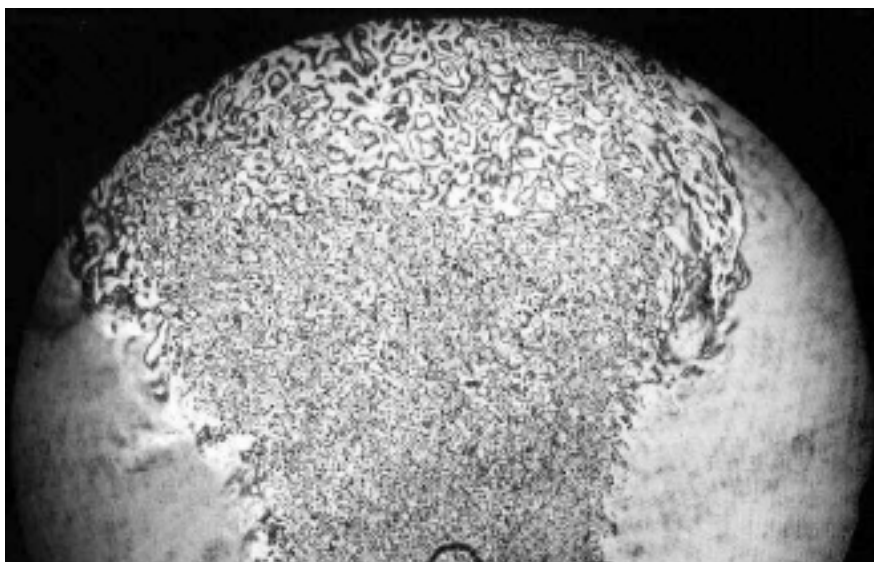


Simulación numérica directa en turbulencia

CARMEN JIMÉNEZ*



Visualización de flujo mediante técnica de holografía

1. Introducción

La simulación numérica directa de flujos turbulentos es una disciplina relativamente reciente, nacida como consecuencia de los avances en la capacidad y velocidad de cálculo de los ordenadores.

La idea de reproducir numéricamente toda la física de un flujo turbulento parecía una quimera hasta que Orszag y Patterson¹ realizaron la primera simulación numérica directa en 1972, sobre un mallado de $32 \times 32 \times 32$ puntos. Lo que en su día fue una hazaña, puede reproducirse hoy en un ordenador de sobremesa en sólo unos minutos. Pero no hay que dejarse llevar por la tentación de hacer una simple regla de tres y pensar que en los superordenadores actuales (varios miles de veces más potentes) podríamos simular flujos turbulentos miles de veces mayores, p.ej. el flujo del aire en torno a un avión. En efecto, estamos ante un problema no lineal cuyo coste crece también de forma no lineal con el aumento del tamaño, o más concretamente con el aumento del número de Reynolds, que da una idea de la magnitud de la turbulencia. El flujo en torno a un avión requeriría miles de años de tiempo de computación (CPU).² Para tratar problemas de alto número de Reynolds se recurre a la simulación de flujos promediados, que presentan variaciones más suaves y requieren menos potencia de cálculo y en los que los efectos de

Resumen

Este artículo describe la técnica numérica conocida como Simulación Numérica Directa (DNS) en Mecánica de Fluidos. Esta aproximación resuelve numéricamente las ecuaciones de Navier-Stokes sin ninguna simplificación tanto en flujos laminares como turbulentos (es decir, sin emplear modelos de turbulencia). Finalmente se presentan resultados en dos casos concretos: mezcla de dos escalares en turbulencia homogénea y estacionaria y combustión de una mezcla estratificada.

Abstract

This paper describes the numerical technique known as Direct Numerical Simulation (DNS) applied to Fluid Mechanics. Under this approach the Navier-Stokes equations are numerically solved without additional hypothesis for both, laminar and turbulent flows (i.e., without any turbulence model). Finally, two specific cases are considered where results are presented: mixing of two scalars in homogeneous and steady turbulence and combustion of a stratified mixture.

* Laboratorio de Investigación en Tecnología de la Combustión. María de Luna 10. 50018 Zaragoza - España. carmelita@itec.csic.es

las fluctuaciones turbulentas aparecen en forma de modelos.

2. Ecuaciones básicas

El comportamiento de un fluido, tanto en régimen laminar como turbulento, se rige por las ecuaciones de Navier-Stokes, un conjunto de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales que nos indican que la masa, la energía y la cantidad de movimiento se conservan en un sistema cerrado:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} &= 0; \\ \frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_j} &= -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\tau_{ij}) \quad (I) \\ \frac{\partial \rho e}{\partial t} + \frac{\partial \rho e u_j}{\partial x_j} &= \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - P \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(k \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) \end{aligned}$$

En estas ecuaciones u_i representa las tres componentes del vector velocidad, P la presión, ρ la densidad, T la temperatura y e la energía interna, todas ellas variables dependientes de la posición y el tiempo y μ y K son, respectivamente, la viscosidad y la conductividad térmica del fluido. τ_{ij} es el tensor de esfuerzos viscosos, que en caso de fluidos newtonianos es función de la viscosidad y las derivadas de la velocidad.

Además, dos ecuaciones de estado relacionan la densidad, la presión, la temperatura y la energía interna y cierran el sistema de la Eq. 1. Para un gas perfecto y un líquido perfecto, las ecuaciones de estado son, respectivamente:

$$\begin{aligned} \rho^g &= \frac{PW}{R^o T} \text{ mol}; e^g = e^o + C_v T \\ \rho^l &= cte. = \rho^o; e^l = e^o + cT \quad (II) \end{aligned}$$

A diferencia del caso laminar, en el caso turbulento no existen soluciones analíticas para las ecuacio-

nes de Navier Stokes. Para llegar a una solución se ha de recurrir a la resolución numérica, algo común en todos los campos de la física y la ingeniería.

El problema específico de la simulación de estas ecuaciones en el caso de flujos turbulentos es que sus soluciones son fuertemente fluctuantes, con un rango de frecuencias (o escalas espaciales de variación) muy amplio, que además crece rápidamente con la velocidad o las dimensiones del flujo. El número de Reynolds definido como $Re = UL\rho/\mu$, con L y U una longitud y una velocidad características del flujo da una idea de la intensidad de la turbulencia y del rango de escalas de fluctuación que pueden aparecer. En efecto, cuando Re es grande las fuerzas viscosas son mucho menores que las fuerzas de inercia (de tamaño característico $UL\rho$) y la no linealidad de las ecuaciones de Navier Stokes se hace patente generándose fluctuaciones de escalas cada vez menores. Cuando Re es pequeño ambos términos son comparables y la disipación viscosa frena el desarrollo de la turbulencia, estaremos entonces en el caso de flujos laminares. El rango de escalas de fluctuación presentes en un flujo turbulento depende, por tanto, del número de Reynolds. La relación entre la escala integral (dada por la geometría del sistema y representativa de las mayores escalas presentes) y la escala de Kolgomorov (representativa de las menores escalas presentes) puede estimarse como proporcional el número de Reynolds elevado a $3/4$ ($L/\eta = Re^{3/4}$).

Por ejemplo, un chorro turbulento de aire con velocidad media de 15 m/s saliendo de un orificio de 1 cm de diámetro a presión y temperatura ambiente tiene un número de Reynolds del orden de 10.000 y presentará fluctuaciones

Las simulaciones directas constituyen hoy en día un medio único para estudiar la turbulencia. La simulación de pequeños sistemas turbulentos «ideales» permite obtener una solución completa (de la que se conocen todas las variables en todos los puntos del sistema), que resulta de gran utilidad para realizar estudios básicos sobre la turbulencia, comprobar resultados teóricos, estudiar relaciones entre fenómenos, hacer estudios paramétricos y validar modelos.

en la velocidad y presión de tamaños desde 1 cm hasta aproximadamente 0,01 mm, es decir, habrá tres órdenes de magnitud entre las mayores y las menores escalas de fluctuación. Eso significa que para representarlo en nuestro ordenador necesitamos un mallado con puntos muy próximos que capten las fluctuaciones más pequeñas (hasta 0,01 mm) y que cubran todo el dominio de resolución (del orden de centímetros), lo que resulta en un número de puntos del orden de 10^9 . Además, se habrán de resolver las menores escalas de variación temporal, lo que implica pasos de tiempo muy pequeños y, en definitiva, simulaciones con un coste computacional imposible de asumir.

El coste computacional crece, además, exponencialmente con el número de Reynolds; es fácil ver ahora por qué, aunque se haya multiplicado por miles la potencia de los ordenadores en estos treinta años, el número de Reynolds alcanzado sólo se ha multiplicado por 50 aproximadamente. En principio no debemos, pues, esperar que este tipo de simulación pueda alcanzar flujos del tamaño de los flujos turbulentos industriales de interés en ingeniería, mucho menos de los flujos naturales de interés en geología, meteorología o astrofísica.

Esto no significa que no tenga utilidad: las simulaciones directas constituyen hoy en día un medio único para estudiar la turbulencia. La simulación de pequeños sistemas turbulentos «ideales» permite obtener una solución completa (de la que se conocen todas las variables en todos los puntos del sistema), que resulta de gran utilidad para realizar estudios básicos sobre la turbulencia, comprobar resultados teóricos, estudiar relaciones entre fenómenos, hacer estudios paramétricos y validar modelos.

3. Ejemplos de aplicación

Para ilustrar las utilidades de la DNS presentamos a continuación dos ejemplos de estudios sobre sistemas turbulentos basados en la simulación numérica directa.

3.1. Mezcla de dos sustancias en turbulencia homogénea e isotrópica

La turbulencia homogénea e isotrópica es representativa de la turbulencia de un flujo desarrollado en zonas alejadas de paredes, obstáculos y de las zonas de transición. Es el flujo turbulento más sencillo de simular, ya que debido a la homogeneidad e isotropía se puede suponer un dominio de cálculo cúbico y periódico y además es un flujo turbulento a números de Reynolds bajos, por lo que permite una simulación basada en una discretización con un número pequeño de nodos. Aun siendo un flujo sencillo aporta mucha información sobre la estadística y correlación de las variables en turbulencia y es el banco de pruebas más usado para la validación de modelos de turbulencia.

Los resultados que presentamos aquí corresponden a la simulación de turbulencia de número de Reynolds $Re=32$ en un dominio cúbico de 1 mm de lado discretizado con $64 \times 64 \times 64$ nodos. Se impone inicialmente un flujo turbulento homogéneo e isotrópico con fluctuaciones en la velocidad del orden de 0.5 m/s (ver [3] para detalles sobre la generación del flujo inicial) y dos campos escalares Y_a e Y_b que representan la fracción másica de dos sustancias A y B inicialmente separadas (fracción másica de A = masa de A / masa total). La ecuación de evolución de estas nuevas variables en el flujo turbulento es la ecuación de conservación de la masa de cada especie (si no hay reacciones químicas la masa de cada especie se ha de conservar en un sistema cerrado):

$$\frac{\partial \rho Y_{A,B}}{\partial t} + \frac{\partial \rho Y_{A,B} u_i}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[D \frac{\partial \rho Y_{A,B}}{\partial x_i} \right] \quad (\text{III})$$

Si las dos sustancias A y B son las únicas presentes se habrá de cumplir que la suma de la masa de las dos sea la masa total, o, lo que es lo mismo, que la suma de las dos fracciones másicas sea igual a 1. Por lo tanto una sola de ellas es suficiente para representar la mezcla. En este caso se escogió Y_a y se calculará $Y_b=1-Y_a$.

La simulación de la ecuación (III) junto con las ecuaciones de Navier Stokes (I) sobre un mallado de $64 \times 64 \times 64$ nodos con condiciones de contorno periódicas se inicia pues con valores de velocidad correspondientes a un campo turbulento homogéneo e isotrópico, densidad constante y un escalar Y_a representando la fracción másica de una sustancia que ocupa aproximadamente la mitad del cubo (la otra mitad está ocupada por B) (ver Figura 1). La simulación de la evolución temporal de este sistema resulta en la secuencia para la velocidad y el campo escalar que vemos en la Figura 1.

Se observa en la figura cómo la turbulencia contribuye a la mezcla de las sustancias A y B. Podemos medir el estado global de la mezcla a través de la varianza estadística de la variable Y_a :

$$\sigma^2 = \langle (Y_a - \langle Y_a \rangle)^2 \rangle,$$

con $\langle \rangle$ indicando la media sobre todo el dominio de cálculo.

La varianza da una idea de las fluctuaciones de una variable en torno al valor medio. Si $\sigma^2=0$ no hay fluctuaciones en la variable Y_a , y por tanto la mezcla es homogénea. En el extremo opuesto, cuando σ^2 alcanza su valor máximo ($= 1$), las fluctuaciones son las máximas posibles y la mezcla está completamente segregada.

En la simulación actual inicialmente las sustancias A y B están separadas y la varianza es máxima. A lo largo de la simulación y por efecto de la turbulencia las sustancias se mezclan y la varianza decae, tendiendo hacia el valor cero que corresponde a una mezcla completamente homogénea (ver Figura 2). En esta figura se incluye también la varianza de una simulación corres-

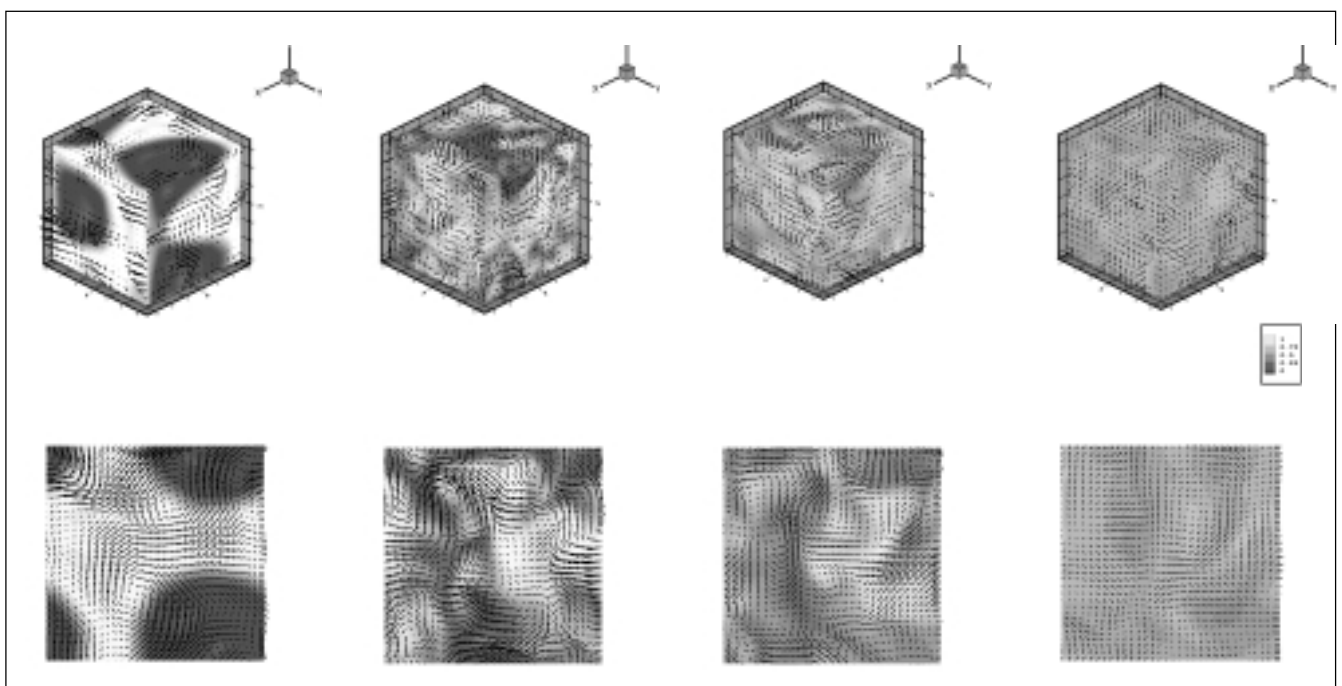


Figura 1: Evolución temporal de la velocidad (vectores) y el campo escalar Y_a en el dominio tridimensional de simulación y en una sección bidimensional.

pondiente a un sistema sin turbulencia en el que la mezcla ocurre únicamente por difusión molecular. Podemos apreciar y medir el efecto de la turbulencia en la velocidad con la que se mezclan dos fluidos.

Los resultados de la simulación pueden también ser utilizados en el estudio de modelos estadísticos para la mezcla turbulenta. En la Figura 2 se presenta también la comparación de los resultados de un modelo estándar de mezcla conocido como *Linear Mean Square Estimation*⁴ y los resultados de DNS, y se aprecia cómo el modelo reproduce adecuadamente la mezcla turbulenta.

Por supuesto, la gran cantidad de datos que obtenemos de una simulación como la presentada sirve para estudiar otros fenómenos, como el espectro de la turbulencia, la vorticidad, la presión...

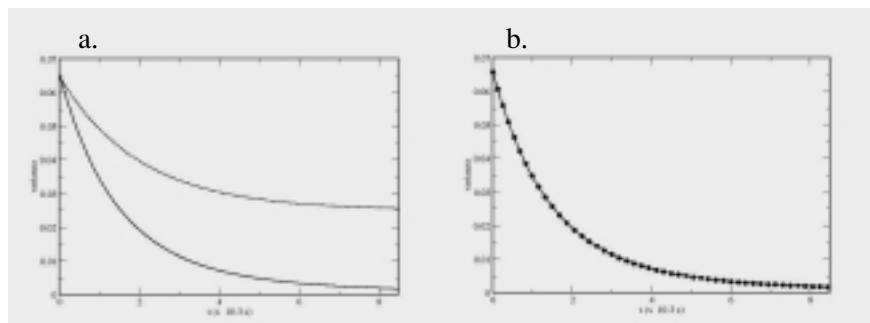


Figura 2: (a) Comparación de la varianza obtenida por simulación directa de la mezcla de dos escalares en turbulencia homogénea e isotrópica (línea continua) y de la mezcla de dos escalares por difusión (línea punteada). (b) Comparación de la varianza obtenida en simulación numérica directa (línea continua) y usando el modelo LMSE (símbolos).

3.2. Simulación directa de la combustión turbulenta de una mezcla estratificada

Este segundo ejemplo es un estudio basado en la simulación directa de un sistema de combustión turbulenta que pretendía responder a las preguntas:

- ¿Qué se quema más eficientemente, una mezcla homogénea de fuel y aire o una mezcla que, con el mismo contenido total de fuel y aire, presenta zonas

ricas en fuel y zonas pobres en fuel, es decir, una mezcla estratificada?

- ¿Cuál de las dos mezclas produce más contaminantes?

¿Por qué?

Este estudio de tipo básico estaba en realidad inmerso en un proyecto aplicado en el que intervenían algunos fabricantes de motores de inyección directa. En efecto, cuando los motores de inyección directa operan a baja potencia se procura preparar una mezcla pobre en fuel, pero estratificada, pues se ha comprobado su mayor eficacia y ahorro de fuel. El problema es que las simulaciones realizadas anteriormente no habían conseguido reproducir este comportamiento.

En este trabajo (publicado en [5]) proponíamos que esto se debía a que en los trabajos anteriores no se habían tenido en cuenta todos los factores que influyen en la eficacia de la combustión en una mezcla estratificada, como el tamaño de la estratificación respecto a las escalas de la turbulencia y el rango y asimetría de las variaciones en la riqueza. En efecto, si la escala de variación de riqueza es menor que la de la turbulencia, la mezcla turbulenta puede hacer desaparecer rápidamente la estratificación. Por otro lado, la no linealidad de la dependencia de la velocidad de combustión con la riqueza de la mezcla hace que no sea equivalente, a efectos de velocidad global de reacción, una mezcla con fluctuaciones simétricamente distribuidas en torno al valor medio a una mezcla en la que la distribución esté sesgada hacia el lado rico en fuel y se alcancen zonas de riqueza muy alta. De hecho los resultados demuestran que la distribución «asimétrica» es más eficiente: una pequeña zona con alta concentración de fuel produce tal cantidad de calor que la temperatura global aumenta y la combustión

se ve favorecida en todas las demás regiones.

Para demostrar estas conjeturas recurrimos a la simulación directa de varios sistemas de combustión turbulenta estratificada. La simulación directa de un sistema turbulento en el que tiene lugar una reacción de combustión presenta un problema de coste añadido, al precisarse simular la mezcla y reacción de varias especies químicas. En una reacción de combustión están implicadas cientos de sustancias químicas y ocurren cientos, incluso miles, de reacciones químicas elementales. A las ecuaciones básicas de Navier Stokes (I) se ha de añadir una ecuación para cada especie química (como las de la ecuación III, con un término de reacción química añadido). Esto significa que el sistema pasaría de cinco ecuaciones a contener cientos de ecuaciones, con el consiguiente aumento de coste. El recurso más extendido es reducir el sistema químico de forma que la reacción se represente por un sistema equivalente en el que sólo están implicadas unas decenas de especies y reacciones y el coste sólo se duplique o triplique. El segundo problema adicional de este tipo de simulación es que las escalas a las que ocurre la reacción química pueden ser aún menores que las menores escalas de la turbulencia (una llama tiene un espesor del orden de 0,1 mm y algunas de las reacciones que suceden en su interior ocurren en espesores aún menores de 0,01 mm). Para resolver adecuadamente la química se requieren mallados más finos y pasos temporales más pequeños, aumentando todavía más el coste computacional.

Se estableció un escenario para el estudio de este problema en el que la simulación se haría en un dominio bidimensional de 3 mm de lado que representará una porción de un motor de combustión a 700 grados

Kelvin y 4 atm de presión. Se escogió una química de propano (aunque más tarde el estudio se extendió a química de octano con resultados equivalentes) con 28 especies químicas y 73 reacciones. Las escalas de este sistema impusieron un mallado de 451x451 puntos y pasos temporales del orden de 10^{-8} segundos. Así, una simulación completa requería un tiempo de computación en torno a 48 horas en un superordenador vectorial (NEC SX-5, en IDRIS, Orsay, París). (Nótese que una simulación tridimensional vendría a costar en un mínimo de 4.800 horas = 200 días de CPU).

Se establecieron diferentes configuraciones iniciales para la mezcla para comparar su combustión. En la configuración de referencia (A) la mezcla de fuel y aire era perfectamente homogénea y en todo punto del dominio se tenía un valor constante e igual a 0,6 para el parámetro ϕ que mide la riqueza de una mezcla reactiva. $\phi=1$ indica una mezcla de proporciones estequiométricas, $\phi < 1$ una mezcla pobre en combustible y $\phi > 1$ una mezcla rica. En las otras tres configuraciones la mezcla era estratificada y simétrica en una de ellas (caso B) y asimétrica (zonas muy ricas en fuel pequeñas y zonas pobres mucho mayores) en las demás (C1 y C2). La escala de estratificación era diferente en estas últimas, siendo en el caso C1 mayor que en el C2 (ver Figura 3). En todos los casos la cantidad global de fuel y aire era la misma y por tanto el valor promedio de ϕ era 0,6.

Sobre todas ellas se superimpuso un campo de velocidad turbulento (de escalas de fluctuación del mismo orden que el tamaño de la estratificación de C2) y una llama premezclada laminar propagándose hacia la izquierda. En su propagación la llama encuentra la mezcla estratificada (u homogénea en A) y

Este estudio de tipo básico estaba en realidad inmerso en un proyecto aplicado en el que intervenían algunos fabricantes de motores de inyección directa. En efecto, cuando los motores de inyección directa operan a baja potencia se procura preparar una mezcla pobre en fuel, pero estratificada, pues se ha comprobado su mayor eficacia y ahorro de fuel.

al mismo tiempo se va haciendo turbulenta; estos dos factores influyen en la deformación del frente de llama, como podemos apreciar en la Figura 4. Las imágenes de esta figura representan la tasa de producción de calor en dos instantes de tiempo para las simulaciones A, C1 y C2. Las líneas negras indican las isolíneas de riqueza constante ($\phi=1$). Se aprecia que inicialmente las tres llamas tienen una forma similar, pero al cabo de un tiempo la llama C1 ha cambiado su forma debido a su propagación en una zona estratificada (las llamas se propagan más rápidamente en mezclas estequiométricas que en mezclas pobres o ricas). En cambio, la llama C2 mantiene una forma muy similar a la llama homogénea, posiblemente porque los efectos de la mezcla turbulenta hacen desaparecer la estratificación antes de que la llama la detecte.

En la Figura 5 se representa el valor total de la tasa de producción de calor a lo largo de cada una de las simulaciones. Es evidente que

la llama estratificada C1 es la más eficiente (hasta en un 60%) y que las llamas B y C2 presentan resultados similares a la homogénea (A). Esto corrobora las hipótesis según las cuales la asimetría y la escala de la estratificación tienen una gran influencia en la eficacia de la combustión. En resumen, para obtener un mayor rendimiento no basta con estratificar sino que es preciso controlar tanto el tamaño como la distribución en torno al valor medio de la estratificación.

En cuanto a la producción de contaminantes, las simulaciones corroboraron de nuevo los resultados obtenidos experimentalmente, según los cuales la combustión estratificada produce más cantidad de óxidos de nitrógeno. La Figura 6 muestra la masa de óxido de nitrógeno (NO) obtenida en las simulaciones A, C1 y C2. Vemos que los sistemas estratificados (C1 y C2) producen más NO y que entre ellos dos el sistema más eficiente energéticamente es también el más contaminante.

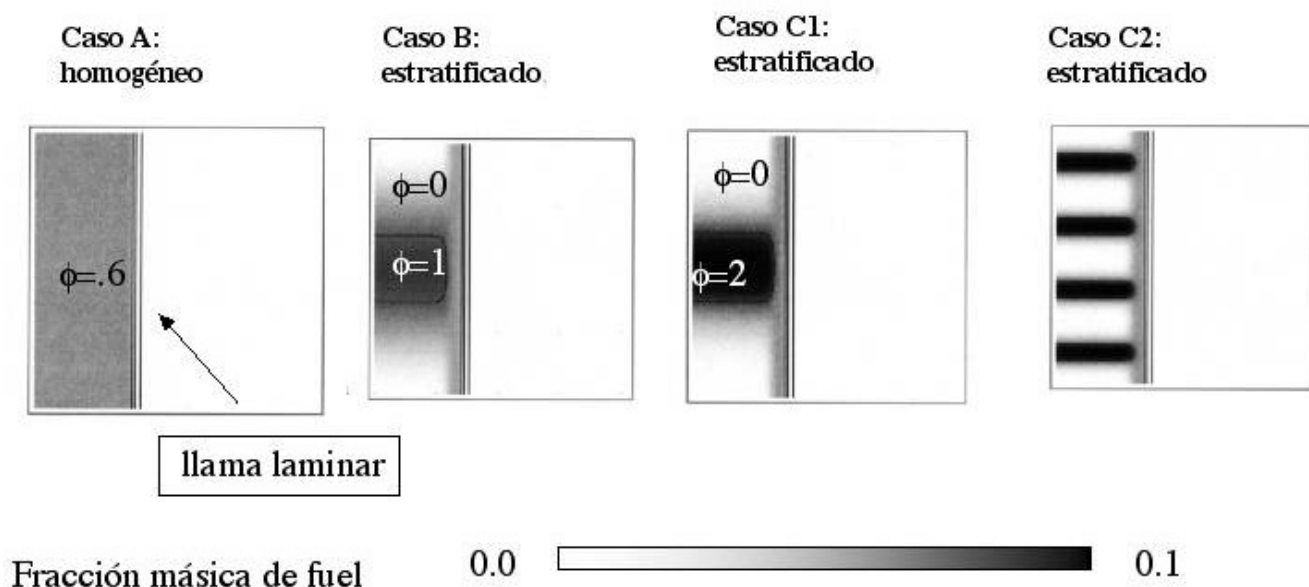


Figura 3: Distribución inicial de fuel en las simulaciones A (homogénea), B (estratificada con grandes estratos) y C (estratificada con pequeñas escalas). Las zonas más oscuras corresponden a zonas ricas ($\phi=2$); las zonas blancas a zonas donde no hay combustible ($\phi=0$). En los tres casos la riqueza promedio es $\phi=0,6$. Las líneas verticales representan la llama laminar inicial.

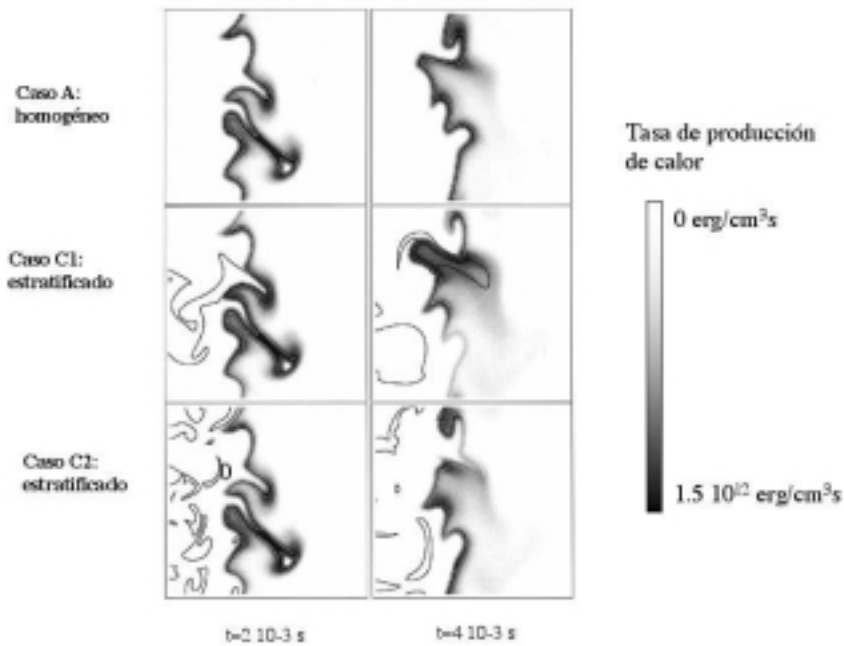


Figura 4: Tasa de producción de calor en dos instantes de las simulaciones A, C1 y C2. Las zonas oscuras corresponden a la máxima producción de calor ($1,5 \cdot 10^{12}$ erg/cm² s). Al inicio de la simulación (izquierda) las tres llamas presentan una forma similar; a lo largo de la simulación las llamas encuentran mezclas de diversa riqueza y se comportan de forma diferente (derecha).

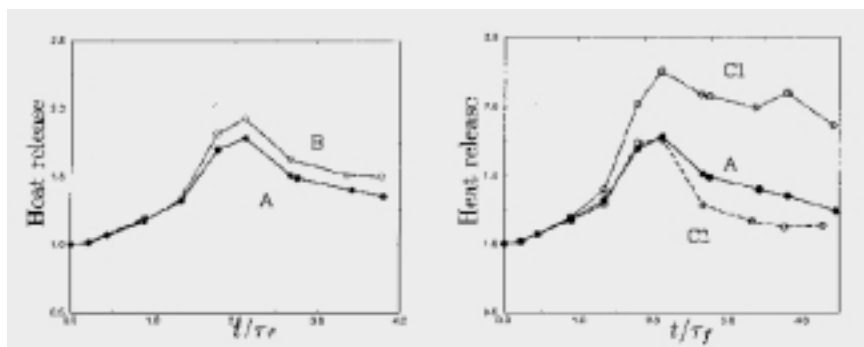


Figura 5: Tasa de producción de calor en la combustión homogénea (caso A) y estratificada (casos B, C1 y C2).

4. Conclusiones

Se han presentado dos ejemplos en los cuales la Simulación Numérica Directa de las ecuaciones de Navier-Stokes es una herramienta clave para describir todos los aspectos relevantes del flujo. Gracias a la DNS se ha podido establecer que la eficiencia de la combustión en una mezcla estratificada depende fuertemente de las condiciones de escala y asimetría de la estratificación.

5. Agradecimientos

La autora quiere aprovechar la ocasión para agradecer la colaboración prestada por el Grupo de Investigación en Mecánica de Fluidos de la Universidad Autónoma de Occidente, sin el apoyo del cual no hubiera sido posible la elaboración de este artículo. ☛

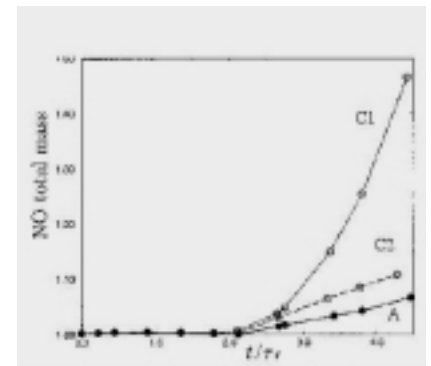


Figura 6: Masa de NO producida en la combustión homogénea (caso A) y estratificada (casos C1 y C2).

Referencias:

1. S.A. Orszag y G.S. Patterson, Numerical Simulation of Three Dimensional Homogeneous Isotropic Turbulence, Phys. Rev. Lett., 21, 1972.
2. P. Moin, Tackling Turbulence with Supercomputers, Scientific American, 1997.
3. V. Eswaran y S. Pope, An examination of forcing in direct numerical simulations, Comput. Fluids, vol. 16, 1988.
4. C. Dopazo, Acta Astronáutica, vol. 1, 1974.
5. C. Jiménez, B. Cuenot, T. Poinso y D. Haworth, Direct Simulation and Modeling for Lean Stratified Propane - Air Flames, Combust. Flame, vol 128, 2002.