecnología (IDIT), FCEFyN, Universidad Nacional de Córdoba and CONICET, Córdoba, Argentina, selaskar@unc.edu.ar, selaskar@unc.edu.ar*

Palabras clave: Detonaciones, ignición por reflexión, OpenFOAM.

Resumen. En este trabajo se presenta la actualización a la versión más reciente de OpenFOAM del solver rhoCentralRfFoam desarrollado en 2016 para la simulación de procesos detonantes. Además, con la finalidad de validar la presente actualización, ésta se emplea en la simulación de un problema de multi-física determinado por la ignición unidimensional generada por la reflexión de una onda de choque sobre una superficie sólida. Se considera la configuración fuerte en una mezcla de Ar : O₂ : H₂ usando un modelo cinético detallado. Se presentan comparaciones en términos de la evolución del proceso en imágenes Schlieren que permiten observar el fenómeno de reflexión-ignición-detonación, y de parámetros tales como el pico de presión y la velocidad de la onda.

Keywords: Detonations, ignition by reflection, OpenFOAM.

Abstract. This work presents the actualization of the rhoCentralRfFoam solver that was developed in 2016 for the simulation of detonation processes, to the most recent version of OpenFOAM. Besides, this new version of a solver is employed in the simulation of the multi-physics problem of ignition by the reflection of a shock wave on a solid surface in a one-dimensional configuration. It is considered the strong configuration of a mixture of Ar : O₂ : H₂ by using a detailed chemical kinetic model. Comparisons are presented in terms of the process's evolution by a schlieren image that permits a clear description of the reflection-ignition-detonation processes, comparisons for the pressure peak and wave speed are also presented.

1. INTRODUCCIÓN

En el ámbito de las simulaciones numéricas en dinámica de fluidos, OpenFOAM se ha consolidado como una herramienta esencial para la investigación y la práctica en la modelización de flujos complejos. Conforme este software ha evolucionado, ha incorporado mejoras significativas que brindan soluciones numéricas confiables y eficientes para una gran variedad de problemas en ingeniería y ciencias aplicadas. Como resultado, ha surgido la necesidad de mantener en constante actualización aquellos proyectos particulares desarrollados en OpenFOAM tal como `rhoCentralRfFoam`, un solver diseñado para modelar procesos detonantes multi-especies

El presente trabajo tiene como objetivo exponer las características principales identificadas durante el proceso de actualización del código fuente original del solver `rhoCentralRfFoam`, el cual fue desarrollado inicialmente en la versión 2.3.0, hacia la versión 10 de OpenFOAM; así como, comparar los resultados obtenidos con la versión actualizada del solver con los mismos presentados en [Oran et al. \(1982\)](#) y [Im et al. \(2002\)](#).

2. CARACTERÍSTICAS PRINCIPALES ENCONTRADAS EN EL PROCESO DE ACTUALIZACIÓN

A continuación se detallan las modificaciones más significativas identificadas durante la actualización del solver `rhoCentralRfFoam` a la versión 10 de OpenFOAM. Además, se proporciona una breve discusión sobre cómo estas modificaciones afectan la funcionalidad del solver actualizado. Para recabar información, se consultó la documentación oficial de OpenFOAM en su versión 10, accesible en <https://cpp.openfoam.org/v10/>.

2.1. `rhoCentralRfFoam.C`

En el proceso de actualización de `rhoCentralRfFoam` se prescindieron de los siguientes archivos de encabezado.

```
#include "IOobject.H"
#include "DataEntry.H"
#include "OFstream.H"
#include "IOdictionary.H"
#include "dictionary.H"
```

La función principal de `IOobject.H` tanto en la versión 2.3.0 y en la versión 10 es proporcionar funcionalidades relacionadas con la manipulación de objetos de entrada/salida (I/O) en OpenFOAM. Los objetos IO en OpenFOAM son utilizados para administrar la lectura y escritura de datos, como campos de variables, condiciones de frontera y otros datos necesarios para las simulaciones de dinámica de fluidos. En la versión actualizada del solver, esto se hace internamente dentro de la carpeta fuente de OpenFOAM, por lo cuál, resulta preciso prescindir de dicho encabezado.

En concordancia con lo mencionado previamente, el encabezado `'DataEntry.H'` desempeña una función similar. Su uso consiste en incorporar las definiciones relacionadas con las entradas de datos desde archivos y estructuras de datos en OpenFOAM.

Si bien, tanto `DataEntry.H` como `IOobject.H` son archivos de encabezado que están relacionados con la manipulación de datos, éstos tienen propósitos ligeramente diferentes en el contexto de la plataforma. La diferencia principal entre uno y otro es que `IOobject.H` está más relacionado con la administración y manipulación de objetos, proporcionando clases y funciones para manejarlos, leerlos y escribirlos desde y hacia archivos. Mientras que `DataEntry.H` está relacionado con la manipulación y acceso a los datos de entrada en OpenFOAM, ayudando a administrar la configuración y los parámetros necesarios para una simulación, lo que puede incluir valores numéricos, configuraciones de malla, propiedades del fluido, condiciones de

frontera, etc.

A partir de la versión 4 de OpenFOAM, el archivo de cabecera `DataEntry.H` se redefine a `Function1.H` y de la misma manera que sucedía con el header anterior, se puede prescindir ya sea de `DataEntry.H` en la versión original o bien de `Function1.H` en la versión actual, ya que su declaración se hace internamente dentro de la carpeta fuente de OpenFOAM.

Por otro lado, en el archivo de encabezado `OFstream.H`, se encuentra la definición de la clase `OFstream` que tiene aplicaciones en la escritura de archivos en OpenFOAM. Esta definición otorga capacidades que permiten gestionar archivos y escribir información, incluyendo características extras para administrar archivos comprimidos y la opción de agregar contenido adicional. Nuevamente, por realizarse la definición de la clase internamente en la carpeta fuente de la plataforma, se prescinde de su uso en la versión actualizada.

Seguidamente, tanto los archivos de encabezado `IOdictionary.H` y `dictionary.H` están relacionados con la manipulación y gestión de diccionarios, los cuales son estructuras de datos utilizadas para configurar y definir parámetros en simulaciones. Sin embargo, desde el punto de vista funcional, existen algunas diferencias claves entre estos dos archivos. El header `IOdictionary.H` está relacionado con la manipulación de entrada/salida de diccionarios, mientras que `dictionary.H` se enfoca en la manipulación de datos dentro de los diccionarios. Al igual que los casos anteriores se omite la inclusión de estos dos archivos de encabezados por estar incorporado internamente en OpenFOAM.

Una situación particular sucede con la inclusión del siguiente header en la versión original

```
#include "psiCombustionModel.H"
```

ya que a medida que OpenFOAM se ha ido actualizando a lo largo de sus distintas versiones, dicho archivo de encabezado se fue dividiendo de tal forma que sus funcionalidades se han repartidos en diversos headers individuales. La primera división se observa en la versión 6 de la plataforma, en dónde las funcionalidades de `psiCombustionModel.H` se distribuyen en los archivos de encabezado `CombustionModel.H` y `psiReactionThermo.H`. En el primero se define de forma general el modelo de combustión que se debe aplicar, mientras que en el segundo se define cómo se calculan y manejan las propiedades termodinámicas, como la entalpía, la temperatura, los coeficientes de equilibrio y otras propiedades relacionadas con las reacciones químicas. El segundo cambio importante ocurre en la versión 8, donde la función originalmente desempeñada por `psiReactionThermo.H` para definir el modelo de transporte termofísico en flujos con actividad química se traslada al archivo de encabezado `psiReactionThermophysicalTransportModel.H`.

En la versión 10, estos archivos de encabezado cambian su nombre a

```
fluidReactionThermo.H  
fluidReactionThermophysicalTransportModel.H
```

respectivamente. Del mismo modo

```
#include "turbulenceModel.H"
```

encabezado que describe las capacidades del modelo de turbulencia experimenta un cambio en su nombre en la versión más reciente, siendo renombrado como

```
compressibleMomentumTransportModels.H
```

Por otro lado, la inclusión de

```
#include "fvIOoptionList.H"
```

facilita el acceso a las definiciones y características vinculadas al sistema de opciones numéricas (`fvOption`). Esto permite la configuración y control de parámetros numéricos específicos en las simulaciones. En la versión 10 de OpenFOAM, estas funcionalidades se extienden a través de dos encabezados, denominados `fvModels.H` y `fvConstraints.H`. Donde `fvModels.H` proporciona métodos para calcular fuentes en ecuaciones de transporte, verificar la aplicación

correcta de modelos, preparar la malla para actualizaciones, gestionar la lectura y escritura de datos en archivos, y realizar correcciones y actualizaciones en los modelos; mientras que `fvConstraints.H` brinda métodos para verificar la aplicación de restricciones a campos específicos, aplicar restricciones a ecuaciones y campos, y llevar a cabo actualizaciones de la malla relacionadas con estas restricciones.

2.2. createFields.H

Este es un archivo de encabezado que se encuentra por defecto de la mayor parte de los solucionadores presentes en OpenFOAM y en el que se definen funciones, macros, estructuras de datos u otras definiciones que están relacionadas con la creación, inicialización o manipulación de campos (variables) utilizados en simulaciones de dinámica de fluidos.

Particularmente, los cambios llevados a cabo en la actualización de `rhoCentralRfFoam` están relacionados con la forma de inicializar las propiedades termodinámicas, el modelo de transporte termofísico y el modelo de reacción. En la versión 2.3.0 todo esto se hace directamente como se muestra a continuación

```
Info<< "Creating reaction model\n" << endl;
autoPtr<combustionModels::psiCombustionModel> reaction
(
    combustionModels::psiCombustionModel::New(mesh)
);

psiReactionThermo& thermo = reaction->thermo();
```

Por otro lado, en la versión 10, debido a que `psiCombustionModel.H` se fragmentó, es necesario realizar estos pasos de manera separada, utilizando las clases, objetos y archivos de encabezado adecuados. La inicialización de las propiedades termofísicas en la versión actualizada se realiza de la siguiente manera:

```
Info<< "Reading thermophysical properties\n" << endl;
autoPtr<fluidReactionThermo> pThermo(fluidReactionThermo::New(mesh));

fluidReactionThermo& thermo = pThermo();
```

En cuanto al modelo termofísico, su inicialización se realiza mediante el siguiente código

```
Info<< "Creating thermophysical transport model\n" << endl;
autoPtr<fluidReactionThermophysicalTransportModel>thermophysicalTransport
(
    fluidReactionThermophysicalTransportModel::New(turbulence(), thermo)
);
```

Por último, el modelo de reacción se inicializa de la siguiente manera

```
Info<< "Creating reaction model\n" << endl;
autoPtr<combustionModel> reaction(combustionModel::New(thermo, turbulence()));
```

Otro aspecto destacado que merece comentario es la omisión en la versión actualizada del solucionador de la siguiente línea de código:

```
word inertSpecie(thermo.lookup("inertSpecie"));
```

Esta porción del código se emplea para recuperar la especie química inerte en el objeto `thermo` y asignarla a la variable `inertSpecie`.

3. EVALUACIÓN DE LA VERSIÓN ACTUALIZADA DE rhoCentralRfFoam Y COMPARACIÓN CON LOS RESULTADOS OBTENIDOS DE INVESTIGACIONES ANTERIORES

Como tarea final en este proyecto, se procede a examinar el funcionamiento adecuado de la versión actualizada del solucionador rhoCentralRfFoam. Se compara la información resultante con los resultados presentados en los artículos de Oran et al. (1982) y Im et al. (2002). El caso de prueba para evaluar el correcto desempeño de la actualización que se ha desarrollado, corresponde a la ignición fuerte descrita en Oran et al. (1982) y que fue testada en Gutiérrez Marcantoni et al. (2016) en el que se introdujo la primera versión de rhoCentralRfFoam. En este caso, se usa una malla con 6000 celdas, se aplica concentración de celdas sobre la pared de reflexión con un factor de concentración de 25 y el dominio espacial tiene 40 cm de longitud. La configuración geométrica de la prueba se puede observar en la Fig. 1. Los detalles característicos de la modelización matemática de las ecuaciones gobernantes y de los métodos empleados para su resolución numérica están disponibles para su consulta en la referencia Moukalled et al. (2015).

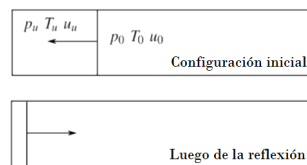


Figura 1: Configuración inicial de la prueba

Las condiciones de onda incidente y de gas sin perturbar son

	Gas sin pert.	Onda incidente
p	6687,54 [Pa]	36679,65 [Pa]
U	0 [m/s]	-476 [m/s]
T	298,15 [K]	621 [K]

Tabla 1: Condiciones iniciales.

La mezcla corresponde a $2\text{H}_2:\text{O}_2:7\text{AR}$ y la discontinuidad inicial se ubica a 10 [cm] del borde izquierdo. El modelo cinético utilizado es el de Marinov.

En la Fig.2 se presentan los resultados obtenidos para la variación de la presión máxima del sistema así como la velocidad del fluido a 1 [mm] de la pared reflectante. Se exponen los resultados presentados en (a) Oran et al. (1982), en (b) Im et al. (2002) y los mismos obtenidos producto de la actualización de rhoCentralRfFoam.

En la Fig.3 se muestra la comparación de las posiciones de la onda de choque reflejada, la onda de reacción, la detonación transmitida y la discontinuidad de contacto. Estas dos últimas se forman cuando la onda de choque reflejada se fusiona con la onda de reacción. Al igual que en la figura anterior, se exhiben los resultados presentados en (a) Oran et al. (1982), en (b) Im et al. (2002) y los mismos obtenidos producidos a partir de la actualización de rhoCentralRfFoam a la versión 10 de OpenFOAM.

En la Fig.4 se visualizan: (a) Una fotografía schlieren obtenida a partir de Oran et al. (1982) y (b) el plano físico de la situación descrita en la Tabla 1 calculado mediante la versión actualizada de rhoCentralRfFoam.

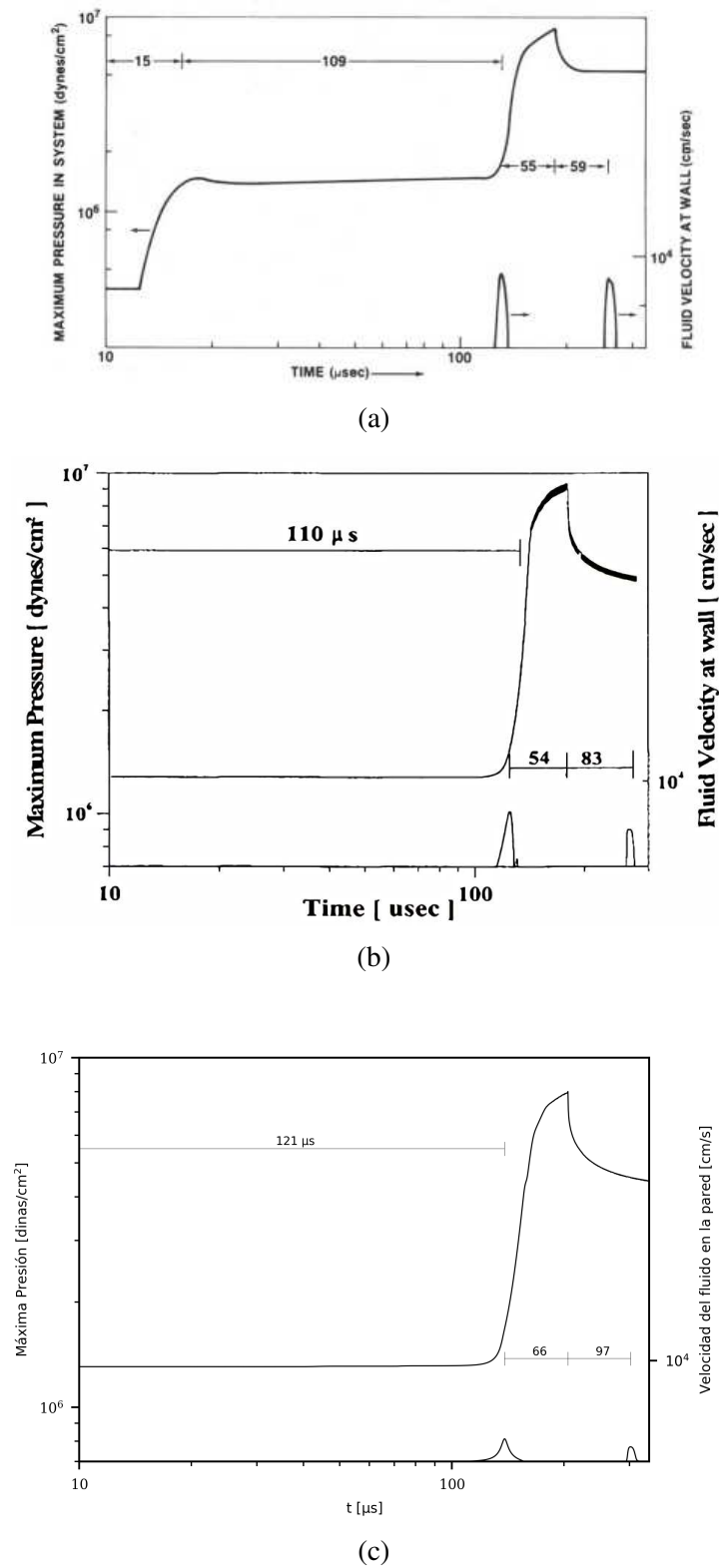
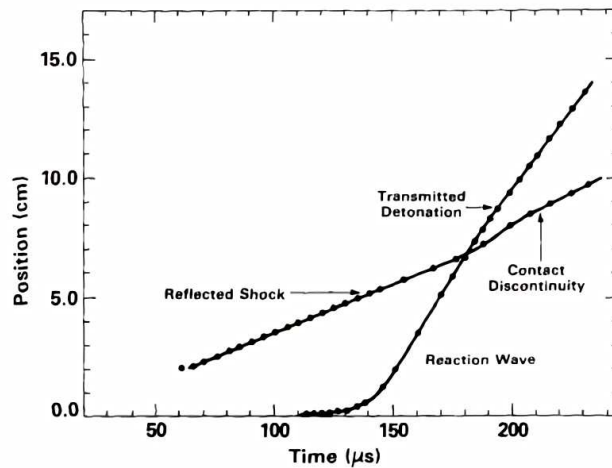
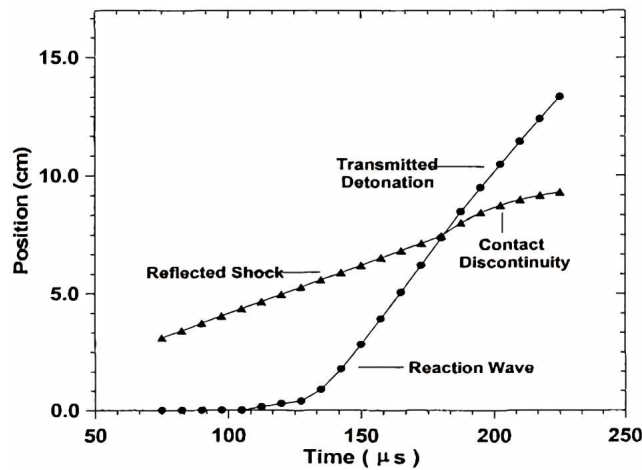


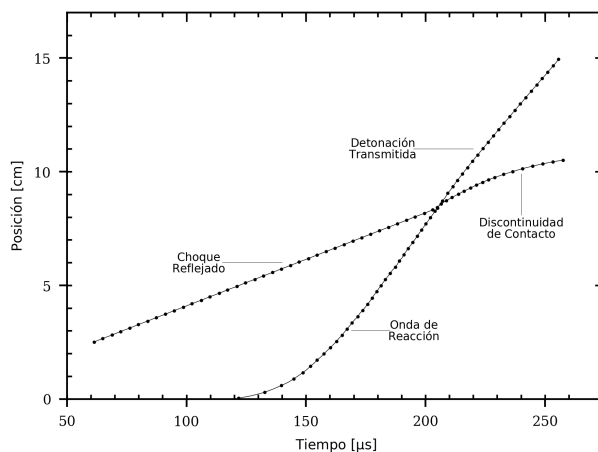
Figura 2: Comparación entre los resultados numéricos obtenidos para la presión máxima en el sistema y la velocidad del fluido a 1 [mm] de la pared reflectante proporcionados (a) en [Oran et al. \(1982\)](#), (b) en [Im et al. \(2002\)](#) y (c) por la actualización de rhoCentralRfFoam



(a)

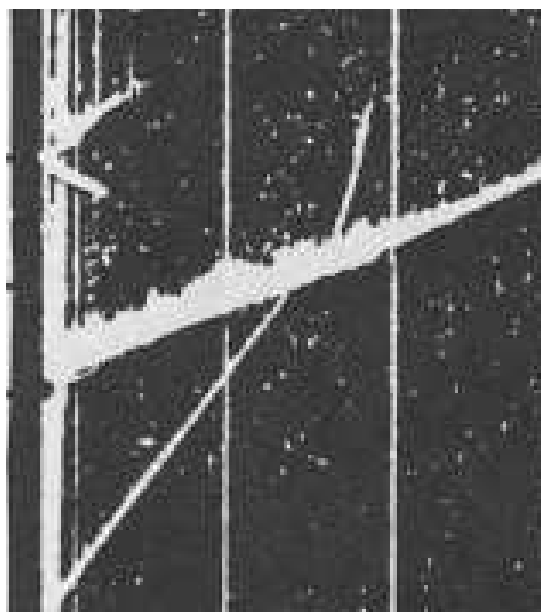


(b)

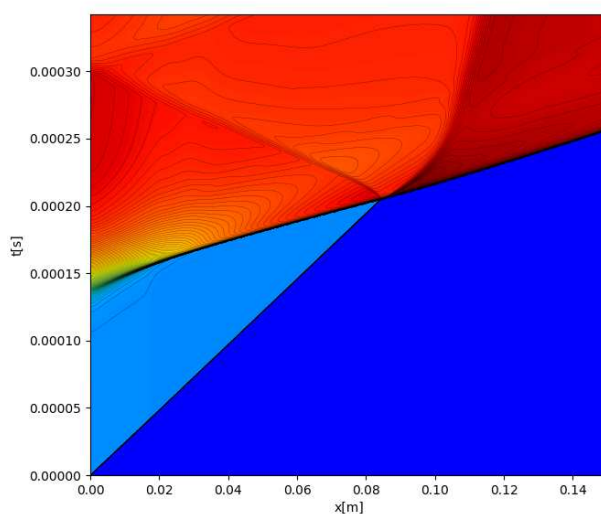


(c)

Figura 3: Posición calculada de la onda de choque reflejada, la onda de reacción, la detonación transmitida y la discontinuidad de contacto como función del tiempo: (a) Resultados de Oran et al. (1982), (b) de Im et al. (2002) y (c) los obtenidos por la actualización de rhoCentralRfFoam.



(a)



(b)

Figura 4: (a) Fotografía schlieren obtenida a partir de [Oran et al. \(1982\)](#). (b) Plano físico calculado por la versión actualizada de `rhoCentralRfFoam`

4. CONCLUSIONES

En relación a las representaciones gráficas presentadas en las Figs. 2, 3 y 4 se puede observar que cualitativamente los resultados calculados por la versión actualizada de `rhoCentralRfFoam` concuerdan satisfactoriamente con los proporcionados previamente por [Oran et al. \(1982\)](#) y [Im et al. \(2002\)](#). No obstante, surgen notables discrepancias en la cuantificación de éstos. Particularmente, el tiempo de reacción calculado por la versión actualizada del solver se estima en 121 [μ s], en contraste con los valores de 109-110 [μ s] reportados en [Oran et al. \(1982\)](#) e [Im et al. \(2002\)](#) (Fig. 2). Asimismo, se observa que los pulsos de velocidad calculados por esta ver-

sión exhiben amplitudes considerablemente menores que los datos presentados en la literatura especializada.

Aunque los valores numéricos de las velocidades de las ondas calculadas concuerdan con las referencias de Oran et al. (1982) y Im et al. (2002), las ubicaciones espacio-temporales de la reflexión de la onda incidente y la unión de las ondas de reacción y el choque reflejado difieren de las descritas en la bibliografía (Fig. 3). Estas discrepancias pueden atribuirse al modelo cinético empleado en la versión actualizada del solver, el cual difiere del utilizado en Oran et al. (1982) e Im et al. (2002).

A pesar de las diferencias mencionadas con anterioridad, es posible concluir que la actualización de rhoCentralRfFoam a la versión 10 de OpenFOAM ha sido exitosa, ya que logra capturar la estructura de ondas detallada en el proceso de detonación por reflexión de un choque incidente (Fig. 4).

REFERENCIAS

- Gutiérrez Marcantoni L., Tamagno J., y Elaskar S. rhocentralrffoam: An openfoam solver for high speed chemically active flows – simulation of planar detonations –. 219:209–222, 2016.
- Im K.S., Jhon S.T., Kim C.K., Chang S.C., y Jorgenson C. Application of the cese method to detonation with realistic finite-rate chemistry. *American Institute of Aeronautics & Astronautics*, 40, 2002.
- Moukalled F., Mangani L., y Darwish M. *The Finite Volume Method in Computational Fluid Dynamics*, volumen I. Alemania:Springer International Publishing, 2015.
- Oran E., Young T., y Boris J. Weak and strong ignition. i. numerical simulations of shock tube experiments. *Computer Physics Communications*, 48:135–148, 1982.