

## ANÁLISIS DEL TRATAMIENTO DEL FLUJO NUMÉRICO EN LA ECUACIÓN DE LAS ESPECIES Y SU EFECTO EN LA ESTABILIDAD DE LAS SOLUCIONES EN RHOCENTRALRFFOAM

### ANALYSIS OF THE NUMERICAL FLUX TREATMENT IN THE SPECIES EQUATION AND ITS IMPACT ON SOLUTION STABILITY IN RHOCENTRALRFFOAM

Marcelo Frias<sup>a,b</sup>, Luis Gutiérrez Marcantoni<sup>a</sup>, Sergio Elaskar<sup>a,b</sup> y Juan Colman<sup>a,b</sup>

<sup>a</sup>Departamento de Ingeniería Aeroespacial, Facultad de Ciencias Exactas Físicas y Naturales,  
Universidad Nacional de Córdoba, Córdoba, Argentina.

<sup>b</sup>Instituto de Estudios Avanzados en Ingeniería y Tecnología, Facultad de Ciencias Exactas Físicas y  
Naturales, Universidad Nacional de Córdoba y CONICET, Córdoba, Argentina.

**Palabras clave:** Flujos Químicamente Reactivos, Ecuaciones de Transporte de las Especies, rhoCentralRfFoam.

**Resumen.** El solucionador rhoCentralRfFoam, basado en rhoCentralFoam (OpenFOAM), está diseñando para resolver las ecuaciones de Euler para flujos compresibles químicamente reactivos con modelos de reacción detallados. A diferencia del solver base, este incorpora la resolución de las ecuaciones de transporte de las especies químicas. Al emplear una formulación central-upwind explícita, la definición del flujo numérico en dichas ecuaciones resulta crítica, ya que condiciona directamente la estabilidad y precisión de las soluciones. En este trabajo se analizan dos estrategias para su cálculo: (i) la multiplicación del flujo volumétrico por la variable conservada ( $\rho Y$ ), tratada como una única magnitud, y (ii) la multiplicación del flujo volumétrico por las variables primitivas correspondientes, la densidad ( $\rho$ ) y la fracción molar ( $Y$ ), consideradas por separado. El objetivo de este trabajo es evaluar el impacto de ambas formulaciones sobre la estabilidad y consistencia física de las soluciones, con el fin de identificar el enfoque más preciso y estable.

**Keywords:** Chemically Reactive Flows, Species Transport Equations, rhoCentralRfFoam.

**Abstract.** The rhoCentralRfFoam solver, based on rhoCentralFoam (OpenFOAM), is designed to solve the Euler equations for chemically reactive compressible flows with detailed reaction models. Unlike the base solver, it includes the solution of the chemical species transport equations. By employing an explicit central-upwind formulation, the definition of the numerical flux in these equations becomes critical, as it directly influences the stability and accuracy of the solutions. This study analyzes two strategies for its computation: (i) multiplying the volumetric flux by the conserved variable ( $\rho Y$ ), treated as a single quantity, and (ii) multiplying the volumetric flux by the corresponding primitive variables, density ( $\rho$ ) and mass fraction ( $Y$ ), considered separately. The objective of this work is to evaluate the impact of both formulations on the stability and physical consistency of the solutions, in order to identify the most accurate and stable approach.

## 1. INTRODUCCION

El estudio de los flujos químicamente reactivos a alta velocidad es fundamental en aplicaciones relacionadas con detonaciones, sistemas de propulsión y, especialmente, en la evaluación de riesgos y la seguridad frente a explosiones. Modelar adecuadamente este tipo de fenómenos requiere resolver con precisión las ecuaciones fundamentales que los gobiernan: las ecuaciones de Euler reactivas. A diferencia de su versión no reactiva, estas ecuaciones incluyen términos adicionales que describen el transporte y la evolución de las especies químicas presentes en la mezcla combustible (Kee et al., 2017).

En este contexto, rhoCentralRffFoam se presenta como un solucionador derivado de rhoCentralFoam, el solucionador por defecto de OpenFOAM basado en densidad, adaptado para integrar las ecuaciones de Euler reactivas. Su desempeño numérico ha sido evaluado en (Gutiérrez Marcantoni et al., 2017a,b, 2019), y su portabilidad actualizada según lo reportado en (Frias et al., 2023). En su versión actual, el solucionador utiliza el esquema SSPRK (Strong Stability Preserving Runge-Kutta) de tercer orden y tres etapas (Shu y Osher, 1988) para la discretización del término transitorio, y el esquema Kurganov-Noelle-Petrova (KNP) de segundo orden (Kurganov et al., 2001) para el término convectivo. Además, incorpora la técnica de partición de operadores de primer orden, implementada en los solucionadores químicos nativos de OpenFOAM y conocida como *OpenFOAM splitting* (Zhou et al., 2022).

El tratamiento del término convectivo constituye un aspecto crítico al trabajar con esquemas centrados en flujos compresibles. El esquema numérico debe considerar no solo el transporte de propiedades llevado a cabo por el flujo, sino también el efecto de las ondas presentes, para evitar inestabilidades en las soluciones (Toro, 2013). Sin embargo, la forma en que se calcula la cantidad transportada, utilizada posteriormente en el flujo de cálculo del esquema centrado, ha sido descrita de manera limitada por (Greenshields et al., 2010), quien menciona problemas de acotación en la temperatura al construir interpolaciones de la energía total a partir de la propia energía total en la implementación de rhoCentralFoam.

Este trabajo presenta un estudio comparativo que evalúa dos formas naturales de definir las densidades de las especies para construir las interpolaciones utilizadas en la resolución del término convectivo: una consiste en emplear directamente la densidad de cada especie,  $\rho Y_i$ ; la otra, en considerar por separado la densidad total  $\rho$  y la fracción de masa  $Y_i$  de cada especie.

El método de evaluación se basa en el análisis de dos métricas: la fracción de masa conjunta de las especies reactivas, definida como la suma punto a punto de todas las especies que participan activamente en la reacción y que, en mezclas combustibles homogéneas, idealmente permanece constante en todo el dominio y en todo instante de tiempo; y la fracción de masa de la especie inerte, que presenta la misma propiedad. Estas cantidades se comparan con los valores teóricos en cada punto del dominio, y la desviación respecto a dichos valores ideales se cuantifica mediante la norma del error  $L_2$ , proporcionando así una medida global del error en cada instante.

## 2. METODOLOGIA

En la presente sección se describen las herramientas empleadas para alcanzar los objetivos de este trabajo. Además, se ofrece una breve descripción del modelo de resolución interna implementado en rhoCentralRffFoam, destacando los aspectos relevantes para la interpolación de las densidades de las especies, el tratamiento del término convectivo y la descripción matemática de las ecuaciones de Euler reactivas.

## 2.1. Ecuaciones de Euler Reactivas

Las ecuaciones de Euler reactivas representan un conjunto de ecuaciones de gobierno que describen el flujo de alta velocidad de mezclas combustibles. De manera general, estas ecuaciones se pueden expresar como:

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{F}(\mathbf{U}) = \mathbf{S}(\mathbf{U}) \quad (1)$$

donde  $\mathbf{U}$  es el vector de variables de estado,  $\mathbf{F}(\mathbf{U})$  es el vector de flujo convectivo y  $\mathbf{S}(\mathbf{U})$  es el vector de términos fuente. Estos vectores se definen como:

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho w \\ \rho E \\ \rho Y_1 \\ \vdots \\ \rho Y_N \end{bmatrix}, \quad \mathbf{F}(\mathbf{U}) = \begin{bmatrix} \rho u & \rho v & \rho w \\ \rho u^2 + p & \rho uv & \rho uw \\ \rho uv & \rho v^2 + p & \rho vw \\ \rho uw & \rho vw & \rho w^2 + p \\ u(\rho E + p) & v(\rho E + p) & w(\rho E + p) \\ \rho u Y_1 & \rho v Y_1 & \rho w Y_1 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ \rho u Y_K & \rho v Y_K & \rho w Y_K \end{bmatrix}, \quad \mathbf{S}(\mathbf{U}) = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \dot{\omega}_T \\ \dot{\omega}_1 \\ \vdots \\ \dot{\omega}_N \end{bmatrix}. \quad (2)$$

Aquí,  $\rho$  es la densidad del fluido;  $u, v, w$  son las componentes de la velocidad en las direcciones  $x, y, z$ , respectivamente;  $E$  es la energía total por unidad de masa;  $p$  es la presión;  $Y_k$  es la fracción de masa de la especie química  $k$ ;  $\dot{\omega}_T$  representa la tasa de generación o consumo de energía debido a reacciones químicas; y  $\dot{\omega}_k$  es la tasa de producción o consumo de la especie química  $k$ .

Si se asume que cada especie química en la mezcla combustible se comporta como un gas ideal, el sistema de Eqs. (2) puede cerrarse mediante la adición de la ecuación de estado de los gases ideales:

$$p = \rho \frac{R_u}{\bar{W}} T, \quad \bar{W} = \left( \sum_{k=1}^N \frac{Y_k}{W_k} \right)^{-1} \quad (3)$$

donde  $T$  es la temperatura,  $W_k$  la masa molar de la especie  $k$ ,  $\bar{W}$  la masa molar promedio de la mezcla, y  $R_u$  la constante universal de los gases.

## 2.2. Discretización del término convectivo

Cada término convectivo presente en el sistema de Eqs. (2) puede integrarse sobre el volumen de control y linealizarse de la siguiente manera:

$$\int_V \nabla \cdot [\mathbf{u} \Psi] dV = \int_S d\mathbf{S} \cdot [\mathbf{u} \Psi] \approx \sum_f S_f \cdot \mathbf{u}_f \Psi_f = \sum_f \phi_f \Psi_f \quad (4)$$

donde  $\mathbf{u}$  es el vector velocidad,  $\Psi$  representa la cantidad transportada,  $S_f$  es el vector área de la cara  $f$  del volumen de control,  $\sum_f$  denota la suma sobre todas las caras, y  $\phi_f = S_f \cdot \mathbf{u}_f$  corresponde al flujo volumétrico a través de la cara  $f$ .

Dada la naturaleza compresible del problema en estudio, las interpolaciones en las caras, expresadas en la ecuación (4), deben realizarse con cuidado para evitar inestabilidades en la

solución. Para ello, es necesario considerar el transporte en todas las direcciones, debido a la propagación de ondas. Al tener en cuenta este transporte, el procedimiento de interpolación divide la contribución superficial según las dos direcciones del flujo, hacia afuera y hacia adentro de la celda, en el contexto unidimensional, de manera que:

$$\sum_f \phi_f \Psi_f = \sum_f [\alpha \phi_{f+} \Psi_{f+} + (1 - \alpha) \phi_{f-} \Psi_{f-} + \omega_f (\Psi_{f-} - \Psi_{f+})], \quad (5)$$

donde la dirección  $f+$  coincide con  $+S_f$ , mientras que  $f-$  corresponde a  $-S_f$ , y  $\alpha$  es un coeficiente que introduce un sesgo según la dirección upwind en el cálculo. Los dos primeros términos en el lado derecho de la ecuación (5) representan la evaluación del flujo en las direcciones  $f+$  y  $f-$ , respectivamente. El último término se introduce únicamente cuando el término convectivo forma parte de una derivada sustancial,  $\nabla \cdot [\mathbf{u}(\rho\mathbf{u})]$ , y corresponde a un término de difusión numérica adicional asociado al flujo volumétrico  $\omega_f$ , que se emplea para estabilizar la interpolación en presencia de gradientes pronunciados. Para el esquema KNP, OpenFOAM calcula estas cantidades considerando que:

$$\begin{aligned} a_{f+} &= \max(c_{f+} |S_f| + \phi_{f+}, c_{f-} |S_f| + \phi_{f-}, 0), \\ a_{f-} &= \max(c_{f+} |S_f| - \phi_{f+}, c_{f-} |S_f| - \phi_{f-}, 0), \end{aligned} \quad (6)$$

donde  $a_{f+}$  y  $a_{f-}$  son las velocidades del sonido en las direcciones  $f+$  y  $f-$ , ponderadas por la superficie de la cara, y  $c_{f\pm} = \sqrt{\gamma \frac{R_u}{W} T_{f\pm}}$  son las velocidades del sonido en la cara  $f$  en las direcciones  $f+$  y  $f-$ , respectivamente, siendo  $\gamma$  la relación de calores específicos de la mezcla combustible. De este modo, se define:

$$\alpha = \frac{a_{f+}}{a_{f+} + a_{f-}} \quad (7)$$

y el flujo volumétrico difusivo se calcula como:

$$\omega_f = \alpha(1 - \alpha) (a_{f+} + a_{f-}). \quad (8)$$

El procedimiento de interpolación de la variable  $\Psi$  emplea una función limitadora de flujo  $\beta(r)$  perteneciente a la familia de esquemas *Total Variation Diminishing* (TVD), capaz de ajustar su valor para modificar el orden del esquema (entre primero y segundo orden) en función de la relación de gradientes sucesivos  $r$ , la cual permite detectar la presencia de gradientes pronunciados.

En particular, la interpolación en la dirección  $f+$  se expresa como:

$$\Psi_{f+} = (1 - g_{f+}) \Psi_P + g_{f+} \Psi_N \quad (9)$$

donde  $\Psi_P$  es el valor de la variable en la celda propietaria,  $\Psi_N$  el valor en la celda vecina, y  $g_{f+} = \beta(r)(1 - w_f)$ . En este contexto,  $w_f$  es un factor geométrico que ajusta la interpolación entre celdas.

Cuando  $\beta(r) = 0$ , se obtiene una interpolación *upwind* de primer orden; cuando  $\beta(r) = 1$ , se recupera la interpolación lineal de segundo orden; en general,  $0 \leq \beta(r) \leq 2$ , de modo que  $\beta(r) = 2$  corresponde a una interpolación *downwind*. En la práctica,  $\beta(r)$  se define mediante funciones limitadoras TVD simétricas, que permiten combinar estabilidad numérica con resolución precisa de gradientes.

### 2.3. Métricas

Al discretizar el término convectivo de las ecuaciones de conservación de las especies químicas según la expresión (4), es posible establecer dos formas naturales de describir la cantidad que se transporta:

$$1) \quad \Psi f = \rho_f (Y_i)_f \quad \text{o bien} \quad 2) \quad \Psi_f = (\rho Y_i)_f. \quad (10)$$

Para evaluar el desempeño numérico de `rhoCentralRfFoam` frente a estas dos formas de calcular la densidad parcial de la especie  $i$  en los límites intercelas, se seleccionan dos métricas: la primera corresponde a la fracción de masa conjunta de las especies reactivas, definida como la suma punto a punto de todas las especies químicas que participan activamente en el proceso químico; la segunda corresponde a la fracción de masa de la especie inerte presente en la mezcla reactiva.

En una mezcla combustible homogéneamente distribuida a lo largo de todo el dominio físico, estas métricas conservan sus valores iniciales punto a punto en cada instante de tiempo. Esto permite emplear su desviación respecto al valor ideal como un indicador del error numérico introducido por el solucionador al aplicar cualquiera de los enfoques establecidos en la ecuación (10). La magnitud de este error se cuantifica mediante la norma  $L_2$  de la siguiente manera:

$$\|e\|_2 = \left( \sum_{j=1}^N |Y_j - Y_{h,j}|^2 \right)^{1/2}, \quad (11)$$

donde  $Y_j$  representa el valor exacto de la métrica en el nodo  $j$ ,  $Y_{h,j}$  corresponde al valor aproximado, obtenido numéricamente, en el mismo punto, y  $N$  es el tamaño de la malla en estudio.

## 3. RESULTADOS

En esta sección se presentan los resultados del estudio comparativo, en el que se evaluaron las dos formas de calcular el flujo intercela en la discretización de las ecuaciones de balance de las especies químicas (ec. 10) mediante las métricas definidas y resumidas en cada instante de tiempo según la ecuación (11). Además, se describe el caso de prueba empleado, necesario para realizar los cálculos con ambas versiones del `rhoCentralRfFoam`.

### 3.1. Ignición por reflexión de onda de choque en régimen fuerte

Como caso de prueba para evaluar el desempeño numérico del solucionador frente a los dos enfoques presentados previamente, se seleccionó el problema de ignición por reflexión de onda de choque en régimen fuerte, descrito en [Oran et al. \(1982\)](#), cuyas condiciones iniciales se muestran en la Tabla 1.

El caso analizado corresponde a un tubo de detonación unidimensional con un extremo cerrado y el otro habilitado para la reposición continua de la mezcla fresca  $H_2-O_2-AR$  en proporción estequiométrica. Inicialmente coexisten dos estados termomecánicos distintos, el estado no perturbado y el estado incidente, separados por un diafragma. Al romperse el diafragma, se genera el patrón de ondas característico del problema de Riemann. Una onda de choque intensa, denominada onda incidente, se desplaza hacia la pared cerrada del extremo izquierdo del tubo. Al alcanzarla, se produce la reflexión de la onda, momento en el cual invierte su sentido y pasa a denominarse onda reflejada.

Variable	No perturbado	Incidente	Reflejado
Temperatura	298 [K]	621 [K]	1036 [K]
Presión	6687.45 [Pa]	36679.65 [Pa]	131722.5 [Pa]
Velocidad del fluido	0 [m/s]	476 [m/s]	—
Velocidad de onda de choque	—	754 [m/s]	450 [m/s]

Tabla 1: Condiciones iniciales de los estados: No perturbado, Incidente y Reflejado.

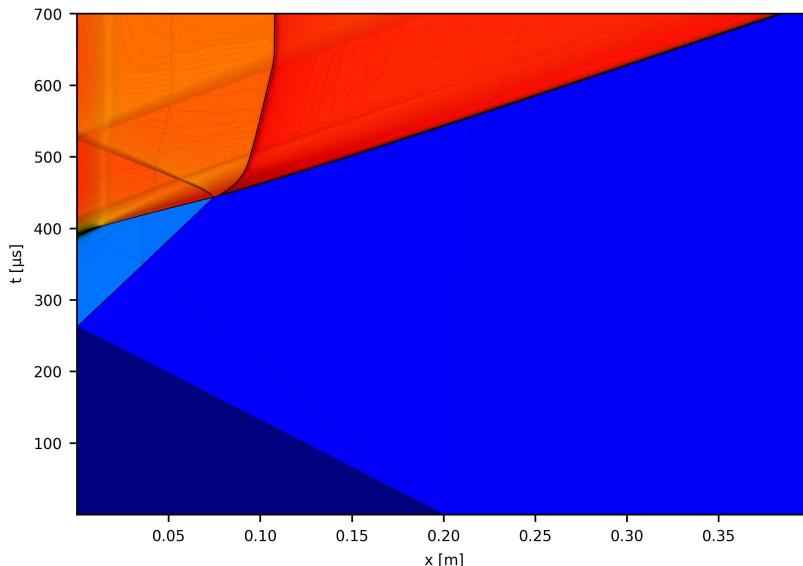


Figura 1: Lineas de contorno constante de temperatura en el plano físico.

Las simulaciones de prueba se llevaron a cabo en un dominio espacial de 40 cm y un tiempo final de  $700 \mu\text{s}$ . La malla numérica se conformó por 32000 elementos. Se empleó un número de Courant máximo de 0.05 con el fin de minimizar las oscilaciones espurias generadas por la interacción entre la refinación de la malla y la discretización numérica. La discontinuidad inicial se ubicó a 20 cm de la pared reflectante. Para el cálculo de los flujos intercelas se utilizó el limitador vanAlbada en todos los campos interpolados, mientras que la cinética química detallada se evaluó mediante el modelo propuesto por Oran [Oran et al. \(1982\)](#).

### 3.2. Fracción de masa conjunta de las especies reactivas

La figura 2 muestra la evolución temporal de la norma  $L_2$  del error para la fracción de masa conjunta de las especies reactivas. Las curvas corresponden al enfoque 1 (en negro) y al enfoque 2 (en rojo), según la definición de la ecuación (10). Se incluye además un zoom que permite apreciar las pequeñas variaciones presentes en las curvas. Ambas gráficas emplean escala logarítmica en el eje de ordenadas para facilitar la visualización de los valores más pequeños de la métrica.

Se observa que ambos enfoques presentan inicialmente la misma evolución en la norma del error, manteniendo valores idénticos hasta aproximadamente  $284,5 \mu\text{s}$ . Para tiempos mayores, el enfoque 2 muestra un aumento significativo en la magnitud del error en comparación con el enfoque 1. En este régimen temporal se hace evidente la diferencia entre ambos métodos, lo cual evidencia una pérdida de precisión en la resolución de las ecuaciones de transporte de las especies asociada a la forma en que las variables reactivas transportadas se discretizan en los

límites interceldas.

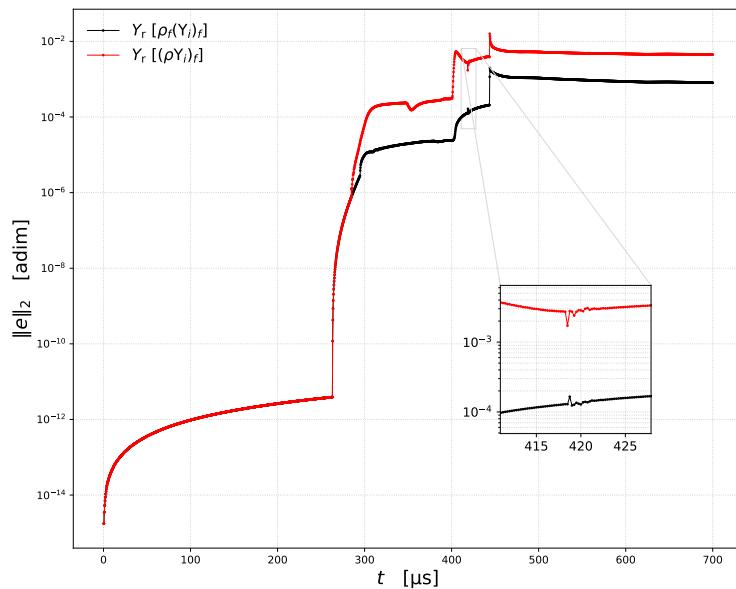


Figura 2: Variación temporal de la norma del error asociado a la fracción de masa conjunta de las especies reactivas.

### 3.3. Fracción de masa de la especie inerte

Por otro lado, en la figura 3 se presenta la variación temporal de la norma  $L_2$  del error asociado a la fracción de masa de la especie inerte. Nuevamente, la curva en negro corresponde al enfoque 1 mientras que la curva roja corresponde al enfoque 2, según la definición establecida en la ecuación (10). Para mayor claridad en la representación de los resultados, la figura 3 se representa con escala logarítmica en el eje de ordenadas junto a un acercamiento en la zona donde las curvas presentan variaciones pequeñas en comparación a las notablemente visibles presentes en dicha figura.

Para la variable en estudio, se observa nuevamente el mejor desempeño del enfoque 1 sobre el enfoque 2. Para tiempos menores a aproximadamente  $284,5 \mu s$ , el error presentado por ambos enfoques es coincidente y se mantiene constante. Para tiempos posteriores, el enfoque 1 conserva esta característica hasta aproximadamente  $400 \mu s$ , instante que representa el tiempo característico donde los efectos químicos se evidencian visiblemente, como se observa en la figura 1. Este comportamiento se debe a que esta medida del error solo considera una única especie inerte, que mantiene su fracción mísica constante durante estos intervalos de tiempo característicos ( $284,5 \mu s$  para el enfoque 2 y  $400 \mu s$  para el enfoque 1). Para tiempos posteriores en cada caso, el incremento en la norma del error evidencia una pérdida de precisión en la resolución de las ecuaciones de transporte asociada, para el enfoque 2, a la forma en que la especie inerte transportada se discretiza en los límites de los volúmenes de control; mientras que para el enfoque 1, se debe principalmente al desencadenamiento de los mecanismos químicos intensos.

### 3.4. CONCLUSIONES

El análisis comparativo de los dos enfoques numéricos para la resolución de las ecuaciones de transporte de las especies químicas revela diferencias significativas en su desempeño. Ambos

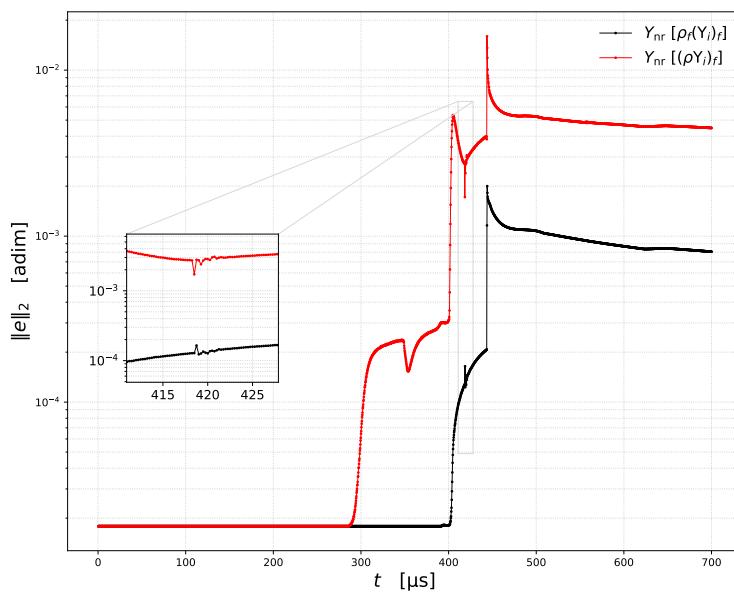


Figura 3: Variación temporal de la norma del error asociado a la fracción de masa de la especie inerte.

métodos muestran un comportamiento idéntico durante la fase inicial ( $t < 284,5 \mu s$ ), donde los efectos químicos están ausentes, manteniendo valores coincidentes en la norma  $L_2$  del error tanto para las especies reactivas como para la especie inerte.

Sin embargo, para tiempos superiores, se evidencia una clara superioridad del enfoque 1. En el caso de las especies reactivas, el enfoque 2 presenta un aumento significativo en el error asociado a la discretización en los límites intercelas. Para la especie inerte, mientras el enfoque 1 mantiene un error constante hasta aproximadamente  $400 \mu s$ , el enfoque 2 muestra un deterioro prematuro de la precisión a partir de  $284.5 \mu s$ .

Estos resultados demuestran que el enfoque 1 ofrece una mayor robustez numérica, preservando la precisión durante un intervalo temporal más extenso. La degradación del desempeño del enfoque 2 está fundamentalmente asociada a problemas en la discretización de las variables en los límites de los volúmenes de control, mientras que el incremento posterior del error en el enfoque 1 se atribuye principalmente a la activación de los intensos mecanismos químicos del sistema.

En consecuencia, el enfoque 1 se establece como el método preferente para la simulación de flujos reactivos, particularmente en aplicaciones donde se requiere mantener la precisión numérica durante períodos extendidos previos al inicio de la actividad química significativa.

## REFERENCIAS

- Frias M., Gutiérrez Marcantoni L., y Elaskar S. Actualización del Solver RhoCentralRFFoam y su Aplicación al Problema de la Ignición por Reflexión en Configuración Fuerte. *Mecánica Computacional*, 40(25):917–925, 2023.
- Greenshields C., Weller H., Gasparini L., y Reese J. Implementation of semi-discrete, non-staggered central schemes in a colocated, polyhedral, finite volume framework, for high-speed viscous flows. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 63(1):1–21, 2010. <http://doi.org/10.1002/fld.2033>.
- Gutiérrez Marcantoni L., Tamagno J., y Elaskar S. rhocentralrffoam: An OpenFOAM solver for high speed chemically active flows – simulation of planar detonations –. *Computer Physics*

- Communications*, 219:209–222, 2017a. <http://doi.org/10.1016/j.cpc.2017.06.008>.
- Gutiérrez Marcantoni L., Tamagno J., y Elaskar S. Two-dimensional numerical simulations of detonation cellular structures in H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>-Ar mixtures with OpenFOAM®. *International Journal of Hydrogen Energy*, 42(41):26102–26113, 2017b. <http://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2017.08.040>.
- Gutiérrez Marcantoni L., Tamagno J., y Elaskar S. A numerical study on the impact of chemical modeling on simulating methane-air detonations. *Fuel*, 240:289–298, 2019. <http://doi.org/10.1016/j.fuel.2018.11.118>.
- Kee R., Coltrin M., Glarborg P., y Zhu H. *Chemically Reacting Flow: Theory, Modeling, and Simulation*. John Wiley & Sons, Hoboken, NJ, USA, 2017. ISBN 9781119184874. <http://doi.org/10.1002/9781119186304>.
- Kurganov A., Noelle S., y Petrova G. Semidiscrete central-upwind schemes for hyperbolic conservation laws and Hamilton–Jacobi equations. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 23(3):707–740, 2001. <http://doi.org/10.1137/S1064827500373413>.
- Oran E., Young T., Boris J., y Cohen A. Weak and strong ignition. I. Numerical simulations of shock tube experiments. *Combustion and Flame*, 48:135–148, 1982. ISSN 0010-2180.
- Shu C. y Osher S. Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock-capturing schemes. *Journal of Computational Physics*, 77(2):439–471, 1988. [http://doi.org/10.1016/0021-9991\(88\)90177-5](http://doi.org/10.1016/0021-9991(88)90177-5).
- Toro E. *Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics: A Practical Introduction*. Springer Science & Business Media, Berlin, Germany, 2013. ISBN 9783642245884. <http://doi.org/10.1007/978-3-642-24588-4>.
- Zhou D., Zhang H., y Yang S. A robust reacting flow solver with computational diagnostics based on OpenFOAM and Cantera. *Aerospace*, 9(2):102, 2022. <http://doi.org/10.3390/aerospace9020102>.