

INTERACCIÓ ENTRE LES ESTRUCTURES  
DE FLUX I EL TRANSPORT DE MATÈRIA.  
APLICACIÓ A UN DOLL PLA TURBULENT

Memòria presentada per  
Àngel Jiménez Aranda  
per optar al grau de doctor en enginyeria química  
Tarragona, maig de 2003



El Dr. Francesc Xavier Grau i Vidal, Catedràtic de mecànica de fluids del Departament d'Enginyeria Mecànica de l'Escola Tècnica Superior d'Enginyeria Química de la Universitat Rovira i Virgili i el Dr. Ildefonso Cuesta i Romeo, Professor titular de mecànica de fluids de l'Escola Tècnica Superior d'Enginyeria Química de la Universitat Rovira i Virgili

Fan constar:

Que el present treball, amb títol:

*Interacció entre les estructures de flux i el transport de matèria. Aplicació a un doll pla turbulent*

que presenta en Angel Jiménez Aranda per optar al grau de doctor en Enginyeria Química ha estat realitzat sota la nostra immediata direcció i que tots els resultats obtinguts són fruit dels experiments i anàlisis realitzats per l'esmentat doctorand.

I, perquè en prengueu coneixement i tingui els efectes que correspongui, signem aquesta certificació.

Tarragona, 1 de maig de 2003

Dr. Francesc Xavier Grau i Vidal

Dr. Ildefonso Cuesta i Romeo



*Als meus pares*



# Índex

<b>Resum</b>	<b>iii</b>
<b>Agraïments</b>	<b>v</b>
<b>Índex de figures</b>	<b>vii</b>
<b>Índex de taules</b>	<b>xiii</b>
<b>1 Introducció</b>	<b>1</b>
1.1 Revisió bibliogràfica . . . . .	2
1.1.1 Estudis experimentals de dolls plans . . . . .	2
1.1.2 Estudis numèrics de dolls plans . . . . .	4
1.2 Objectius . . . . .	5
<b>2 Fonaments</b>	<b>9</b>
2.1 Anàlisi teòrica . . . . .	9
2.1.1 Hipòtesis . . . . .	9
2.1.2 Equacions de transport . . . . .	10
2.1.3 Adimensionament de les equacions . . . . .	11
2.1.4 Simulació de grans escales . . . . .	13
2.2 Mètodes numèrics . . . . .	18
2.2.1 Discretització . . . . .	18
2.2.2 Xarxa computacional . . . . .	20
2.2.3 Acoblament velocitat-pressió . . . . .	21
2.2.4 Esquemes de discretització . . . . .	23
2.2.5 Condicions inicials i de contorn . . . . .	24

<b>3</b>	<b>Tècniques de Computació. Càlcul paral·lel</b>	<b>31</b>
3.1	Multiprocessadors .vs. Multicomputadores . . . . .	31
3.2	Recursos computacionals . . . . .	33
3.3	Programació en paral·lel . . . . .	34
3.4	Velocitat d'un codi paral·lel . . . . .	35
3.5	Speed-up al cluster . . . . .	37
<b>4</b>	<b>Resultats</b>	<b>41</b>
4.1	Validació del codi . . . . .	41
4.1.1	Flux de Couette . . . . .	41
4.1.2	Convecció forçada en una cavitat bidimensional . . . . .	44
4.1.3	Convecció forçada en una cavitat tridimensional . . . . .	47
4.2	Dolls plans bidimensionals . . . . .	50
4.2.1	Camp dinàmic . . . . .	50
4.2.2	Doll pla sense pertorbació . . . . .	51
4.2.3	Doll amb pertorbació sinusoidal simètrica . . . . .	56
4.2.4	Doll amb pertorbació sinusoidal alternada . . . . .	64
4.2.5	Freqüències . . . . .	78
4.2.6	Independència de xarxa . . . . .	79
4.2.7	Camp reactiu . . . . .	82
4.3	Dolls plans tridimensionals . . . . .	96
4.3.1	Camp dinàmic . . . . .	96
4.3.2	Camp de temperatura . . . . .	107
4.3.3	Camp reactiu . . . . .	111
<b>5</b>	<b>Conclusions</b>	<b>115</b>
<b>6</b>	<b>Treball futur i recomanacions</b>	<b>119</b>
	<b>Bibliografia</b>	<b>121</b>



# Resum

El doll pla és una configuració resultant de la interacció de dues capes de barreja simètriques, paral·leles i de diferent signe de vorticitat. Es tracta d'un flux de gran interès pràctic per les seves aplicacions directes a processos industrials i mediambientals.

Aquest treball que es presenta analitza la interacció entre les estructures de flux i el transport de matèria al doll pla. L'estudi realitzat demostra que el flux aigües avall està determinat per les condicions a la regió d'entrada del doll. Així, mitjançant pertorbacions artificials a l'entrada es pot determinar la posterior evolució de les estructures característiques del flux. Aquest control permet augmentar i disminuir el consum d'espècies químiques dins d'un sistema reactiu al doll. Escollint les pertorbacions adients a l'entrada del domini, hom pot aconseguir influir al desenvolupament de la reacció química al llarg del doll i obtenir una conversió desitjada lluny del punt on el flux ha estat pertorbat.

Per realitzar aquesta tasca, s'ha desenvolupat un codi de simulació de dinàmica de fluids amb el llenguatge de programació Fortran 90 i sota la interfície d'enviament de missatges (MPI) entre processadors. Aquest programari informàtic resol numèricament les equacions de transport de quantitat de moviment, energia i matèria en un domini computacional rectangular i obert. Amb les condicions de contorn implementades es permet incorporar fluid extern i les recirculacions del flux poden sortir del domini, reproduint el comportament físic real del doll en un domini infinit.

Les equacions han estat discretitzades utilitzant diferents esquemes: per als termes convectius s'ha emprat un esquema QUICK de segon ordre, per als difusius un esquema centrat i per als temporals un esquema Adams-Bashfort. Pel transport de matèria i energia s'ha emprat un esquema centrat amb la correcció ULTIMATE de Leonard pels termes convectius, ja que aquest esquema corregeix les inestabilitats i falses oscil·lacions del transport altament convectiu quan existeixen forts gradients.

El codi ha estat paral·lelitzat per poder executar-se en màquines multicomputadores. El domini computacional es divideix entre els processadors i cadascun resol les equacions discretitzades sobre els nodes d'una regió determinada. Per intercanviar dades entre els diferents processadors es fa ús de les comandes de la llibreria MPI (*Message Passing Interface*). Els resultats demostren que hi ha una gran millora en el temps de càlcul i que es pot aconseguir una bona eficiència si es compara amb un codi seqüencial optimitzat.

Per evaluar els efectes de les pertorbacions artificials sobre el camp de velocitats i caracteritzar les estructures coherents s'han realitzat un seguit de simulacions bidimensionals a Reynolds 7000. En aquests casos s'han considerat dolls plans dèbils, és a dir, amb una velocitat de flux co-corrent alta. D'aquesta manera la zona d'autosimilitud s'allunya de l'entrada i es pot centrar l'anàlisi sobre la regió inicial del doll. Amb les simulacions computacionals realitzades s'ha evaluat detalladament la influència de les pertorbacions sobre el flux, demostrant que les estructures coherents són periòdiques en el temps.

En aquests casos, també s'ha estudiat l'efecte que produeixen el número de Schmidt, Strouhal i Damköhler sobre la conversió de la reacció química en dolls amb i sense premescla de reactius. S'ha comprovat que determinades freqüències de pertorbacions faciliten la formació d'estructures coherents que milloren la barreja i augmenten la conversió de la reacció. També s'ha demostrat la poca influència del terme difusiu ja que el flux està fortament dominat pel transport convectiu.

Implementant al codi la tècnica de simulació de grans escales amb el model de Smagorinsky, s'ha estudiat un doll pla tridimensional turbulent a Reynolds 3000. En aquest cas la velocitat del flux co-corrent s'ha escollit petita per obtenir la regió d'autosimilitud prop de l'entrada i dins del domini computacional. A més, el doll s'ha inestabilitzat aplicant-hi un petit soroll a l'entrada. Els resultats obtinguts pel camp dinàmic presenten gran concordança amb els experimentals disponibles a la bibliografia i segueixen el patró de la zona d'autosimilitud. S'ha analitzat el sistema reactiu sota aquestes condicions, analitzant l'evolució de la conversió a les regions de règim de transició i turbulent. S'ha demostrat que el gran nombre d'estructures existents a la regió turbulenta del camp instantani facilita la barreja entre les espècies químiques augmentant la conversió dels reactius.

# Agraïments

El treball descrit en aquesta memòria s'ha desenvolupat dins del grup de recerca *Experimentació, Computació i Modelització en Mecànica de Fluids i Turbulència* (ECoMMFiT) de l'Escola Tècnica Superior d'Enginyeria Química de la Universitat Rovira i Virgili, amb la direcció conjunta dels Drs. F.X. Grau i I. Cuesta.

Desitjo fer evident el meu sincer agraïment al Dr. Francesc Xavier Grau i al Dr. Ildefonso Cuesta per acceptar la direcció d'aquest treball. La seva acurada direcció, el constant suport, els coneixements transmesos mitjançant els seus ensenyaments i els seus consells i paciència han estat determinants al llarg d'aquests anys.

També voldria expressar la meva gratitud als meus companys del programa de doctorat. En especial a Ulian Spassov, per la seva ajuda durant els inicis del treball de computació, a Ingrid Martorell, pels seus continus i sabis consells, i a Josep Pàmies i Àlex Fabregat, que han col·laborat en alguna de les etapes de la tesi.

També vull tenir un record per al meu amic José Ramón Biau, per la seva ajuda en tot moment i per acceptar corregir el català escrit d'aquesta memòria.

Evidentment, no puc oblidar als meus pares, els quals m'han donat tot el seu suport i m'han ajudat a mirar endavant. Sense ells la realització d'aquest treball no hagués estat possible.

Agraeixo també l'ajut econòmic rebut per part del departament d'Enginyeria Mecànica al concedir-me una beca de recerca URV per realitzar la tesi doctoral; així com el suport addicional del govern espanyol mitjançant els projectes DGES-PB96-1011 i DPI2000-1578-C02-C01. També agraeixo l'ajut econòmic de la Comunitat Europea sota el projecte *Access to Research Infrastructures - Action of the Improving Human Potential Programme* que em va permetre realitzar dues estades de 6 setmanes en els centres de supercomputació EPCC (Edinburgh, Escòcia) i CINECA (Bologna, Itàlia).

Per últim voldria expressar el meu agraïment als membres del tribunal Dr. Ferré, Dr. Pallarés, Dr. Fernández, Dr. Grifoll i Dra. Iglesias per acceptar judicar aquest treball i a totes les persones que, directa o indirectament, han contribuït en la seva elaboració.

# Índex de figures

2.1	Volum de control 1-dimensional . . . . .	19
2.2	Volum de control 2-dimensional . . . . .	19
2.3	Volum de control 3-dimensional . . . . .	20
2.4	Configuració del doll pla tridimensional i eixos de coordenades . . .	25
2.5	Perfil de velocitat a l'entrada del doll . . . . .	28
2.6	Desviació estàndard de la pertorbació a freqüències discretes . . . .	29
2.7	Desviacions estàndards de la pertorbació amb un soroll blanc . . . .	30
3.1	Arquitectures de computadores per càlcul paral·lel (a) Multiproces- sador; (b) Multicomputadora . . . . .	32
3.2	Descomposició del domini. Les fletxes indiquen la comunicació entre processadors per les regions compartides. . . . .	36
3.3	Llei de Amdahl . . . . .	37
3.4	Resultats de SpeedUp obtinguts al cluster . . . . .	38
3.5	Eficiència del nou codi al cluster . . . . .	38
4.1	Esquema del flux de Couette . . . . .	42
4.2	Evolució temporal del perfil de velocitat pel flux de Couette a Re 100 . . . . .	42
4.3	Evolució temporal del perfil de velocitat pel flux de Couette a Re 1000 . . . . .	43
4.4	Evolució temporal del perfil de velocitat pel flux de Couette a Re 5000 . . . . .	43
4.5	Perfils de les components de la velocitat horitzontal (u) i vertical (v) en les línies vertical (y) i horitzontal (x) del centre de la cavitat bidimensional a Re 1000 per simulacions amb 41x41 nodes . . . . .	45

4.6	Perfils de les components de la velocitat horitzontal (u) i vertical (v) en les línies vertical (y) i horitzontal (x) del centre de la cavitat bidimensional a Re 1000 per simulacions amb 81x81 nodes . . . . .	45
4.7	Perfils de les components de la velocitat horitzontal (u) i vertical (v) en les línies vertical (y) i horitzontal (x) del centre de la cavitat bidimensional a Re 3200 per simulacions amb 41x41 nodes . . . . .	46
4.8	Perfils de les components de la velocitat horitzontal (u) i vertical (v) en les línies vertical (y) i horitzontal (x) del centre de la cavitat bidimensional a Re 3200 per simulacions amb 81x81 nodes . . . . .	46
4.9	Esquema de la cavitat lid-driven tridimensional . . . . .	47
4.10	Perfils de les components de la velocitat horitzontal (u) i vertical (v) en les línies vertical (y) i horitzontal (x) del centre del pla $z = H/2$ a la cavitat tridimensional a Re 1000. Simulació amb $61^3$ nodes. . . . .	48
4.11	Camp de velocitats u-v al pla $z = H/2$ per la cavitat tridimensional a Re 1000. Simulació amb $61^3$ nodes. . . . .	48
4.12	Camp de velocitats u-w al pla $y = H/2$ per la cavitat tridimensional a Re 1000. Simulació amb $61^3$ nodes. . . . .	49
4.13	Camp de velocitats v-w al pla $x = H/2$ per la cavitat tridimensional a Re 1000. Simulació amb $61^3$ nodes. . . . .	49
4.14	Contorns de vorticitat pel doll pla sense pertorbació a Re 7000 . . . . .	52
4.15	Mòdul de la velocitat mitjana pel doll pla sense pertorbació a Re 7000 . . . . .	52
4.16	Perfils de la component u de la velocitat mitjana pel doll pla sense pertorbació a Re 7000 . . . . .	53
4.17	Perfils de la component v de la velocitat mitjana pel doll pla sense pertorbació a Re 7000 . . . . .	53
4.18	Contorns de vorticitat pel doll pla sense pertorbació però amb soroll a Re 7000 . . . . .	54
4.19	Mòdul de la velocitat mitjana pel doll pla sense pertorbació però amb soroll a Re 7000 . . . . .	54
4.20	Perfils de la component u de la velocitat mitjana pel doll pla sense pertorbació però amb soroll a Re 7000 . . . . .	55
4.21	Perfils de la component v de la velocitat mitjana pel doll pla sense pertorbació però amb soroll a Re 7000 . . . . .	55
4.22	Contorns de vorticitat pel doll pla amb pertorbació sinusoidal simètrica a $St=1.0$ a Re 7000 . . . . .	57

4.23	Mòdul de la velocitat mitjana pel doll pla amb pertorbació sinusoidal simètrica a $St=1.0$ a $Re\ 7000$ . . . . .	57
4.24	Perfils de la component $u$ de la velocitat mitjana pel doll pla amb pertorbació sinusoidal simètrica a $St=1.0$ a $Re\ 7000$ . . . . .	58
4.25	Perfils de la component $v$ de la velocitat mitjana pel doll pla sense pertorbació sinusoidal simètrica a $St=1.0$ a $Re\ 7000$ . . . . .	58
4.26	Perfils rms de la component $u$ de la velocitat mitjana pel doll pla amb pertorbació sinusoidal simètrica a $St=1.0$ a $Re\ 7000$ . . . . .	59
4.27	Perfils rms de la component $v$ de la velocitat mitjana pel doll pla sense pertorbació sinusoidal simètrica a $St=1.0$ a $Re\ 7000$ . . . . .	59
4.28	Contorns de vorticitat pel doll pla amb pertorbació sinusoidal simètrica a $St=0.5$ a $Re\ 7000$ . . . . .	60
4.29	Mòdul de la velocitat mitjana pel doll pla amb pertorbació sinusoidal simètrica a $St=0.5$ a $Re\ 7000$ . . . . .	60
4.30	Perfils de la component $u$ de la velocitat mitjana pel doll pla amb pertorbació sinusoidal simètrica a $St=0.5$ a $Re\ 7000$ . . . . .	61
4.31	Perfils de la component $v$ de la velocitat mitjana pel doll pla sense pertorbació sinusoidal simètrica a $St=0.5$ a $Re\ 7000$ . . . . .	61
4.32	Perfils rms de la component $u$ de la velocitat mitjana pel doll pla amb pertorbació sinusoidal simètrica a $St=0.5$ a $Re\ 7000$ . . . . .	62
4.33	Perfils rms de la component $v$ de la velocitat mitjana pel doll pla sense pertorbació sinusoidal simètrica a $St=0.5$ a $Re\ 7000$ . . . . .	62
4.34	Contorns de vorticitat pel doll pla amb pertorbació simètrica i $St\ 1.0$ amb una reducció de l'amplada de la pertorbació a $Re\ 7000$ . . . . .	63
4.35	Mòdul de la velocitat mitjana pel doll pla amb pertorbació sinusoidal simètrica i $St=1.0$ amb una reducció de l'amplada de la pertorbació a $Re\ 7000$ . . . . .	63
4.36	Contorns de vorticitat pel doll pla amb pertorbació sinusoidal alternada a $St=1.0$ a $Re\ 7000$ . . . . .	66
4.37	Mòdul de la velocitat mitjana pel doll pla amb pertorbació sinusoidal alternada a $St=1.0$ a $Re\ 7000$ . . . . .	66
4.38	Perfils de la component $u$ de la velocitat mitjana pel doll pla amb pertorbació sinusoidal alternada a $St=1.0$ a $Re\ 7000$ . . . . .	67
4.39	Perfils de la component $v$ de la velocitat mitjana pel doll pla sense pertorbació sinusoidal alternada a $St=1.0$ a $Re\ 7000$ . . . . .	67

4.40	Perfils rms de la component u de la velocitat mitjana pel doll pla amb pertorbació sinusoidal alternada a $St=1.0$ a $Re\ 7000$ . . . . .	68
4.41	Perfils rms de la component v de la velocitat mitjana pel doll pla sense pertorbació sinusoidal alternada a $St=1.0$ a $Re\ 7000$ . . . . .	68
4.42	Contorns de vorticitat pel doll pla amb pertorbació sinusoidal alternada a $St=0.5$ a $Re\ 7000$ . . . . .	69
4.43	Mòdul de la velocitat mitjana pel doll pla amb pertorbació sinusoidal alternada a $St=0.5$ a $Re\ 7000$ . . . . .	69
4.44	Perfils de la component u de la velocitat mitjana pel doll pla amb pertorbació sinusoidal alternada a $St=0.5$ a $Re\ 7000$ . . . . .	70
4.45	Perfils de la component v de la velocitat mitjana pel doll pla sense pertorbació sinusoidal alternada a $St=0.5$ a $Re\ 7000$ . . . . .	70
4.46	Perfils rms de la component u de la velocitat mitjana pel doll pla amb pertorbació sinusoidal alternada a $St=0.5$ a $Re\ 7000$ . . . . .	71
4.47	Perfils rms de la component v de la velocitat mitjana pel doll pla sense pertorbació sinusoidal alternada a $St=0.5$ a $Re\ 7000$ . . . . .	71
4.48	Contorns de vorticitat pel doll pla amb pertorbació sinusoidal alternada a $St=0.25$ a $Re\ 7000$ . . . . .	72
4.49	Mòdul de la velocitat mitjana pel doll pla amb pertorbació sinusoidal alternada a $St=0.25$ a $Re\ 7000$ . . . . .	72
4.50	Perfils de la component u de la velocitat mitjana pel doll pla amb pertorbació sinusoidal alternada a $St=0.25$ a $Re\ 7000$ . . . . .	73
4.51	Perfils de la component v de la velocitat mitjana pel doll pla sense pertorbació sinusoidal alternada a $St=0.25$ a $Re\ 7000$ . . . . .	73
4.52	Perfils rms de la component u de la velocitat mitjana pel doll pla amb pertorbació sinusoidal alternada a $St=0.25$ a $Re\ 7000$ . . . . .	74
4.53	Perfils rms de la component v de la velocitat mitjana pel doll pla sense pertorbació sinusoidal alternada a $St=0.25$ a $Re\ 7000$ . . . . .	74
4.54	Contorns de vorticitat pel doll pla amb pertorbació sinusoidal alternada a $St=1.5$ a $Re\ 7000$ . . . . .	75
4.55	Mòdul de la velocitat mitjana pel doll pla amb pertorbació sinusoidal alternada a $St=1.5$ a $Re\ 7000$ . . . . .	75
4.56	Perfils de la component u de la velocitat mitjana pel doll pla amb pertorbació sinusoidal alternada a $St=1.5$ a $Re\ 7000$ . . . . .	76



4.57	Perfils de la component $v$ de la velocitat mitjana pel doll pla sense pertorbació sinusoidal alternada a $St=1.5$ a $Re\ 7000$ . . . . .	76
4.58	Perfils rms de la component $u$ de la velocitat mitjana pel doll pla amb pertorbació sinusoidal alternada a $St=1.5$ a $Re\ 7000$ . . . . .	77
4.59	Perfils rms de la component $v$ de la velocitat mitjana pel doll pla sense pertorbació sinusoidal alternada a $St=1.5$ a $Re\ 7000$ . . . . .	77
4.60	Espectre de freqüències per la component $u$ de la velocitat al punt $x/h = 10, y/H = 2$ al llarg del temps per al doll pla sense pertorbació però amb soroll a $Re\ 7000$ . . . . .	78
4.61	Espectre de freqüències per la component $u$ de la velocitat al punt $x/h = 10, y/H = 2$ al llarg del temps per al doll pla amb pertorbació sinusoidal simètrica amb $St=1.0$ a $Re\ 7000$ . . . . .	80
4.62	Espectre de freqüències per la component $u$ de la velocitat al punt $x/h = 10, y/H = 2$ al llarg del temps per al doll pla amb pertorbació sinusoidal alternada amb $St=1.0$ a $Re\ 7000$ . . . . .	80
4.63	Espectre de freqüències per la component $u$ de la velocitat al punt $x/h = 10, y/H = 2$ al llarg del temps per al doll pla amb pertorbació sinusoidal simètrica amb $St=0.5$ a $Re\ 7000$ . . . . .	81
4.64	Espectre de freqüències per la component $u$ de la velocitat al punt $x/h = 10, y/H = 2$ al llarg del temps per al doll pla amb pertorbació sinusoidal alternada amb $St=0.5$ a $Re\ 7000$ . . . . .	81
4.65	Concentracions instantànies del producte de la reacció química per $Sc=0.5, Da=0.1$ i $St=1.5$ . Disseny factorial 1. . . . .	85
4.66	Concentracions instantànies del producte de la reacció química per $Sc=0.5, Da=0.1$ i $St=0.5$ . Disseny factorial 1. . . . .	85
4.67	Perfils de concentracions d'A a diferents distàncies de l'origen a $Sc=0.5, Da=0.1$ i $St=1.5$ . Disseny factorial 1. . . . .	86
4.68	Perfils de concentracions d'A a diferents distàncies de l'origen a $Sc=0.5, Da=0.1$ i $St=0.5$ . Disseny factorial 1. . . . .	86
4.69	Conversió de l'espècie química A al llarg del doll a $Sc=0.5$ . Disseny factorial 1. . . . .	87
4.70	Conversió de l'espècie química A al llarg del doll a $Sc=1.5$ . Disseny factorial 1. . . . .	87
4.71	Concentracions instantànies del producte de la reacció química per $Sc=0.5, Da=0.1$ i $St=1.5$ . Disseny factorial 2. . . . .	90

4.72	Concentracions instantànnees del producte de la reacció química per $Sc=0.5$ , $Da=0.1$ i $St=0.5$ . Disseny factorial 2. . . . .	90
4.73	Perfils de concentracions d'A a diferents distàncies de l'origen a $Sc=0.5$ , $Da=0.1$ i $St=1.5$ . Disseny factorial 2. . . . .	91
4.74	Perfils de concentracions d'A a diferents distàncies de l'origen a $Sc=0.5$ , $Da=0.1$ i $St=0.5$ . Disseny factorial 2. . . . .	91
4.75	Conversió de l'espècie química A al llarg del doll a $Sc=0.5$ . Disseny factorial 2. . . . .	92
4.76	Conversió de l'espècie química A al llarg del doll a $Sc=1.5$ . Disseny factorial 2. . . . .	92
4.77	Contorns de vorticitat pel doll pla amb pertorbació sinusoidal alterada a $St=0.5$ a $Re=7000$ canviant l'amplada de la pertorbació . . . .	94
4.78	Comparació de la conversió de l'espècie química A al llarg del doll a $St=0.5$ modificant l'amplada de la pertorbació. . . . .	94
4.79	Comparació de la conversió de l'espècie química A al llarg del doll per diferents pertorbacions. . . . .	95
4.80	Isosuperfícies del mòdul de vorticitat a $t=400$ . . . . .	98
4.81	Isosuperfícies de la component $\omega_y$ de la vorticitat a $t=400$ . . . . .	98
4.82	Mitja amplada del doll . . . . .	100
4.83	Decaïment de la velocitat mitja del doll . . . . .	101
4.84	Component $u$ de la velocitat mitjana . . . . .	101
4.85	Component $v$ de la velocitat mitjana . . . . .	102
4.86	Desviació estàndard de la component $u$ de la velocitat . . . . .	103
4.87	Desviació estàndard de la component $v$ de la velocitat . . . . .	104
4.88	Desviació estàndard de la component $w$ de la velocitat . . . . .	104
4.89	Tensor de Reynolds $uv$ . . . . .	105
4.90	Viscositat turbulenta instantània al pla $z=2H$ normalitzada per la viscositat cinemàtica . . . . .	105
4.91	Camp instantani de pressions al pla $z/H=2$ a $t=400$ . . . . .	106
4.92	Perfils de temperatura mitjana . . . . .	108
4.93	Mitja amplada del doll en funció de la temperatura . . . . .	109
4.94	Decaïment de la temperatura mitja al doll . . . . .	110
4.95	Desviació estàndard de la temperatura al doll . . . . .	110
4.96	Concentració instantània de l'espècie química P al pla $z/H=2$ a temps $t=400$ . . . . .	112

4.97	Concentració instantània de l'espècie química P al pla $y/H=9.5$ a temps $t=400$ . . . . .	112
4.98	Concentració mitjana de A a diferents distàncies de l'origen. . . . .	113
4.99	Conversió de l'espècie química A al llarg del doll . . . . .	113



# Índex de taules

3.1	Ordinadors utilitzats . . . . .	34
4.1	Paràmetres utilitzats als dissenys factorials de dos nivells . . . . .	82
4.2	Conversió d'A als diferents casos del disseny factorial 1 . . . . .	84
4.3	Efectes de les variables als disseny factorial 1 . . . . .	84
4.4	Conversió d'A als diferents casos del disseny factorial 2 . . . . .	89
4.5	Efectes de les variables als disseny factorial 2 . . . . .	89
4.6	Dades del creixement de la mitja amplada i el decaïment de la velocitat al centre del doll. Resultats d'aquest treball, d'estudis experimentals i de simulació directa. . . . .	99
4.7	Dades del creixement de la mitja amplada i el decaïment de la temperatura al centre del doll. Resultats d'aquest treball, d'estudis experimentals i de simulació directa. . . . .	108



# Capítol 1

## Introducció

Els dolls plans són fluxos resultants de la interacció de dues capes de barreja simètriques, paral·leles i de diferent signe de vorticitat. Aquesta propietat els caracteritza i els diferencia dins dels diferents fluxos on apareixen les capes de barreja.

Es tracta d'un flux de gran interès pràctic ja que es troba a una gran varietat d'aplicacions industrials com poden ser combustions, propulsions a reacció o fluxos mediambientals. Entendre la dinàmica d'aquest flux és necessari per intentar controlar els fenòmens de transport que s'hi produeixen en aquestes aplicacions.

La zona d'autosimilitud del doll pla desenvolupada aigües avall és de gran interès pel règim turbulent que presenta el flux. No obstant, l'organització de les grans estructures a l'inici del doll pla i el seu impacte a l'evolució i barreja també és important per les seves aplicacions directes. La mescla de matèria en combustió o la generació de soroll en propulsió estan directament influenciades per l'evolució del doll prop de l'entrada.

Amb aquest treball es vol analitzar la interacció entre les estructures del camp dinàmic d'un doll pla reactiu i el transport de les espècies químiques que formen part del sistema. Aquesta anàlisi proporcionarà informació primordial de com augmentar/disminuir la formació de productes químics mitjançant el control de les estructures coherents del flux.

Per portar a terme aquest estudi s'ha desenvolupat un codi de simulació de computació paral·lela per fluxos 2D i 3D, escrit en Fortran 90 i sota la interfície d'enviament de missatges entre processadors MPI.

## 1.1 Revisió bibliogràfica

Per la seva importància al camp de l'enginyeria, els dolls han estat sempre centre d'estudi i anàlisi. Malgrat que normalment els estudis han estat i continuen principalment centrats en dolls circulars [1–11], els avenços tecnològics i la potència computacional han permès orientar els treballs cap a nous camps com són els dolls que impacten contra una paret [12–14], dolls amb seccions d'entrada quadrades, triangulars o rectangulars [5, 15–20] o dolls amb flux lateral [21, 22]. Entre tot aquest ventall de configuracions alternatives al doll circular es troben els dolls plans, font d'estudi d'aquest treball.

### 1.1.1 Estudis experimentals de dolls plans

Al llarg dels anys, s'han realitzat diferents treballs per estudiar els dolls plans mitjançant tècniques experimentals. Un dels primers va ser el d'Albertson et al. [23] que es concentrava en mesurar els perfils de velocitats mitjanes en dolls plans i circulars.

Amb la introducció de la tècnica d'anemometria de fil calent, van aparèixer alguns treballs on es van calcular les quantitats estadístiques relacionades amb el camp mitjà i amb els camps fluctuants turbulents. Miller i Comings [24] van mesurar el camp mitjà de velocitat i pressió, a més dels tensors de Reynolds per als primers quaranta diàmetres aigües avall. Altres treballs posteriors, com els de Bradbury [25], Heskestad [26] i Gutmark i Wygnanski [27], van utilitzar la mateixa tècnica per mesurar els perfils mitjans i de tensor de Reynolds a la regió d'auto-similitud del doll pla. Amb aquests experiments es va demostrar que l'evolució de les velocitats fluctuants, l'amplada del doll i el decaïment de la velocitat al centre estaven fortament afectats per les condicions d'entrada del doll.

Més recentment, utilitzant la tècnica d'anemometria de raig làser per efecte Doppler, Ramaprian i Chandrasekhara [28] van calcular de nou les dades estadístiques de la regió desenvolupada.

Bradbury i Riley [29], Everitt i Robins [30] i posteriorment LaRue et al. [31] van demostrar amb els seus experiments que la presència d'una velocitat de flux corrent alta pot alentir el desenvolupament del doll cap a la zona d'auto-similitud.

Altres treballs es van centrar en l'estudi dels efectes produïts per l'empenta i la transferència d'energia en dolls plans per les seves aplicacions directes en fumeres a



altes temperatures o en descàrregues d'aigua de refrigeració dels cicles de bescanvi de calor en plantes energètiques. Bashir i Uberoi [32], Kotsovinos [33] i Kotsovinos i List [34] van estudiar aquests efectes en dolls plans altament calents, mentres que Jenkins i Goldschmidt [35], Davies, Keffer i Baines [36] van estudiar la mescla a temperatures més moderades.

En general, els primers treballs sobre jets plans es concentraren en l'estudi de les quantitats estadístiques del camp dinàmic. No obstant, les mesures de les correlacions als dolls van augmentar l'interès pels moviments de les grans escales. Les mesures de les correlacions laterals de Goldschmidt i Bradshaw [37] mostren una quasi-periodicitat en el temps, mentres que els coeficients d'autocorrelació Gutmark i Wygnanski [27] i Everitt i Robins [30] per la velocitat longitudinal mostren valors negatius per proves a diferents distàncies. Aquests resultats van ser interpretats com indicadors del moviment ondulatori de les grans escales a la regió d'auto-similitud.

A treballs posteriors de Cervantes i Goldschmidt [38] es va observar que l'aparent freqüència d'ondulació coincidia amb la freqüència de les grans escales. Utilitzant mesures de correlació, Oler i Goldschmidt [39] suggeriren que aquestes estructures eren vòrtex bidimensionals i asimètrics del tipus estela de von Kármán. Utilitzant simulacions numèriques van poder reproduir les correlacions observades. Altres estudis com els de Mumford [40], Oler i Goldschmidt [39], Antonia et al [41] i Goldschmidt, Moallemi i Oler [42] han confirmat aquesta estructura del flux.

Els treballs de Sato [43] i Rockwell i Niccolls [44] i els posteriors d'Antonia et al [41] i Thomas and Goldschmidt [45] han mostrat que, prop de la sortida d'un doll amb un perfil pla (*top-hat*), les estructures predominants són simètriques. Aquest comportament s'observa amb més claredat a l'inici dels dolls plans. Antonia et al [41] van comprovar que la transició cap a la turbulència s'inicia a la regió on les dues capes de barreja convergeixen i interaccionen entre elles. En aquesta regió el perfil de velocitat mitjana evoluciona des d'un perfil relativament pla cap a un perfil parabòlic. Sato [43] i Rockwell i Niccolls [44] van demostrar que les estructures asimètriques al doll són característiques d'un perfil de velocitat mitjà curvat. Per això, els dolls que evolucionen des de l'entrada amb un perfil curvat mostren un mode asimètric a la regió inicial.

Thomas and Goldschmidt [45, 46] van estudiar el creixement de les grans estructures en les regions inicials per a dolls plans turbulents. Van identificar modes simètrics i antisimètrics al camp proper a la sortida i suggeriren que els modes an-

tisimètrics eren deguts al forçament que les estructures produïen sobre les capes de barreja passat el punt de convergència. Thomas i Chu [47] van analitzar l'evolució del camp proper a la sortida imposant un petit forçament acústic per tal d'organitzar les inestabilitats inicials i així facilitar l'estudi. De manera similar, Peacock et al. [48] van realitzar uns experiments de dolls forçats mitjançant vibradors mecànics de petita mida situats a la sortida del doll.

Molts dels treballs experimentals de dolls plans s'han concentrat en l'evolució des de la regió dominada per les capes de barreja cap a la regió on el doll és completament desenvolupat o en les característiques de les grans estructures lluny de l'entrada. No obstant, hi ha algunes excepcions. Lemieux i Oosthuizen [49] i Namer i Ötügen [50] estudiaren els efectes del número de Reynolds a la zona inicial del doll i Huang i Hsiao [51] van analitzar mitjançant anemometria de fils calents la influència de pertorbacions artificials a l'entrada del doll sobre els perfils de velocitat mitjana.

En els darrers anys, s'han realitzat diferents estudis de reconeixement d'estructures per descomposició ortogonal aplicats a dolls. Per exemple, Faghani, Sévrain i Boisson [52] estudiaren un doll forçat a Reynolds 5600 mentre que Gordeyev i Thomas [53, 54] analitzaren les estructures coherents al jet pla turbulent a un Reynolds 28000.

### 1.1.2 Estudis numèrics de dolls plans

En comparació amb els estudis experimentals, a la bibliografia s'hi troben molt pocs estudis numèrics de dolls plans. En un primer treball, Oler and Goldschmidt [39] van comprovar l'estructura d'estela de von Karman simulant un doll bidimensional completament desenvolupat com una estela de vòrtexs creixents amb una superposició de vòrtexs de Rankine. El creixement aigües avall va ser fixat per complir l'auto-similitud observada als experiments.

Comte, Lesieur, Laroche i Normand [55] realitzaren simulacions temporals de la regió desenvolupada per un doll bidimensional seguint l'equació de Bickley per als dolls. Per simulacions inicialitzades amb una pertorbació de soroll blanc es va trobar un deixant von Karman mostrant acoblament entre vòrtexs de mateix signe. No obstant, quan el flux inicial contenia una pertorbació sinusoidal en la direcció del flux, el deixant von Karman es formava però desapareixia l'acoblament de vòrtexs.

Dai, Kobayashi i Taniguchi [56] realitzaren les primeres simulacions de l'evo-

lució de dolls plans subsònics. Van realitzar simulacions LES amb el model de turbulència de Smagorinsky. Obteniren bons resultats pels perfils mitjans, però les intensitats de turbulència eren un 40% més grans que les obtingudes experimentalment. De la mateixa manera, Weinberger, Rewerts i Janicka [57] van obtenir uns valors 15% alts per les fluctuacions a la seva simulació d'un doll pla turbulent i incompressible utilitzant també el model Smagorinsky.

En un altre treball, Reichert i Biringen [58] van analitzar els efectes de la compressibilitat en l'evolució espacial de dolls bidimensionals amb una velocitat de co-flux alta. Van demostrar una reducció en el creixement del doll i en la velocitat transversal quan el número de Mach augmentava.

Bastin, Lafon i Candel [59] estudiaren el soroll emès pel doll pla turbulent per demostrar que gran part d'aquest soroll és produït per les grans escales del flux. Seguint la mateixa línia, Cerviño et al [60] van analitzar la interacció d'un doll amb una pertorbació acústica situada a diferents punts del domini.

Per altra banda, Lo, Voke i Rockliff [61] simularen el doll pla a números de Reynolds baixos per identificar estructures coherents en el flux tridimensional.

Realitzant simulacions numèriques directes (DNS), Silva i Métais [62] estudiaren la influència de les estructures principals del doll pla turbulent sobre l'escala de la xarxa i la subxarxa. Akhavan et al. [63] també van estudiar les interaccions a la regió de subescala analitzant la transferència d'energia.

També destaquen els diferents treballs de Le Ribault, Sarkar i Stanley [64–68] amb simulacions de dolls bidimensionals periòdics i tridimensionals turbulents. Van comparar l'eficàcia d'alguns models de simulació de grans escales amb resultats de simulació directa. També empraren el codi desenvolupat per analitzar el transport d'un escalar passiu en un doll pla turbulent.

En els últims anys, s'han realitzat altres estudis numèrics sobre dolls plans però en configuracions alternatives. Així, per exemple, es troben els treballs de Nasr i Lai [69, 70] sobre la interacció de dos dolls plans propers o els estudis de Scibilia i Lain [71] sobre un doll pla parietal.

## 1.2 Objectius

Malgrat que en els últims anys han aparegut diferents treballs sobre dolls plans que aporten molta informació sobre aquesta configuració, encara existeixen grans

buits de coneixement al respecte. Segons la recerca bibliogràfica portada a terme, no existeix cap investigació numèrica o experimental realitzada sobre sistemes reactius en dolls plans. És per aquest motiu que amb aquest treball es pretèn omplir aquest buit del coneixement estudiant la influència de les estructures coherents del flux sobre un sistema reactiu  $A + B \rightarrow P$ .

Tal i com s'ha comprovat en estudis anteriors, el camp dinàmic està fortament influenciat per les condicions a l'entrada del doll. Amb aquest treball es demostrarà que el control de pertorbacions aplicades a l'entrada del doll pla pot determinar el desenvolupament i les estructures coherents del flux. A més, aquestes inestabilitats artificials poden governar indirectament el sistema reactiu augmentant o disminuint el consum i la producció de les espècies químiques aigües avall segons els resultats desitjats.

Per portar a terme aquest objectiu, s'ha desenvolupat un nou codi de computació paral·lela en Fortran 90 sota l'entorn MPI d'intercanvi de missatge entre processadors prenent com a base el codi 3DINAMICS [72]. El nou codi soluciona numèricament les equacions de transport de quantitat de moviment, d'energia i de matèria amb reacció discretitzades sobre volums de controls en dominis 2D i 3D. Al programa computacional s'ha incorporat la tècnica de simulació de grans escales amb el model Smagorinsky per analitzar fluxos turbulents sense la necessitat de solucionar totes les escales del flux. Amb aquest procediment, l'efecte de les petites escales per sota de la mida de la xarxa computacional queda modelitzat i només es resolen les escales responsables del transport de quantitat de moviment, energia i matèria. La tècnica de paral·lelització emprada permet executar les simulacions en sistemes multiprocessadors repartint els càlculs entre diferents màquines i recopilant els resultats a la seva finalització.

Amb aquest codi s'ha realitzat un primer anàlisi del sistema dinàmic d'un doll pla dèbil bidimensional i els efectes que les pertorbacions a l'entrada produeixen corrent avall sobre el camp de velocitats i pressió. L'existència d'una velocitat alta al flux co-corrent permet centrar l'estudi en la zona inicial d'inestabilització del doll. S'ha analitzat els efectes que les estructures, controlades per la freqüència i tipus de pertorbació, produeixen sobre el camp de concentracions del sistema reactiu. Finalment s'ha determinat quines condicions optimitzen la reacció augmentant la conversió i quines alenteixen la formació del producte.

També s'ha analitzat un doll pla tridimensional, fort i turbulent amb transport de matèria i reacció, comparant les dades estadístiques del camp dinàmic a la regió

d'autosimilitud amb dades experimentals de la bibliografia. En aquest cas la velocitat del flux co-corrent és baixa i s'obté una regió turbulenta prop de l'entrada del doll. Els resultats mostren l'efecte de l'evolució del camp dinàmic cap a la zona turbulenta sobre el sistema reactiu. A la regió turbulenta la mescla de les espècies químiques millora considerablement ja que la difusió turbulenta actua com a mecanisme de barreja i transport. Aquesta millora en la mescla augmenta la conversió de la reacció.



# Capítol 2

## Fonaments

### 2.1 Anàlisi teòrica

Les equacions que governen el flux viscos d'un fluid en règim laminar i turbulent amb transferència de calor i reacció són: l'equació de continuïtat i les equacions de transport de quantitat de moviment, energia i matèria. En aquest apartat es presenten aquestes equacions i un seguit d'hipòtesis que descriuran les característiques del problema físic que ens interessa.

#### 2.1.1 Hipòtesis

Se suposaran certes un seguit d'aproximacions sobre les característiques del fluid, del flux i del sistema.

- El flux és newtonià, és a dir, l'esforç de tall és proporcional a la deformació del fluid.
- La densitat es considera constant (condició de flux incompressible).
- Cap força exterior actua sobre el sistema.
- La variació de temperatura no afecta al camp dinàmic.
- La dissipació d'energia viscosa es considera negligible.
- L'entalpia de reacció és menyspreable.
- El coeficient de difusivitat de totes les espècies químiques presents al sistema es considera constant.

### 2.1.2 Equacions de transport

Sota aquestes hipòtesis esmentades, les equacions en coordenades cartesianes i notació tensorial es redueixen a les següents expressions.

#### Equació de continuïtat

Aquesta equació expressa la conservació de matèria.

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (2.1)$$

#### Equació de transport de quantitat de moviment

També coneguda com a equació de Navier-Stokes,

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + \frac{\partial u_j u_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_i} \quad (2.2)$$

on el tensor esforç  $\tau_{ij}$  ve donat per

$$\tau_{ij} = \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \right) \quad (2.3)$$

aquesta equació expressa la conservació de quantitat de moviment. Els quatre sumands que la formen representen respectivament l'evolució temporal, el transport per convecció, el terme de pressió i les forces viscoses actuant sobre el fluid.

#### Equació de transport d'energia

L'expressió per la conservació d'energia es pot presentar en funció de variables com l'energia interna, la pressió, etc. En aquest treball s'escriu en funció de la temperatura.

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial u_j T}{\partial x_j} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x_j^2} \quad (2.4)$$

Sota les hipòtesis esmentades, l'equació coincideix amb l'expressió de transport d'un escalar passiu.

S'observa que, malgrat estar implementant un flux amb transport d'energia, s'està menyspreant les forces d'empenta ja que s'assumeix que els termes convec-



tius tenen molta més importància que els termes d'empenta. Aquesta hipòtesi és assumible quan el número adimensional de Richardson considerat ( $Gr/Re^2$ ) és molt més petit que 1.

### Equació de transport de matèria

L'evolució de les espècies químiques presents al sistema s'expressa com

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} + \frac{\partial u_j C_i}{\partial x_j} = \mathcal{D} \frac{\partial^2 C_i}{\partial x_j^2} + R_C \quad (2.5)$$

on  $R_C$  és el terme de reacció. En aquest treball s'estudia una reacció química irreversible de segon ordre del tipus  $C_1 + C_2 \xrightarrow{k_C} C_3$ . En aquesta reacció de síntesi es combinen les mol·lècules de dues espècies químiques  $C_1$  i  $C_2$  per formar un producte  $C_3$ .

Introduïnt l'expressió de l'equació química del sistema, es pot reescriure l'equació (2.5):

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} + \frac{\partial u_j C_i}{\partial x_j} = \mathcal{D} \frac{\partial^2 C_i}{\partial x_j^2} \pm k_C C_1 C_2 \quad (2.6)$$

El signe de l'últim terme ( $k_C C_1 C_2$ ) és negatiu pels reactius de la reacció,  $C_1$  i  $C_2$ , i és positiu per al producte,  $C_3$ .

En l'estudi que aquí es presenta, també s'assumeix que  $k_C$  és constant, és a dir, que la constant cinètica és independent de la temperatura.

### 2.1.3 Adimensionament de les equacions

Per tal de generalitzar els resultats obtinguts, s'han escalat les variables en funció de les seves magnituds característiques, obtenint les equacions anteriors expressades amb variables adimensionals.

Considerant les escales de referència  $l_0$  i  $u_0$  per la longitud i la velocitat, es poden definir les escales de temps i pressió:  $t_0 = l_0/u_0$  i  $P_0 = \rho u_0^2$ . Dividint pel valor referència obtenim unes noves variables adimensionalitzades:  $u_i = u_i/u_0$ ,  $x_i = x_i/x_0$ ,  $t = t/t_0$  i  $P = P/P_0$ .

L'equació de continuïtat i les equacions de Navier-Stokes en funció d'aquestes variables s'expressen com

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (2.7)$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + \frac{\partial u_j u_i}{\partial x_j} = \frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{1}{Re} \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_i} \quad (2.8)$$

on  $Re$  és el número adimensional de Reynolds ( $Re = u_0 l_0 / \nu$ ) que expressa la relació entre les forces inercials i les viscoses.

Es pot operar anàlogament per a la temperatura. En aquest cas, però, s'adimensionalitza en funció de la temperatura màxima  $T_{max}$  i la temperatura mínima  $T_{min}$  aconseguint que la nova variable prengui valors entre 0 i 1:

$$T = \frac{T - T_{min}}{T_{max} - T_{min}}$$

La nova equació de transport d'energia

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial u_j T}{\partial x_j} = \frac{1}{RePr} \frac{\partial^2 T}{\partial x_j^2} \quad (2.9)$$

depèn del número de Reynolds i del número de Prandtl, que relaciona els coeficients de difusivitat de la quantitat de moviment amb la difusió tèrmica.

$$Pr = \frac{\nu}{\alpha}$$

Per les espècies químiques el procés és similar. Prenent una concentració de referència  $C_0$  comuna per tota les espècies, s'introdueix la variable adimensionalitzada  $C_i = c_i / C_0$ .

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} + \frac{\partial u_j C_i}{\partial x_j} = \frac{1}{ReSc} \frac{\partial^2 C_i}{\partial x_j^2} \pm Da C_1 C_2 \quad (2.10)$$

El número de Schmidt,  $Sc$ , anàleg al número de Prandtl, expressa la raó entre les difusivitats de quantitat de moviment i matèria.

$$Sc = \frac{\nu}{D}$$

$Da$ , el número de Damköhler, és el quocient entre els temps de consum-producció per reacció química i el temps característic de transport per convecció.

$$Da = \frac{k_c C_0 l_0}{u_0}$$

Quan  $Da \ll 1$  la reacció es pot considerar lenta, ja que les concentracions de les

espècies químiques estan governades principalment pel camp dinàmic. En aquest cas, els reactius es consideren ben barrejats a nivell molecular on la reacció té lloc. Contràriament, quan  $Da \gg 1$ , el temps característic de la reacció és molt més gran que el convectiu i a nivell molecular les espècies estan segregades.

#### 2.1.4 Simulació de grans escales

En simulació numèrica directa (DNS), les equacions (2.7), (2.8), (2.9) i (2.10) per fluxos turbulents no requereixen de cap model addicional, ja que es calculen totes les escales de moviment afegint prou punts de càlcul. Quan les equacions es resolen numèricament per a números de Reynolds alts, les simulacions són més costoses a causa dels alts recursos computacionals requerits. Tal i com explica Piomelli [73], per realitzar una simulació numèrica directa tridimensional d'un flux turbulent resolent totes les escales el nombre de punts necessaris és de l'ordre de  $Re^{9/4}$ . Així per exemple, per un número de Reynolds de  $10^4$ , caldrien  $10^9$  punts de càlcul, un valor inviable per als ordinadors d'avui en dia tant pels requisits de memòria com pel temps de computació.

Existeixen diferents opcions per obtenir solucions numèriques acurades en un temps de computació raonable, com poden ser els mètodes *RANS*. No obstant, la solució més estesa en els últims anys és la simulació de grans escales o Large Eddy Simulation (LES). Amb aquesta tècnica només es resol directament la contribució de les grans estructures, les que contenen l'energia, mentres que els efectes de les petites escales de turbulència es modelitzen. Els principals avantatges d'aquesta tècnica són la reducció de l'esforç computacional mantenint la precisió del DNS a les escales resoltes. La simulació de grans escales es basa en que aquestes són més dependents del problema i estan determinades per la geometria i les condicions del contorn del flux estudiat. En canvi, les petites escales, responsables de la dissipació d'energia, són menys dependents de la configuració i tendeixen a ser més isotròpiques i, per tant, més universals i modelitzables.

#### Filtratge de les equacions

Per obtenir les equacions per les grans escales, LES es basa en l'operació filtratge. Una variable filtrada  $\bar{f}$ , aquella que es resol i que pertany a les grans escales, es definirà com

$$\bar{f} = \int_D f(\vec{x}) G(\vec{x}, \vec{x}') d\vec{x}' \quad (2.11)$$

on  $D$  és el domini de filtrat i  $G$  és la funció filtre. La funció  $G$  determinarà la grandària i l'estructura de les petites escales. A la bibliografia es proposen diferents funcions filtre: gaussiana, fourier, etc. En aquest treball s'utilitza el filtratge més comú en coordenades cartesianes: la funció quadrada

$$G(\vec{x}) = \begin{cases} 1/\Delta & \text{si } |\vec{x}| \leq \Delta/2 \\ 0 & \text{altrament} \end{cases} \quad (2.12)$$

amb  $\Delta$  igual a la mida de les cel·les de càlcul.

Aplicant el filtre a les equacions de govern, s'obté

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_i} = 0 \quad (2.13)$$

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \bar{u}_j \bar{u}_i}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i} + \frac{1}{Re} \frac{\partial^2 \bar{u}_i}{\partial x_j \partial x_j} + \frac{\partial \zeta_{ij}}{\partial x_j} \quad (2.14)$$

$$\frac{\partial \bar{T}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{u}_j \bar{T}}{\partial x_j} = \frac{1}{RePr} \frac{\partial^2 \bar{T}}{\partial x_j^2} + \frac{\partial H_j^T}{\partial x_j} \quad (2.15)$$

$$\frac{\partial \bar{C}_i}{\partial t} + \frac{\partial \bar{u}_j \bar{C}_i}{\partial x_j} = \frac{1}{ReSc} \frac{\partial^2 \bar{C}_i}{\partial x_j^2} \pm Da \overline{C_1 C_2} + \frac{\partial H_j^C}{\partial x_j} \quad (2.16)$$

### Termes de subescala

Durant el procés de filtratge, apareixen nous termes a les equacions que introdueixen la influència de la subescala: el tensor esforç de subescala

$$\zeta_{ij} = \bar{u}_i \bar{u}_j - \overline{u_i u_j} \quad (2.17)$$

i els fluxos de temperatura i matèria

$$H_j^T = \bar{u}_j \bar{T} - \overline{u_j T} \quad (2.18)$$

$$H_j^C = \bar{u}_j \bar{C} - \overline{u_j C} \quad (2.19)$$

Tal i com es pot observar, aquests termes no es poden calcular explícitament, ja que no depenen únicament de les variables calculades,  $\bar{u}_i$ ,  $\bar{T}$ ,  $\bar{P}$  i  $\bar{C}_i$ . Així doncs, cal modelitzar-los i expressar-los en funció dels valors coneguts.

El tensor esforç de subescala (subgrid scale - SGS) es modelitza sovint en funció d'una viscositat de subescala  $\nu_{SGS}$  o, en el cas adimensional, un Reynolds de subescala apropiat.  $\zeta_{ij}$  s'expressa com

$$\zeta_{ij} - \frac{\delta_{ij}}{3}\zeta_{kk} = -2\frac{1}{Re_{SGS}}\bar{S}_{ij} \quad (2.20)$$

on  $\delta_{ij}$  és la delta de Kronecker i el terme  $\bar{S}_{ij}$  és

$$\bar{S}_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial\bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial\bar{u}_j}{\partial x_i}\right) \quad (2.21)$$

En aquest treball es modelitza el tensor de Reynolds per subescala mitjançant l'aproximació de Smagorinsky [74]. Aquest model es basa en la hipòtesi que les escales petites de moviment tenen associades una escala temporal inferior a la de les grans escales del flux, les que transporten l'energia. Per tant, suposa que s'ajusten més ràpidament a les pertorbacions i assolixen l'equilibri gairebé instantàneament. Matemàticament, aquesta hipòtesi es representa per la igualtat

$$\frac{1}{Re_{SGS}} = (C_s\Delta)^2|\bar{S}| \quad (2.22)$$

on  $|\bar{S}| = \sqrt{2\bar{S}_{lm}\bar{S}_{lm}}$ .

El coeficient constant del model,  $C_s$ , conegut com a constant de Smagorinsky, depèn del sistema estudiat. A la bibliografia es poden trobar diferents valors proposats. Als càlculs realitzats en aquest treball, s'ha emprat  $C_s = 0.13$ , que correspon al valor mitjà obtingut per Vreman [75] amb el model Smagorinsky dinàmic per a una capa de barreja.

Els fluxos de subescala de temperatura i matèria es poden modelitzar a partir de la viscositat de subescala utilitzant un model similar al que s'utilitza pel tensor  $\zeta_{ij}$ .

$$H_j^T = \bar{u}_j\bar{T} - \overline{u_j T} = \frac{1}{Re_{SGS}Pr_{SGS}}\frac{\partial\bar{T}}{\partial x_j} \quad (2.23)$$

$$H_j^C = \overline{u_j C_i} - \overline{u_j} \overline{C_i} = \frac{1}{Re_{SGS} Sc_{SGS}} \frac{\partial \overline{C_i}}{\partial x_j} \quad (2.24)$$

Els valors  $Pr_{SGS}$  i  $Sc_{SGS}$  corresponen als números de Prandtl i Schmidt d'escala petita. Estudis realitzats en els últims anys [76–78] demostren que per una capa de barreja, el valor de  $Pr_{SGS}$  es manté pràcticament constant al llarg del temps i l'espai. D'aquests treballs es desprén que per un Prandtl laminar de 0.71 el valor del Prandtl de subescala és 0.4.

Per al valor del Schmidt turbulent, la bibliografia és més escassa. En aquest treball, s'utilitza el mateix valor que per  $Pr_{SGS}$  ja que els efectes de la difusió molecular turbulenta quan el sistema reactiu és lent són similars al cas amb un escalar passiu o amb la temperatura.

A l'equació de transport de matèria, també hi apareix un segon terme afectat pel procés de filtratge: el terme reactiu. Aquest terme es pot descomposar en part resolta i part de subescala obtenint

$$Da \overline{C_1 C_2} = Da \overline{C_1} \overline{C_2} + Da \overline{C_1' C_2'} \quad (2.25)$$

Totes dues expressions es relacionen en el paràmetre intensitat de segregació de subescala  $I_{SGS}$ :

$$I_{SGS} = \frac{\overline{C_1' C_2'}}{\overline{C_1} \overline{C_2}} \quad (2.26)$$

Aquest paràmetre  $I_{SGS}$ , quocient entre la covariància de les fluctuacions de les concentracions i el producte de les concentracions mitjanes, pot prendre valors dins l'interval [-1,0]. Quan  $I_{SGS} = 0$ , la mescla és homogènia, és a dir, les espècies  $C_1$  i  $C_2$  es troben totalment barrejades a escala molecular. En aquesta situació, les fluctuacions al camp dinàmic no tenen cap efecte en la velocitat de la reacció. El cas contrari, quan  $I_{SGS} = -1$ , es pot tenir mescla perfecta macroscòpicament però a escala molecular les espècies químiques estan segregades i es fa necessari modelitzar l'evolució  $\overline{C_1' C_2'}$  a l'equació de transport de matèria [79]. A l'última dècada s'han realitzat diferents estudis sobre el comportament de la intensitat de segregació demostrant la seva forta dependència respecte el número de Reynolds, de Schmidt i Damköhler [2, 80–82]

Les reaccions considerades en aquest treball són relativament lentes i per tant se suposa que la difusió turbulenta té suficient temps per mesclar perfectament els reactius abans que la reacció química tingui un valor significatiu. D'aquesta manera

se suposa que la intensitat de segregació és nul·la i que

$$Da \overline{C_1 C_2} = Da \overline{C_1} \overline{C_2}$$

## 2.2 Mètodes numèrics

Les equacions diferencials que descriuen el transport de quantitat de moviment, energia i matèria tenen solucions analítiques en casos molt concrets i per condicions de contorn molt limitades. La modelització de dolls en règim turbulent i amb reacció química només es poden resoldre numèricament. El procediment emprat es basa en la transformació del domini físic continu a un espai computacional discret, on es resolen les equacions algebraïques resultants de la discretització espai-temporal de les equacions de transport.

### 2.2.1 Discretització

El pas de l'espai continu al discret no és únic ja que es pot realitzar amb diferents mètodes: diferències finites, elements finits, etc. En aquest treball s'utilitza la formulació per volums de control. Aquesta tècnica consisteix en dividir el domini computacional en diferents volums elementals que no se solapen i que contenen un únic punt de xarxa computacional. En cadascun d'aquests volums elementals el valor de les variables es considera constant. Les figures 2.1, 2.2 i 2.3 mostren els volums de control unidimensional, bidimensionals i tridimensionals.

El principal avantatge d'aquesta tècnica és que la solució compleix els balanços de quantitat de moviment, energia i matèria sobre qualsevol volum de control independentment de la xarxa i del número de punts. Com a conseqüència, la solució té sentit físic inclús en xarxes més grolleres.

Per obtenir les equacions discretitzades, s'integren les equacions diferencials originals sobre cada volum. Per il·lustrar el procés, es pot prendre per exemple l'equació de conservació d'una variable  $\Phi$

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + \frac{\partial u_i \Phi}{\partial x_i} = S_\Phi + \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \Gamma_\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial x_i} \right) \quad (2.27)$$

Es pot identificar cadascun dels sumands d'aquesta equació (llegint-los d'esquerra a dreta) com a: terme temporal, terme convectiu, terme font i terme difussiu.

Integrant l'equació sobre un volum de control  $V$  s'obté

$$\iiint_V \frac{\partial \Phi}{\partial t} dV + \iiint_V \frac{\partial u_i \Phi}{\partial x_i} dV = \iiint_V S_\Phi dV + \iiint_V \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \Gamma_\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial x_i} \right) dV \quad (2.28)$$

Aplicant el teorema de la divergència, que transforma les integrals de volum en



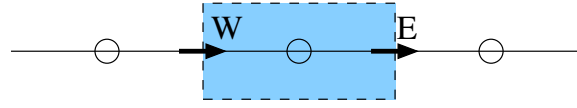


Figura 2.1: Volum de control 1-dimensional

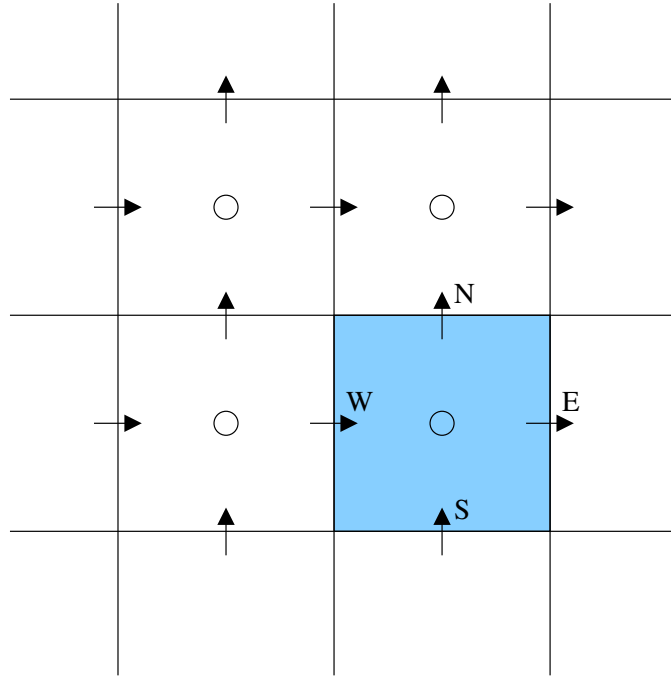


Figura 2.2: Volum de control 2-dimensional

integrals d'àrea, i tenint en compte que el terme temporal i el font són constants a l'interior del volum de control, s'obté l'expressió:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} V + \iint_S u_i \Phi dS = S_\Phi V + \iint_S \Gamma_\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial x_i} dS \quad (2.29)$$

on les integrals d'àrea es calculen a les parets del volum de control.

Sobre volums de control tridimensionals l'expressió final de la discretització és

$$\begin{aligned} \frac{\Phi^{n+1} - \Phi^n}{\Delta t} + \frac{(u_1 \Phi)_E - (u_1 \Phi)_W}{\Delta x} + \frac{(u_2 \Phi)_N - (u_2 \Phi)_S}{\Delta y} + \frac{(u_3 \Phi)_F - (u_3 \Phi)_B}{\Delta z} = \\ S_\Phi + \frac{(\Gamma_\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial x})_E - (\Gamma_\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial x})_W}{\Delta x} + \frac{(\Gamma_\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial y})_N - (\Gamma_\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial y})_S}{\Delta y} + \frac{(\Gamma_\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial z})_F - (\Gamma_\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial z})_B}{\Delta z} \end{aligned} \quad (2.30)$$

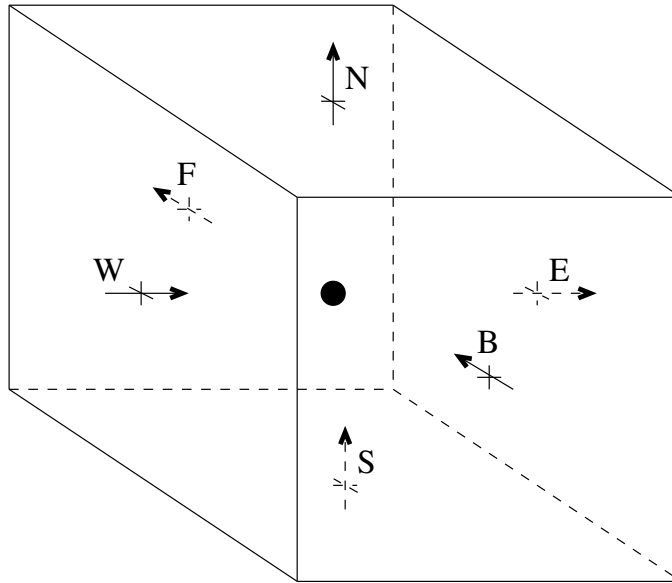


Figura 2.3: Volum de control 3-dimensional

Arribat aquest punt, cal escollir un esquema d'interpolació per trobar el valor dels termes convectius i difusius. Per la integració temporal de les equacions en derivades parcials es poden escollir esquemes implícits on l'expressió és funció de la variable al nou pas de temps o esquemes explícits que només depenen del valor de la funció al pas de temps anterior. En aquest treball s'han implementat mètodes explícits.

### 2.2.2 Xarxa computacional

Els sistemes estudiats en aquest treball presenten gradients de velocitat, temperatura i concentració molt grans en determinades zones del domini. Per solucionar correctament aquests gradients, cal tenir un número suficient de punts en aquestes regions. L'ús d'una xarxa uniforme prou fina, per obtenir correctament la solució en les zones conflictives, és computacionalment car ja que s'afegeixen punts de càlcul addicionals a zones on no hi calen. S'ha resolt aquest problema utilitzant xarxes amb regions no uniformes que concentren més punts en les regions on són necessaris. Pel cas de dolls plans, el gradients més grans es troben a la capa de barreja a ambdós costats del doll.

Per tal de calcular la posició dels nodes en xarxes no uniformes, s'ha utilitzat una progressió geomètrica entre espaiats successius, procurant mantenir la raó de la

progrèssió dins l'interval  $[1, 1.2]$  per evitar les inestabilitats numèriques que presenten les xarxes molt escarpades [72].

L'ús d'una única xarxa per a totes les variables pot crear alguns problemes. Si les velocitats s'especifiquen al mateix punt que els escalars (pressió, viscositat, temperatura, concentracions, etc.) la influència de la pressió pot no representar-se correctament a les equacions discretitzades. Això pot comportar que s'obtinguin camps de pressions sense sentit físic, tal i com descriu Patankar [83].

Per solucionar aquest problema és recomenable l'ús de xarxes decalades. Aquest tipus de xarxes, introduïdes per primer cop per Harlow i Welch [84] en el mètode MAC, es construeixen situant les velocitats als límits dels volums de control dels escalars. D'aquesta manera, són necessàries quatre xarxes diferents per resoldre les equacions diferencials: una pels escalars i una per cada component de la velocitat, que es troba desplaçada mitja cel·la en la direcció corresponent.

Les principals característiques de les xarxes decalades són:

- l'equació de continuïtat discretitzada es calcula a partir de les diferències de components de la velocitat adjacents
- la diferència de pressió entre dos punts adjacents es converteix en la força natural que dirigeix la component de la velocitat situada entre aquests dos punts
- el flux màssic a les parets de les cel·les dels escalars es pot calcular sense necessitat de cap interpolació per les velocitats.

### 2.2.3 Acoblament velocitat-pressió

Suposem que a temps  $t = t^n$  coneixem els camps de velocitat  $V^n$  i de pressió  $P^n$  i que volem trobar els valors d'aquests camps per al següent pas de temps  $t = t^{n+1}$ . Linearitzant el terme convectiu, l'equació que cal resoldre és

$$\frac{V^{n+1} - V^n}{\Delta t} + \text{div}(V^n V^{n+1}) = \text{div}\left(\frac{1}{Re} \text{grad} V^{n+1}\right) - \text{grad} P^{n+1} \quad (2.31)$$

Però l'acoblament de la velocitat i pressió impossibilita la resolució en un únic pas, ja que tenim dues incògnites,  $V^{n+1}$  i  $P^{n+1}$ , i una única equació.

A la bibliografia existeixen diferents mètodes numèrics que solucionen aquest acoblament: Mac [84], Simple [85], Piso [86], ... En aquest treball s'ha utilitzat el

mètode SMAC, introduït inicialment per Amsden i Harlow [87] per xarxes decalades. Aquest mètode, també emprat per Braza [88, 89] i Cazalbou [90], es basa en la resolució de l'equació de Navier-Stokes en dues etapes. La primera, etapa predictor, calcula les velocitats explícitament en funció de les velocitats i pressions del pas de temps anterior, no complint l'equació de continuïtat. La segona, etapa correctora, resol una equació de Poisson per tal de corregir les velocitats i la pressió i obtenir un camp de divergència nul·la. La deducció de l'algorisme SMAC es mostra tot seguit.

a) Etapa predictor:

Es resol l'equació 2.31 per  $V^*$ , una aproximació de les velocitats  $V^{n+1}$  que no compleix necessàriament l'equació de continuïtat.

$$\frac{V^* - V^n}{\Delta t} + \text{div}(V^n V^*) = \text{div}\left(\frac{1}{Re} \text{grad} V^*\right) - \text{grad} P^n \quad (2.32)$$

b) Etapa correctora:

Un cop calculada  $V^*$ , es vol trobar  $V^{n+1}$  que compleixi l'equació (2.31). Tots dos camps,  $V^{n+1}$  i  $V^*$ , es poden relacionar amb una funció potencial  $\Psi$ :

$$V^{n+1} - V^* = -\text{grad}\Psi \quad (2.33)$$

Calculant la divergència a l'equació 2.33 i tenint en compte que  $\text{div}V^{n+1} = 0$  s'obté

$$\text{div}V^* = \text{div}(\text{grad}\Psi) = \Delta\Psi \quad (2.34)$$

una equació de Poisson que relaciona  $\Psi$  amb l'aproximació de les velocitats obtingudes a l'etapa predictor. Resolent aquesta equació, es pot obtenir la funció potencial i aplicant la solució a l'equació 2.33 s'aconsegueixen les velocitats en temps  $t^{n+1}$ .

Realitzant la diferència entre les equacions 2.32 i 2.31 es troba una expressió pel camp de pressions al nou pas de temps:

$$\text{grad}P^{n+1} = \text{grad}\left(P^n + \frac{\Psi}{\Delta t}\right) + \text{div}(V^n \text{grad}\Psi) - \frac{1}{Re} \nabla^2(\text{grad}\Psi) \quad (2.35)$$

Tal i com proposa Braza [89], els dos últims termes tenen poc efecte sobre

l'equació i es poden menysprear, obtenint l'expressió final per  $P^{n+1}$

$$P^{n+1} = P^n + \frac{\Psi}{\Delta t} \quad (2.36)$$

És clar que l'equació (2.34) només és vàlida pels punts interiors del domini. L'ús del mètode SMAC requereix un tractament especial de la variable  $\Phi$  als contorns. En aquest treball, s'imposa  $\Phi = 0$  com a condició als contorns en la direcció transversal (condició de pressió constant), i condició de Neumann  $\frac{\partial}{\partial x} = 0$  en l'entrada del doll (condició de velocitat constant). Al cas tridimensional, en la direcció  $z$  s'especifiquen condicions periòdiques. Pel contorn que creuen les recirculacions, s'empren condicions diferents pel doll dèbil i pel doll fort. Al primer s'utilitzen condició de Neumann mentre que al segon un valor nul per  $\Phi$ . Aquesta diferència és necessària per aconseguir l'estabilitat del càlcul i està causada per la variació de les condicions de contorn per la velocitat.

### 2.2.4 Esquemes de discretització

L'elecció d'un bon esquema de discretització és un factor important en la precisió de les simulacions de dinàmica de fluids. Trobar un compromís entre uns càlculs acurats amb un error mínim, estabilitat numèrica i un temps de computació raonable són els requisits que hom demana normalment a qualsevol esquema numèric.

En el codi computacional els termes difusius han estat discretitzats amb un esquema centrat de segon ordre. Pel terme temporal, s'ha escollit un esquema de segon ordre Adams-Bashfort.

Tal i com va demostrar Patankar [83], l'ús d'una aproximació centrada de segon ordre pel terme convectiu produeix inestabilitats quan el número de Peclet de cel·la (Reynolds local) supera el valor de dos. Per tal de solucionar aquest problema, a l'equació de transport de quantitat de moviment s'utilitza l'esquema Quick (Quadratic Upstream Interpolation for Convective Kinematics) de Leonard [91]. Aquest esquema té la precisió del centrat de segon ordre sense el problema d'inestabilitats.

Al cas de dolls plans existeix un problema afegit: la modelització de fluxos on el transport convectiu és molt més important que el difusiu. Les simulacions de dolls presenten una direcció principal en la qual el transport està dominat per la part convectiva. En aquesta situació, molts esquemes numèrics de discretització són inadequats per transportar convectivament variables amb gradients forts en aquesta

direcció, produint una excessiva difusió artificial o oscil·lacions fictícies. Aquest fet porta a solucions no físiques com, per exemple, concentracions negatives.

Per solucionar aquest problema s'ha escollit el mètode *ULTIMATE* de Leonard [92]. Aquest mètode consisteix en una modificació aplicable a qualsevol esquema de discretització per tal d'obtenir un nou esquema més robust que elimini les oscil·lacions fictícies quan hi ha gradients forts que es desplacen convectivament. No obstant, aquest mètode té l'inconvenient d'haver estat desenvolupat per a casos unidimensionals. Les proves multidimensionals que s'han realitzat en aquest treball demostren que l'esquema que millor elimina les oscil·lacions i les inestabilitats és l'Ultimate Centrat de segon ordre.

### 2.2.5 Condicions inicials i de contorn

Una de les majors dificultats en la simulació de fluxos no estacionaris en dominis oberts és la formulació de les condicions de contorn. En general, el flux té lloc en un domini físic molt gran o infinit, però en les simulacions computacionals cal limitar el càlcul a un domini finit que contingui la regió d'interès. La figura 2.4 mostra la configuració analitzada i la distribució dels eixos de coordenades.

En el cas que estudiem en aquest treball, no només tenim el problema de limitar la mida del domini sinó que el flux presenta estructures coherents com per exemple vòrtexs que creuen els contorns. Això implica que part de fluid que es troba a l'exterior del domini pot entrar cap a dintre. Òbviament, el fet de no disposar de cap dada d'aquest fluid exterior presenta una gran dificultat.

L'aproximació més comuna per solventar aquesta dificultat és assumir que la informació del flux exterior no és important i intentar minimitzar els efectes de les condicions imposades als contorns. Existeixen diferents aproximacions que poden utilitzar-se encara que no totes proporcionen resultats positius. Alguns mètodes presenten l'inconvenient de crear ones de pressió típiques de fluxos impactant contra una paret.

S'han realitzat diferents tests per tal de determinar les condicions més adients pel camp dinàmic. Els principals problemes que es van detectar són:

- La sortida del doll provocava zones de xoc i per tant el camp de pressió obtingut no es corresponia amb el camp físic.
- L'aportació de matèria pels contorns laterals provocava un augment continu

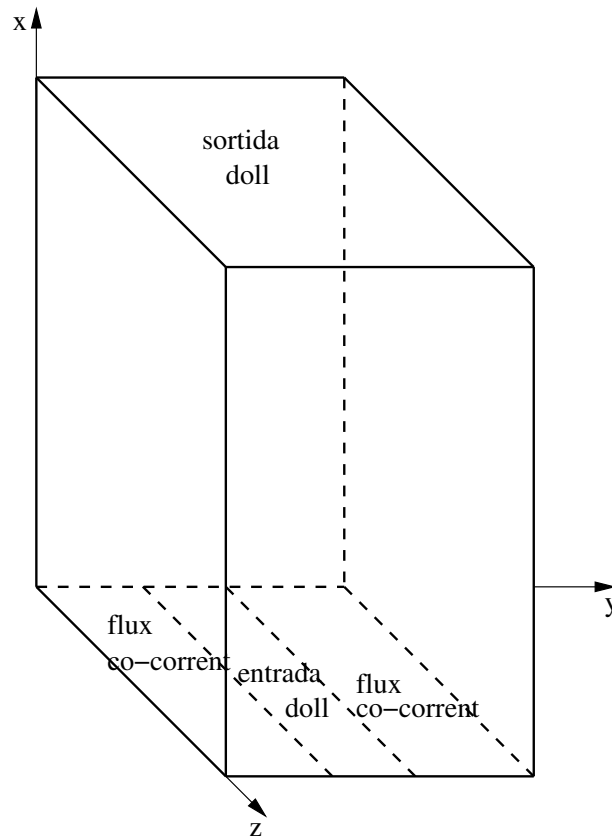


Figura 2.4: Configuració del doll pla tridimensional i eixos de coordenades

del flux a la sortida inestabilitzant el càlcul.

Després d'analitzar el comportament d'algunes condicions de contorn es va decidir implementar unes condicions pels dolls plans dèbils, aquells on la velocitat del flux secundari (*coflow*) és del mateix ordre que la velocitat del doll, i unes altres pels dolls plans forts.

Pel cas de dolls plans dèbils, les condicions que millor resultats aporten són les no reflectants de Jin i Braza [93] a la sortida i una condició d'extrapolació lineal pels contorns laterals.

Les condicions de Jin i Braza es basen en l'equació de propagació d'una ona. Suposem que es vol transportar a través del límit del domini de càlcul el vector velocitat  $\vec{V}$  i que la direcció principal del flux és  $x$ . L'equació que proposen és

$$\frac{\partial^2 \vec{V}}{\partial t^2} - c_x^2 \frac{\partial^2 \vec{V}}{\partial x^2} - c_y^2 \frac{\partial^2 \vec{V}}{\partial y^2} = 0 \quad (2.37)$$

on  $c_x$  i  $c_y$  són les velocitats característiques de la propagació de l'ona en les direccions  $x$  i  $y$  respectivament. Aquesta equació es pot expressar en forma de pseudo-operadors diferencials:

$$L\vec{V} = c_x^2 D_x^2 \vec{V} + c_y^2 D_y^2 \vec{V} - D_t^2 \vec{V} = 0 \quad (2.38)$$

on  $D_x^2$ ,  $D_y^2$  i  $D_t^2$  són les derivades parcials segones. Factoritzant l'operador  $L$

$$L\vec{V} = L^+ L^- \vec{V} = 0 \quad (2.39)$$

on

$$L^+ = c_x D_x + D_t \sqrt{1 - s^2} \quad (2.40)$$

i

$$L^- = c_x D_x - D_t \sqrt{1 - s^2} \quad (2.41)$$

amb

$$s = c_y D_y / D_t \quad (2.42)$$

La relació

$$L^+ V = 0 \quad (2.43)$$

aplicada al contorn de sortida és la condició d'absorció total (non-reflecting) ([94]).

Utilitzant l'aproximació de Padé

$$\sqrt{1 - a^2} \simeq 1 - \frac{1}{2} a^2 \quad (2.44)$$

amb la igualtat (2.43) sobre l'equació (2.40), s'obté

$$(c_x D_x + D_t - \frac{c_y^2}{2D_t} D_y^2) \vec{V} = 0 \quad (2.45)$$

Comparant amb l'equació de Navier-Stokes, es pot definir  $c_x$  com la component  $x$  de la velocitat i adaptar els dos termes difusius de l'equació anterior per introduir la viscositat. D'aquesta manera, l'equació resultant és

$$\frac{\partial \vec{V}}{\partial t} + u \frac{\partial \vec{V}}{\partial x} - \frac{1}{Re} \left( \frac{\partial^2 \vec{V}}{\partial y^2} \right) = 0 \quad (2.46)$$

Es pot observar que l'equació (2.46) manté el caràcter no lineal de les equacions



de Navier-Stokes i això assegura la condició no-reflectant [93].

Als contorns laterals del domini de càlcul s'han utilitzat una expressió més simple [95] però que calcula correctament l'aportació de flux pels contorns:

$$\frac{\partial u}{\partial y} = 0 \quad (2.47)$$

$$\frac{\partial^2 v}{\partial y^2} = 0 \quad (2.48)$$

on  $u$  és la velocitat longitudinal i  $v$  la transversal.

Pel casos tridimensionals, on la velocitat del flux secundari és molt inferior a la del doll (dolls forts), aquestes condicions no resulten correctes i s'han de canviar. La principal diferència entre el doll fort i el doll dèbil és la quantitat de matèria introduïda des de l'exterior pel contorn de sortida. Segons les proves que s'han realitzat, les condicions que millor resultat proporcionen per al cas tridimensional són les de Neumann a la sortida i les equacions de Navier-Stokes amb discretització desplaçada (*forward* o *backward*) cap a l'interior del domini pels contorns laterals. Amb aquestes condicions el flux aportat de l'exterior es calcula correctament i les recirculacions surten del domini sense provocar ones de xoc. A les simulacions tridimensionals, s'han especificat condicions periòdiques per a la direcció  $z$ .

Pel transport de matèria i energia, les condicions de contorn són iguals pels dolls dèbils com pels forts. A les parets laterals s'implementen les condicions de Neumann

$$\frac{\partial \Phi}{\partial y} = 0 \quad (2.49)$$

mentres que per la sortida, s'extrapola amb

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} = 0 \quad (2.50)$$

Malgrat la diversitat de condicions de contorn utilitzades, els resultats mostren que les eleccions són encertades.

A banda dels contorns laterals i de sortida, també cal imposar condicions a l'entrada del doll. En aquest treball, s'ha considerat la velocitat transversal nul·la i per la longitudinal s'ha especificat un perfil pla (*top-hat*) suavitzat a les capes de barreja

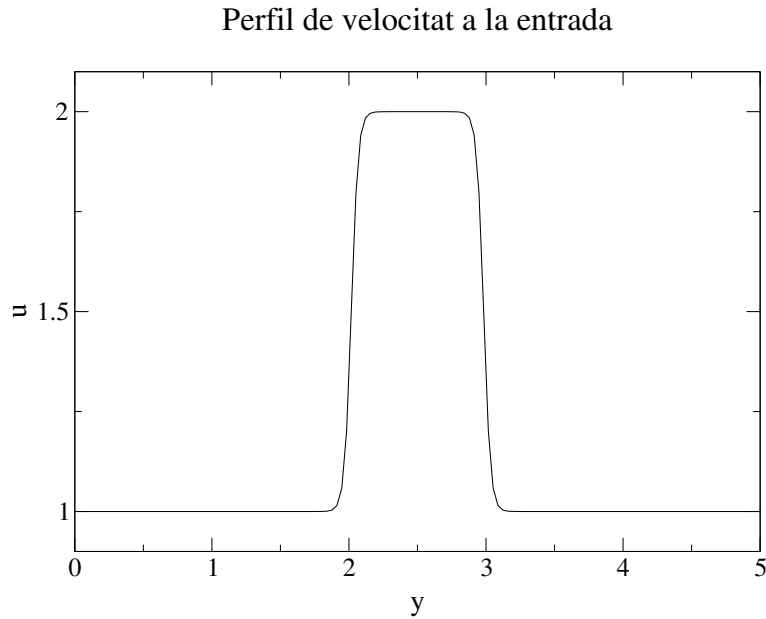


Figura 2.5: Perfil de velocitat a l'entrada del doll

amb un perfil tangencial hiperbòlic.

$$u = \frac{U_1 + U_2}{2} + \frac{U_1 - U_2}{2} \tanh\left(\frac{y}{2\theta}\right) \quad (2.51)$$

on  $y$  és la distància al centre de la capa de barreja,  $\theta$  és l'amplada inicial de la capa de barreja,  $U_1$  és la velocitat al doll i  $U_2$  és la velocitat del flux secundari. La figura 2.5 mostra aquest perfil amb  $U_1 = 2$  i  $U_2 = 1$  i les capes de barreja centrades a  $y = 2$  i  $y = 3$  amb una amplada inicial  $\theta = 0.025$ .

L'addició del flux secundari s'ha realitzat per minimitzar la quantitat de fluid aportat des de l'exterior. D'aquesta manera les condicions de contorn de sortida es poden calcular amb menys dificultat i no inestabilitzen el càlcul. Si la raó entre la velocitat al centre del doll i la velocitat del flux co-corrent és més gran que 1,  $U_c/U_2 > 1$ , el comportament és molt similar al doll pla en un fluid en repòs.

Per a la temperatura, el perfil d'entrada ha estat similar que per a les velocitats (equació (2.51)) però amb valor 1 al centre i 0 a l'exterior del doll. La condició especificada en les concentracions ha estat similar. Per a l'espècie química  $C_1$ , el perfil és el mateix que per la temperatura. En canvi, per a l'espècie química  $C_2$ , s'ha estudiat dos casos diferents: un amb premescla de reactius, on  $C_2$  té una concentració constant d'1 al llarg de tota l'entrada, i un altre sense premescla, on la

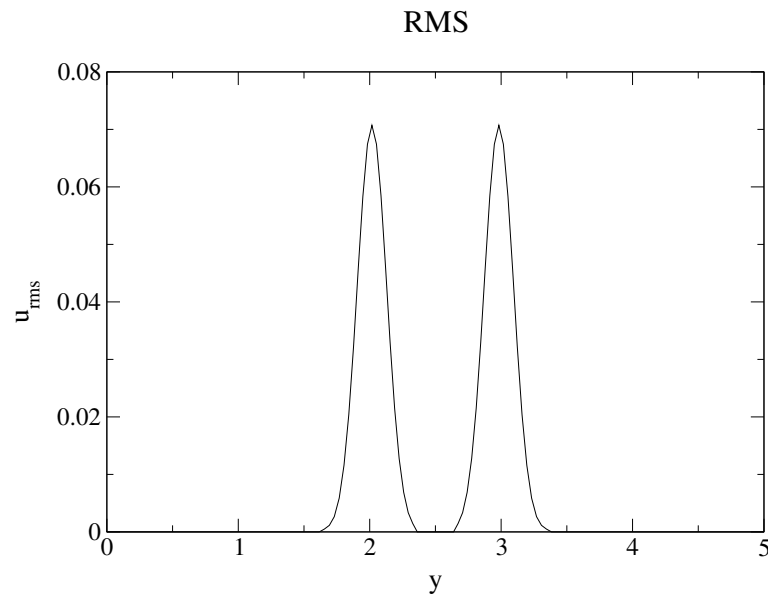


Figura 2.6: Desviació estàndard de la pertorbació a freqüències discretes

concentració de  $C_2$  és 1 fóra del doll i 0 a l'interior. Per al producte, la concentració a l'entrada sempre s'ha considerat nul·la.

En totes les simulacions, el camp inicial de velocitat a temps  $t = 0$  s'ha considerat uniforme en la direcció  $x$  seguint els perfils en la direcció  $y$  especificats anteriorment. Per a la temperatura i les concentracions s'han suposat inicialment valors nuls a tot el camp.

Per aconseguir el desenvolupament d'estructures a freqüència desitjada, el camp de velocitats a l'entrada ha estat pertorbat sobre les capes de barreja de dues maneres diferents: aplicant un soroll blanc o un forçament a freqüències discretes.

La pertorbació a freqüència fixada s'ha imposat sobre les capes de barreja de manera simètrica o alternada, aconseguint que els màxims de velocitat es produïssin al mateix temps en totes dues capes o que el màxim en una capa de barreja coincidís amb un mínim a l'altra. Aquesta pertorbació periòdica s'aplica a l'entrada sobre la component longitudinal de la velocitat. La figura 2.6 mostra la desviació estàndard d'aquesta inestabilitat artificial per a  $\theta = 0.025$  i  $H = 1$ .

A la figura 2.7 es presenten les desviacions estàndards per a la pertorbació amb soroll blanc aplicat sobre les capes de tall a l'entrada amb  $\theta/H = 0.05$ . L'aplicació d'una pertorbació en la direcció longitudinal per al doll pla fort presenta grans dificultats computacionals ja que el flux incompressible transporta aquestes ones de

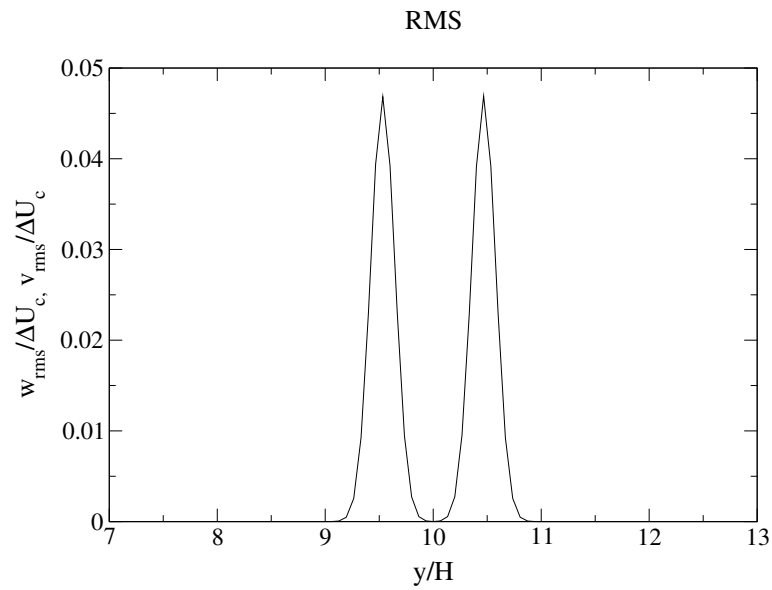


Figura 2.7: Desviacions estàndards de la pertorbació amb un soroll blanc

pressió al llarg del doll fins a la zona turbulenta, provocant inestabilitats a les condicions de contorn. Per aquest motiu, només es pertorba el camp amb soroll blanc en les direccions transversal i periòdica. No obstant, aquesta pertorbació també es transmet cap a la direcció axial per continuïtat.

## Capítol 3

# Tècniques de Computació. Càlcul paral·lel

El nou codi de simulació de mecànica de fluids emprat en aquest treball està basat en el codi 3DINAMICS desenvolupat en els últims anys dins del grup de recerca ECOMMFIT. 3DINAMICS va ser creat per Ildefonso Cuesta a la seva tesi doctoral [72]. És un codi seqüencial escrit en fortran 77 creat inicialment per simular el flux forçat i natural en cavitats cúbiques, encara que ha anat creixent i ha estat aplicat a altres configuracions més complexes.

L'increment del número de punts de les simulacions va fer necessari l'adopció d'alguna tècnica computacional que permetés minimitzar el temps de càlcul de CPU necessari. Encara que els avenços tecnològics milloraven la velocitat dels processadors, les noves línies d'investigació del grup requerien un codi computacionalment més potent.

En aquests casos la solució més addient és desenvolupar una versió paral·lela del codi, de manera que es puguin realitzar simultàneament múltiples tasques computacionals dins d'un únic sistema informàtic. Per portar-ho a terme, però, cal tenir en compte els equips computacionals on es calcularà i les característiques d'aquests.

### 3.1 Multiprocessadors .vs. Multicomputadores

Dins de les diferents arquitectures de computació per realitzar càlculs paral·lels cal distingir entre dos grans blocs: multiprocessadors i multicomputadores. L'ús d'una arquitectura o d'una altra determina el desenvolupament del codi.

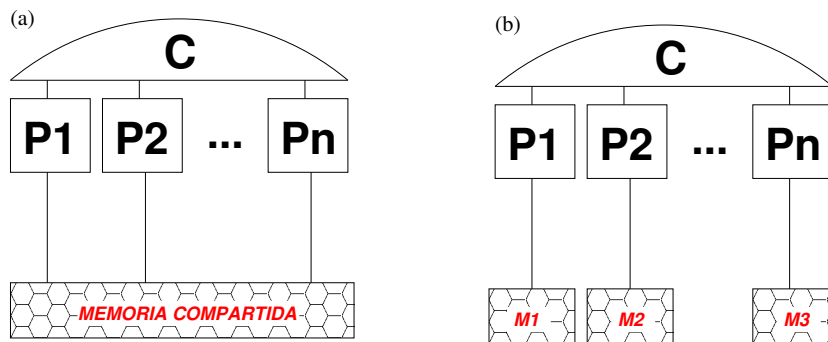


Figura 3.1: Arquitectures de computadores per càlcul paral·lel (a) Multiprocessador; (b) Multicomputadora

Els multiprocessadors són ordinadors paral·lels amb un únic accés a memòria (memòria compartida), és a dir, la memòria central (RAM) està organitzada en un únic domini accessible per tots els processadors. Els processadors  $P_1$ ,  $P_2$ , ...,  $P_n$  poden accedir a les mateixes dades en memòria encara que no simultàniament.

Per altra banda, les multicomputadores són ordinadors paral·lels amb múltiples espais de memòria distribuïda. Els processadors  $P_1$ ,  $P_2$ , ...,  $P_n$  tenen un espai de memòria individual i independent, no accessible directament per cap altre processador. Si el processador  $P_1$  necessita una dada que està a la memòria de  $P_n$ , li envia un missatge a  $P_n$  demanant la dada i aquest respon. La transferència d'informació de la memòria d'un processador a la d'un altre s'anomena *message passing* i és la principal característica dels càlculs paral·lels a les multicomputadores. La figura 3.1 mostra gràficament les diferències a l'arquitectura entre els dos tipus de màquines paral·leles.

Els avantatges i inconvenients dels multiprocessadors .vs. multicomputadores han estat àmpliament estudiats en nombrosos treballs, i moltes màquines de tots dos tipus s'han i s'estan construint. Pels multiprocessadors, la memòria compartida elimina el cost computacional i la complexitat de la programació amb enviament de missatges (*message passing*). No obstant, els multiprocessadors amb una única memòria compartida no són escalables, és a dir, l'arquitectura no permet augmentar de manera fàcil el nombre de processadors utilitzats. La limitació de la velocitat de transferència entre memòria i processadors crea un coll d'ampolla quan el nombre de processadors creix.

Les màquines multicomputadores eliminen el problema de l'escalabilitat, permetent utilitzar molt més processadors a la vegada. No obstant, la complexitat i el

cost computacional dels missatges entre processadors és força alt. A més, també es pot utilitzar cada processador per executar programes en sèrie, sense els problemes de saturació en l'accés a memòria que presenten les màquines multiprocessadores.

Als últims anys, els avenços tecnològics han facilitat el disseny i construcció de màquines multicomputadores de baix cost. Aquestes màquines es poden montar a partir de components convencionals i software gratuït, competint en velocitat de càlcul amb les computadores multiprocessadores de les grans empreses informàtiques. Així per exemple, *Lawrence Livermore National Laboratory* disposa en l'actualitat de la cinquena computadora més potent del món, formada per 768 Pentium IV Xeon Duals de 2.2 Ghz amb una potència total que supera els 5 teraflops. Per altra banda, *Los Alamos National Laboratory* està construint un cluster de 2048 nodes amb una potència de càlcul de 10 teraflops, superant a la que actualment és la segona màquina més potent del món i que es troba al mateix centre.

Donat que el cost i l'accés a màquines multiprocessadores és molt més baix i sembla ser el futur més immediat de la supercomputació, es va decidir construir una màquina multiprocessadora dins de les possibilitats del grup de recerca i desenvolupar el codi amb intercanvi de missatges d'acord amb l'arquitectura de la màquina.

## 3.2 Recursos computacionals

Pop8 (PopVuit) és el primer cluster d'ordinadors personals contruït al departament d'Enginyeria Mecànica de la Universitat Rovira i Virgili i és l'ordinador principal amb el qual s'han executat els càlculs d'aquest treball. Consta de 8 màquines sense disc dur interconnectades mitjançant targetes ethernet convencionals de 100 Mbps. Cada màquina té dues unitats centrals AMD MP de 1600MHz i una memòria central de 1024 MB. La implementació de software específic permet que les comunicacions es realitzin a 200Mbps a través de dos switch 3Com SuperStack3. Les dades es magatzemen en un servidor de fitxers, també configurat com a tallafocs per augmentar la seguretat del cluster.

A més d'aquesta màquina, també s'han utilitzat dos ordinadors personals emprats com a workstation i connectades per testejar el codi paral·lel mentre es desenvolupava. A la taula 3.2 es mostren les característiques d'aquestes màquines.

Computadora	Processador	Velocitat CPU	Memòria central
Ordinador Personal	AMD k7	700 MHz	256 MB
Ordinador Personal	AMD k7	1400 MHz	512 MB
Beowulf	16 * AMD MP	1600 MHz	1024 MB

Taula 3.1: Ordinadors utilitzats

### 3.3 Programació en paral·lel

Per desenvolupar el codi es va adoptar la interfície MPI d'intercanvi de missatges entre processadors, concretament la llibreria gratuïta LAM-MPI. Inicialment es va decidir paral·lelitzar directament el codi 3DINAMICS, però la seva complexitat i extensió va fer decidir re-escriure el codi en la seva totalitat pensant en una configuració multiprocessador i en el nou llenguatge Fortran 90. Malgrat el temps emprat en fer el canvi, ara es disposa d'un nou codi més potent i que redueix considerablement el temps computacional.

El nou codi divideix la resolució de les equacions diferencials llistades al capítol 2.1 entre els diferents processadors mitjançant una divisió equitativa del domini. Així cada processador té assignats un número fixe de nodes per als quals calcula les velocitats, pressió, temperatura i concentracions a cada instant de temps. Els intercanvis d'informació entre els processadors són inevitables ja que les discretitzacions adoptades obliguen a expressar les variables en funció dels valors que tenen als nodes veïns al pas de temps anterior, que poden estar situats en un altre processador. Aquests intercanvis de dades són sincronitzats i s'executen principalment amb dues subrutines de la llibreria MPI:

- MPI\_SEND
- MPI\_RECV

La repartició de dades i tasques computacionals entre els diferents processadors s'anomena divisió del domini. El seu principal objectiu és mantenir l'activitat computacional ben repartida entre els processadors, fet conegut com a *equilibri de treball*. Per algorismes que requereixen un número determinat d'operacions a cada punt d'un domini, com és el nostre cas, l'equilibri és pot aconseguir mitjançant la repartició del mateix número de cel·les a cada processador. No obstant, l'elecció de la repartició no és un fet trivial i cal estudiar el codi per escollir la més addient. En



el sistema considerat en aquest treball, on el domini és una cavitat rectangular, es pot escollir entre tres divisions bàsiques. Suposant que el domini té  $N_1 \times N_2 \times N_3$  nodes, es pot

- dividir les tres direccions del domini, obtenint regions computacionals rectangulars amb  $n_1 \times n_2 \times n_3$  nodes on  $n_i < N_i \ \forall i$ .
- dividir només dues direccions del domini, obtenint regions computacionals rectangulars amb  $N_1 \times n_2 \times n_3$  nodes on  $n_i < N_i$  si  $i = 2, 3$ .
- dividir una única direcció del domini, obtenint regions computacionals rectangulars amb  $N_1 \times N_2 \times n_3$  nodes amb  $n_3 < N_3$ .

A priori pot semblar que la distribució del domini no hauria d'afectar al càlcul. No obstant, les diferències entre les equacions a resoldre fan que no sigui així. Es va realitzar un estudi de l'execució del codi, analitzant el temps que es necessitava a cadascuna de les diferents tasques que s'executen durant el càlcul. Els resultats van demostrar que el 70-80% del temps era destinat a la resolució de l'equació de Poisson del mètode SMAC. Per tant, calia escollir la repartició del domini més adient per tal que aquesta subrutina es resolgués en el mínim de temps. L'ordre de les variables en memòria va comportar que la millor repartició per minimitzar les comunicacions entre processadors i l'accés a memòria per l'equació de Poisson fós la divisió del domini per una única direcció. La figura 3.2 mostra la configuració escollida per al repartiment del domini i les zones de comunicació entre els processadors.

### 3.4 Velocitat d'un codi paral·lel

En programació paral·lela, el factor més important és la velocitat d'execució. Existeixen diferents paràmetres que mesuren aquest factor encara que tots estan relacionats amb un únic valor: el temps que triga el programa en trobar la solució desitjada.

Una mesura molt utilitzada és l'*eficiència*, que quantifica la relació entre el temps del codi seqüencial i el paral·lel normalitzat pel nombre de processadors. Aquest indicador depén fortament de l'algorisme emprat.

$$\eta = \frac{\text{temps CPU per un processador}}{n \times \text{temps CPU per } n \text{ processadors}} \quad (3.1)$$

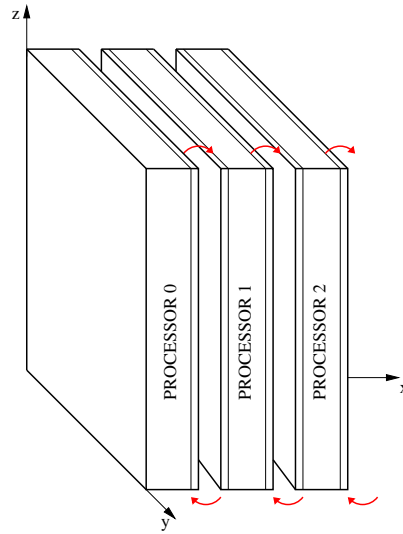


Figura 3.2: Descomposició del domini. Les fletxes indiquen la comunicació entre processadors per les regions compartides.

Multiplicant l'eficiència pel nombre de processadors, obtenim el *Speed-up*.

$$S = n \times \eta \quad (3.2)$$

Un altre factor important és l'*escalabilitat*, el resultat d'augmentar el número de processadors utilitzats. Considerada la solució d'un determinat problema, com depén l'eficiència del número de processadors? Aquesta pregunta es pot respondre mitjançant l'anàlisi proposat per Gene Amdahl l'any 1967. Denotem per  $t_1$  el temps d'execució d'un determinat programa en un processador. Supossem que analitzant el codi i l'algorisme, es determina que una part del programa pot ser paral·lelitzada. Sigui  $t_p$  el temps de CPU en un únic processador per aquesta part paral·lelitzable i  $t_s$  el temps de la part que s'ha d'executar necessàriament en sèrie. Negligint el temps de comunicacions i sincronització entre els processadors, l'eficiència d'un càlcul paral·lel amb  $n$  processadors es pot definir com

$$\eta = \frac{t_1}{nt_n} = \frac{t_s + t_p}{n(t_s + t_p/n)} \quad (3.3)$$

definint la fracció paral·lelitzable com  $f = t_p/(t_s + t_p)$ ,

$$\eta = \frac{1}{f + n(1 - f)} \quad (3.4)$$

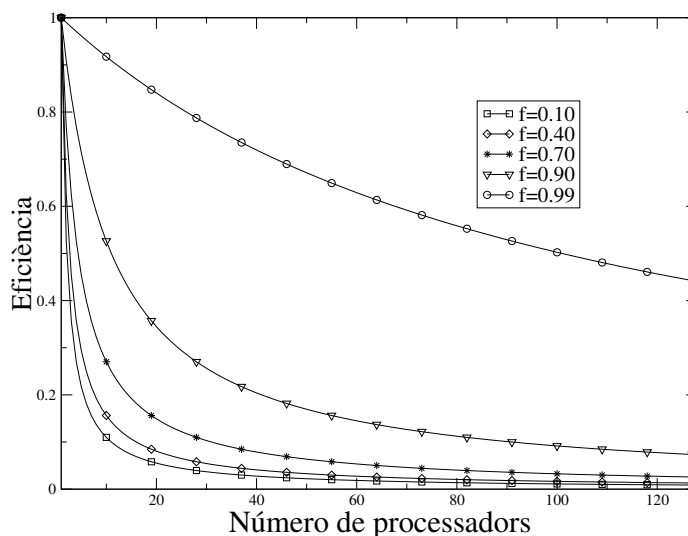


Figura 3.3: Llei de Amdahl

Aquesta equació (3.4) es coneix com *lleï de Amdahl* i està il·lustrada a la figura 3.3. Tal i com es pot veure, inclús un programa amb el 99% paral·lelitzable, té una eficiència de 0.5 amb 101 processadors. Això demostra que aquest factor decau ràpidament amb l'augment del nombre de processadors.

A més, normalment el cost de les comunicacions disminueix els valors de l'eficiència, obtenint valors més baixos que els predits per la lleï de Amdahl.

### 3.5 Speed-up al cluster

Per comprovar l'eficàcia de la versió paral·lela del codi, s'ha calculat l'eficiència i el speed-up al cluster d'ordinadors personals construït al departament d'Enginyeria Mecànica de la Universitat Rovira i Virgili. El codi paral·lel s'ha comparat amb un codi seqüencial optimitzat que realitza les mateixes operacions numèriques excepte les relatives a les comunicacions entre processadors. La comparació amb un codi optimitzat escrit per un únic processador aporta més informació sobre el seu comportament que si es comparés amb el mateix codi paral·lel executant-se en 1 únic processador.

Els resultats per dues xarxes diferents ( $81^3$  i  $101^3$  nodes) es mostren a les figures 3.4 i 3.5. La xarxa de menys punts presenta un bon comportament fins a 4 processadors. En aquest punt, el codi paral·lel realitza la simulació en el mateix temps que ho faria el codi seqüencial en una màquina 3 vegades més ràpida. En el cas de

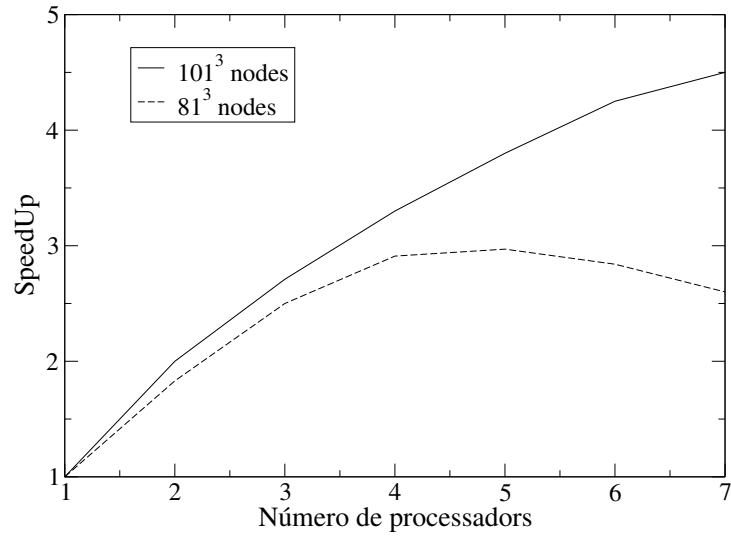


Figura 3.4: Resultats de SpeedUp obtinguts al cluster

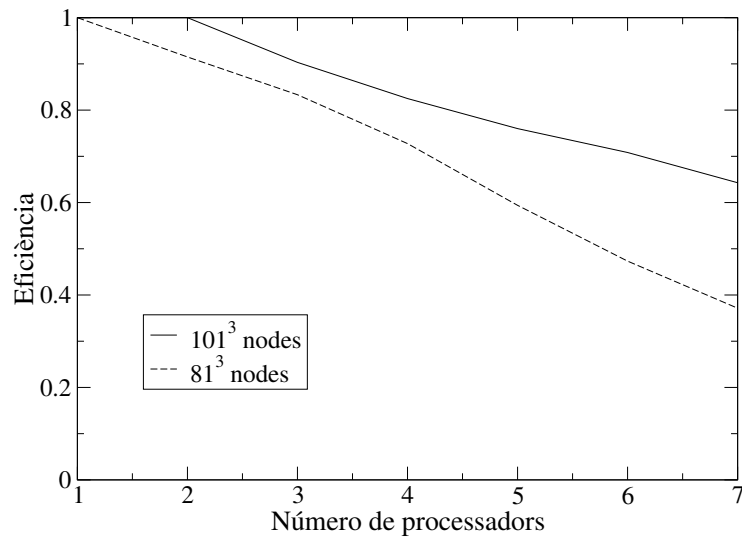


Figura 3.5: Eficiència del nou codi al cluster

simulacions que requereixen temps de CPU d'ordre de dies o setmanes, com són les que s'han realitzat en aquest treball, aquesta reducció és realment important per a l'usuari. Malgrat no obtenir una eficiència màxima, s'ha aconseguit una reducció considerable del temps de computació.

S'observa que l'ús de més de 4 processadors per la xarxa de  $81^3$  nodes disminueix la velocitat del càlcul. Aquest fet es produeix perquè la relació temps computació - temps comunicació deixa de ser efectiva en aquest punt.

L'altra xarxa utilitzada,  $101^3$  nodes, presenta una eficiència superior. És destacable el cas amb 2 processadors, on s'obté una eficiència del 100%. En aquest cas, el codi paral·lel calculant en 2 màquines triga exactament la meitat de temps que el codi seqüencial optimitzat en 1. A més, amb 5 màquines el codi calcula a una velocitat gairebé 4 vegades superior.

Per obtenir eficiències superiors, caldria millorar dos factors al cluster de computadores. Primer, s'hauria de millorar el sistema de comunicacions, ja que totes les transferències entre els processadors es realitzen pràcticament simultàniament i això col·lapsa l'ample de banda del que es disposa. Com a segona millora, caldria disposar de processadors amb millor accés a memòria. L'ús de màquines biprocessadores per codis que necessiten continu accés a memòria provoca una saturació del bus i realentiment del càlcul.

Cal destacar que les gràfiques mostrades corresponen al temps total de la simulació realitzada. Si s'analitzen les diferents tasques que el codi realitza es troba que determinades parts paral·lelitzzen molt millor que altres. Així, per exemple, al càlcul de les velocitats, de les viscositats, de la temperatura o les concentracions l'eficiència és de gairebé el 100% amb totes les xarxes i qualsevol número de processadors ja que les comunicacions són mínimes. La disminució de l'eficiència global és deguda a la part no paral·lelitzable d'algunes operacions. La resolució de l'equació de Poisson o el càlcul dels errors a cada iteració necessiten un seguit de sincronitzacions entre els processadors, detenant el càlcul als processadors més ràpids i esperant als més lents per poder computar variables globals abans de poder continuar.



# Capítol 4

## Resultats

### 4.1 Validació del codi

En aquest apartat es detallen els tests que s'han realitzat per tal de validar el nou codi de simulació desenvolupat. S'han analitzat algunes configuracions bàsiques que o bé disposen de solució analítica o bé estan ben documentades a la bibliografia. Amb aquestes proves es pretèn demostrar el correcte funcionament del codi i la validesa dels seus resultats.

#### 4.1.1 Flux de Couette

El primer cas escollit és el flux de Couette. Consisteix en dues plaques infinites separades per una distància  $H$  on el fluid es mou induït pel moviment de la placa superior a velocitat constant  $U_0$ . La figura 4.1 ens il·lustra aquesta configuració.

Pel cas laminar i estacionari, les línies de corrent són paral·leles a les plaques de manera que només hi ha una component de la velocitat no nul·la. En aquesta situació, el sistema té solució analítica consistent en un perfil linial per la velocitat en funció de la distància a les parets.

$$u(x, y, z) = U_0 y / H$$

$$v(x, y, z) = 0$$

$$w(x, y, z) = 0$$

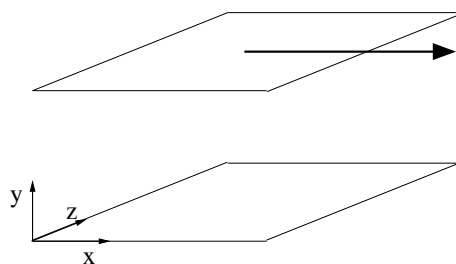


Figura 4.1: Esquema del flux de Couette

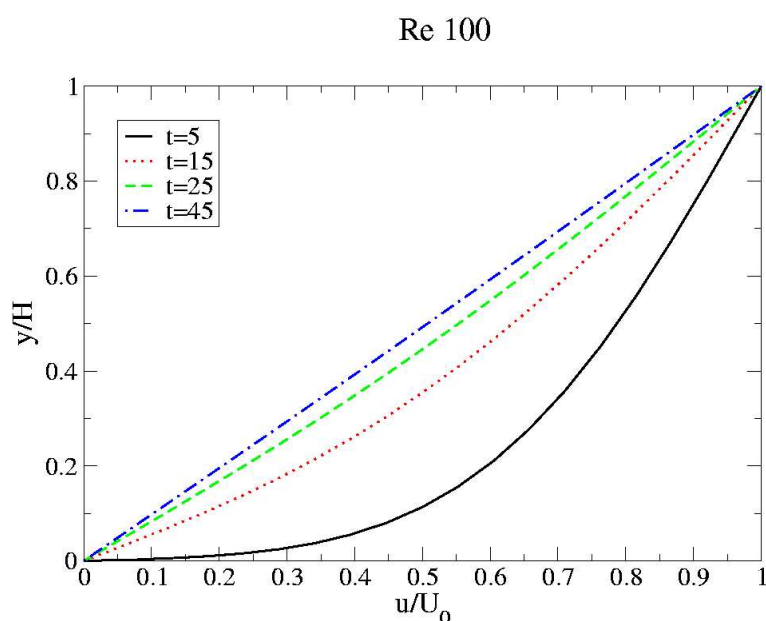


Figura 4.2: Evolució temporal del perfil de velocitat pel flux de Couette a Re 100

Malgrat la seva simplicitat, aquest cas és útil per fer un primer test a codis de simulació de mecànica de fluids. Les condicions de contorn periòdiques, la importància dels termes viscosos en el desenvolupament del flux o la correcta resolució de la pressió són alguns dels punts més difícils que comporta aquesta simulació numèrica.

Les equacions de Navier-Stokes bidimensionals adimensionalitzades en funció de  $U_0$  i  $H$ , equacions (2.7) i (2.8), s'han resolt sota les condicions de contorn esmentades i suposant que el flux està inicialment en repós. Per aquest estudi s'ha emprat una xarxa uniforme de  $41^2$  punts que permet analitzar acuradament els fluxos a números de Reynolds ( $Re = U_0 H / \nu$ ) de 100, 1000 i 5000.



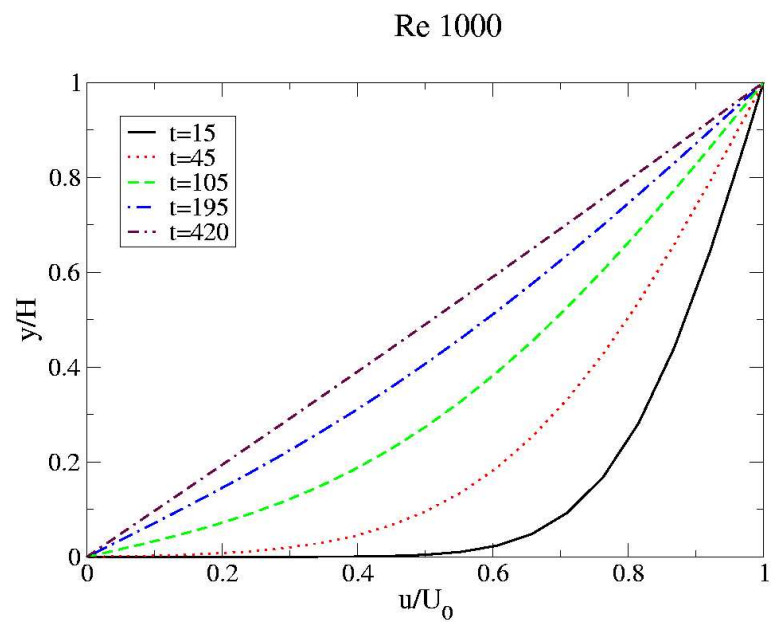


Figura 4.3: Evolució temporal del perfil de velocitat pel flux de Couette a Re 1000

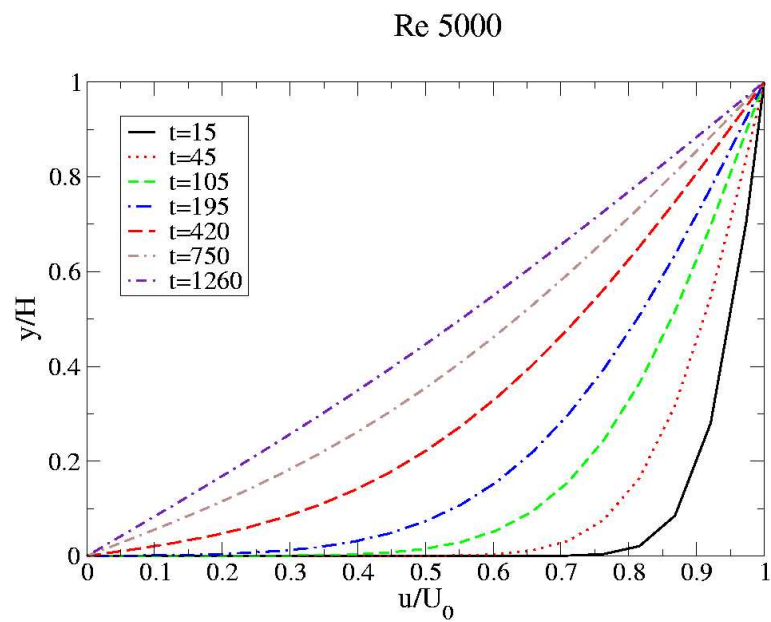


Figura 4.4: Evolució temporal del perfil de velocitat pel flux de Couette a Re 5000

Les figures 4.2, 4.3 i 4.4 mostren l'evolució temporal del perfil de la component horitzontal de la velocitat. Tal i com s'esperava, la solució arriba a l'estat estacionari assolint un perfil linial i amb un camp de pressió completament nul, coincidint amb la solució analítica. Les figures mostren la importància dels efectes viscosos, ja que augmentant el número de Reynolds el flux triga més en arribar a l'estat estacionari. Aquest fet és degut a que la informació de la velocitat només es transmet pels esforços viscosos en la direcció perpendicular a les parets. Per a Reynolds 100, en un temps adimensional ( $tU_0/L$ ) de 45 el flux aconsegueix el perfil dessitjat. Augmentant el Reynolds a 1000 es fa necessari 9 vegades més de temps. Mentre que per a Reynolds 5000, el temps adimensional necessari arriba a 1260.

### 4.1.2 Convecció forçada en una cavitat bidimensional

El segon cas que s'ha escollit per validar el codi és la cavitat *lid-driven* bidimensional. El domini consisteix en un quadrat de costat  $H$  on el fluid es mou induït pel moviment a velocitat constant,  $U_0$ , d'una de les parets.

Aquest sistema s'utilitza freqüentment com a test (*benchmark*) perquè és un cas molt documentat i presenta unes estructures de flux primàries i secundàries molt característiques que varien en mida i forma amb el número de Reynolds ( $U_0H/\nu$ ).

Els resultats aconseguits en aquest treball han estat comparats amb els resultats numèrics obtinguts per Ghia [96] en simulacions DNS. S'han utilitzat xarxes uniformes i no uniformes de  $41^2$  i  $81^2$  nodes i dos valors del número de Reynolds 1000 i 3200. A les xarxes no uniformes els nodes es troben concentrats prop de les parets ja que aquestes zones són les que presenten uns gradients de velocitat més grans per la capa límit.

Resolent les equacions de Navier-Stokes adimensionalitzades, imposant condicions de contorn de no lliscament, s'obtenen les velocitats mostrades a les figures 4.5-4.8 quan el flux assoleix l'estat estacionari. Aquestes gràfiques mostren una clara influència de la xarxa, tal i com comenten els treballs de Hayase [97] o Cueta [72]. Pel cas de Reynolds 1000, les dues xarxes de  $81 \times 81$  nodes reproduïxen amb gran exactitud els valors obtinguts per Ghia. En canvi, les xarxes més grolleres produeixen un cert error. Quan s'augmenta el número de Reynolds fins a 3200, es demostra la necessitat d'una xarxa fina a prop de les parets ja que el gruix de la capa límit disminueix considerablement produint-se uns gradients de velocitat més grans.

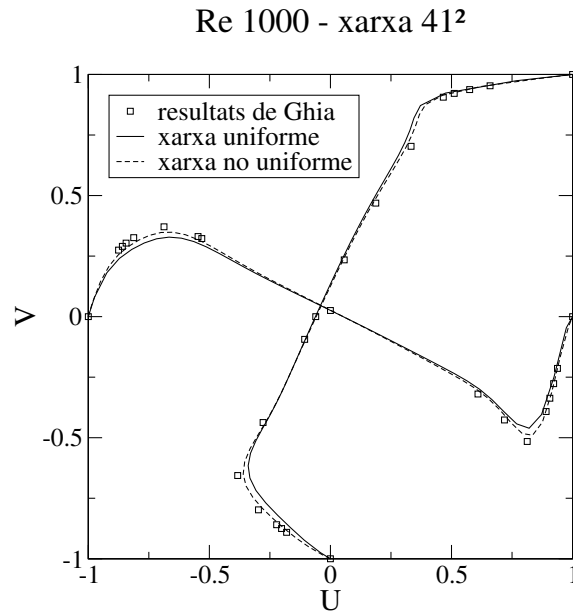


Figura 4.5: Perfils de les components de la velocitat horitzontal ( $u$ ) i vertical ( $v$ ) en les línies vertical ( $y$ ) i horitzontal ( $x$ ) del centre de la cavitat bidimensional a  $Re$  1000 per simulacions amb  $41 \times 41$  nodes

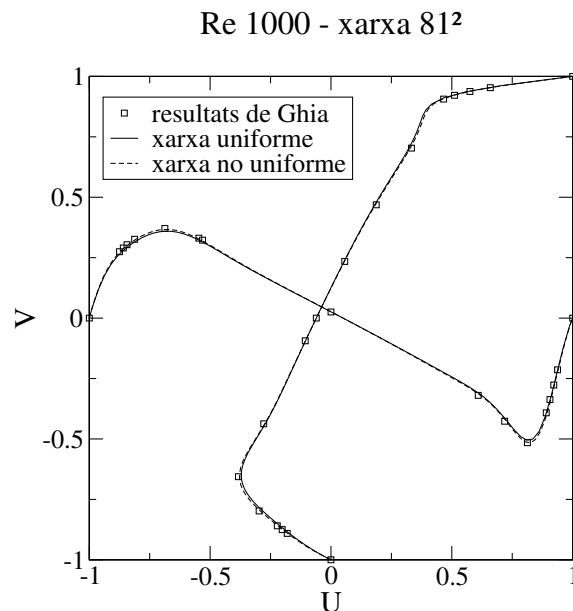


Figura 4.6: Perfils de les components de la velocitat horitzontal ( $u$ ) i vertical ( $v$ ) en les línies vertical ( $y$ ) i horitzontal ( $x$ ) del centre de la cavitat bidimensional a  $Re$  1000 per simulacions amb  $81 \times 81$  nodes

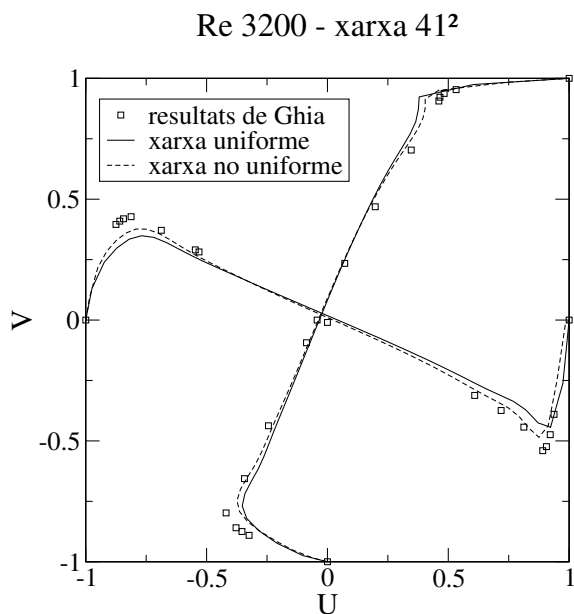


Figura 4.7: Perfils de les components de la velocitat horitzontal ( $u$ ) i vertical ( $v$ ) en les línies vertical ( $y$ ) i horitzontal ( $x$ ) del centre de la cavitat bidimensional a Re 3200 per simulacions amb  $41 \times 41$  nodes

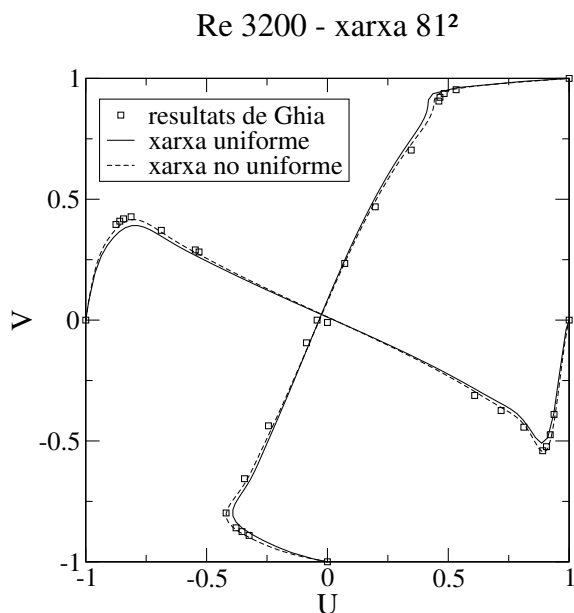


Figura 4.8: Perfils de les components de la velocitat horitzontal ( $u$ ) i vertical ( $v$ ) en les línies vertical ( $y$ ) i horitzontal ( $x$ ) del centre de la cavitat bidimensional a Re 3200 per simulacions amb  $81 \times 81$  nodes

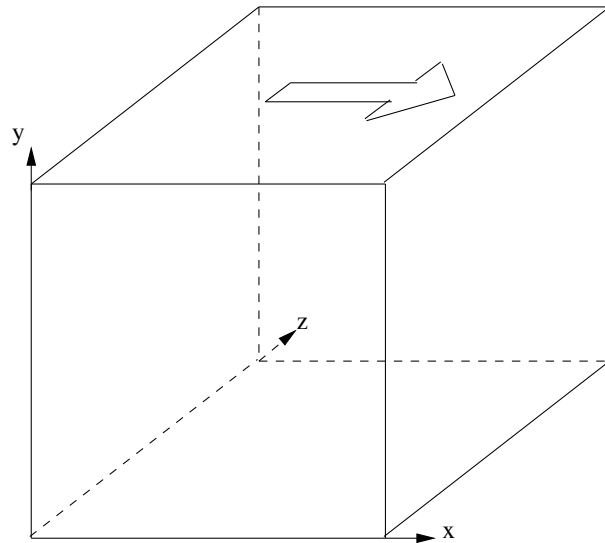


Figura 4.9: Esquema de la cavitat lid-driven tridimensional

### 4.1.3 Convecció forçada en una cavitat tridimensional

L'últim cas escollit per comprovar el bon funcionament del codi numèric ha estat el cas tridimensional de la cavitat lid-driven. En aquesta cavitat cúbica, igual que al cas 2D, el moviment del fluid està generat per una paret lateral que es mou a velocitat constant  $U_0$ . La figura 4.9 mostra un esquema de la configuració.

En aquest cas s'ha analitzat el moviment del fluid a  $Re = 1000$  amb una xarxa no uniforme de  $61^3$  nodes. Tal i com mostra la figura 4.10, els resultats de Iwatsu [98] han estat reproduïts amb gran exactitud.

La diferència amb els perfils del cas 2D per al mateix nombre de Reynolds demostren la tridimensionalitat d'aquest cas. A les figures 4.11, 4.12 i 4.13 es poden observar els camps de velocitat a tres plans de la cavitat ( $x = H/2$ ,  $y = H/2$  i  $z = H/2$ ). El primer mostra l'estructura principal: un remolí que ocupa la gran part de la cavitat. Les altres dues figures demostren la coexistència d'estructures secundàries de mida inferior prop de les cantonades.

Els bons resultats obtinguts en aquests tres casos escollits demostren el bon funcionament del nou codi desenvolupat a partir del 3DINAMICS, així com la validesa dels seus resultats.

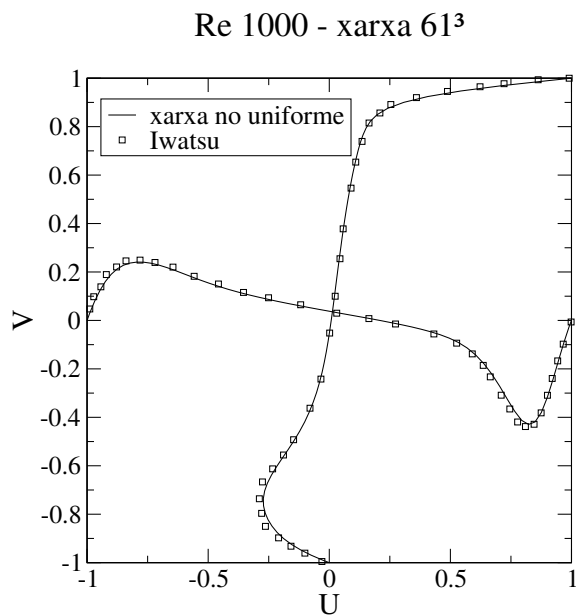


Figura 4.10: Perfils de les components de la velocitat horitzontal ( $u$ ) i vertical ( $v$ ) en les línies vertical ( $y$ ) i horitzontal ( $x$ ) del centre del pla  $z = H/2$  a la cavitat tridimensional a Re 1000. Simulació amb  $61^3$  nodes.

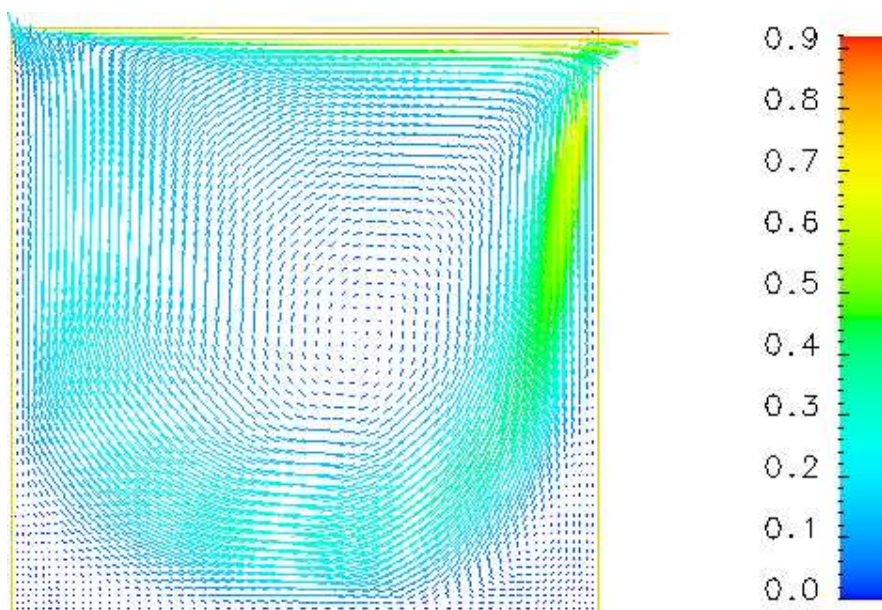


Figura 4.11: Camp de velocitats  $u$ - $v$  al pla  $z = H/2$  per la cavitat tridimensional a Re 1000. Simulació amb  $61^3$  nodes.

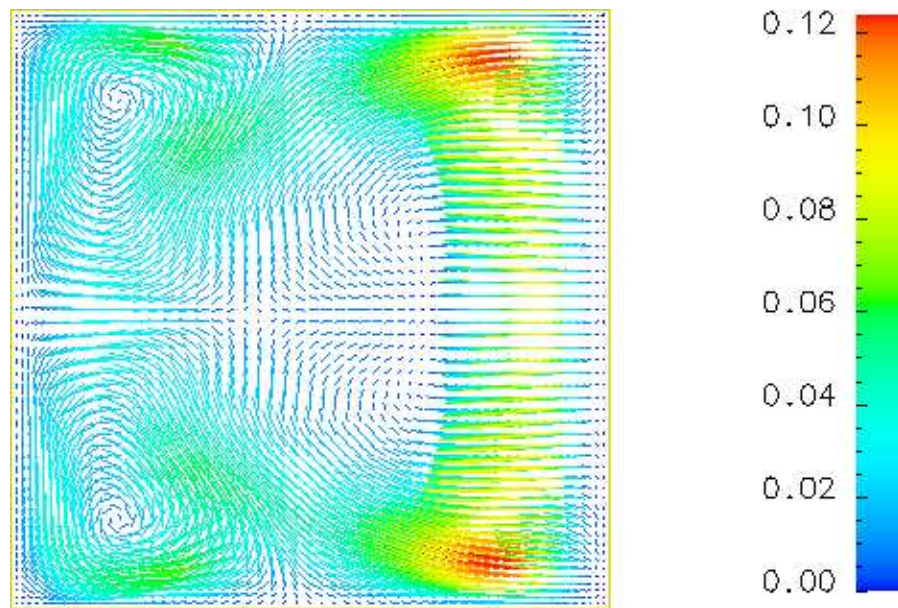


Figura 4.12: Camp de velocitats  $u$ - $w$  al pla  $y = H/2$  per la cavitat tridimensional a  $Re = 1000$ . Simulació amb  $61^3$  nodes.

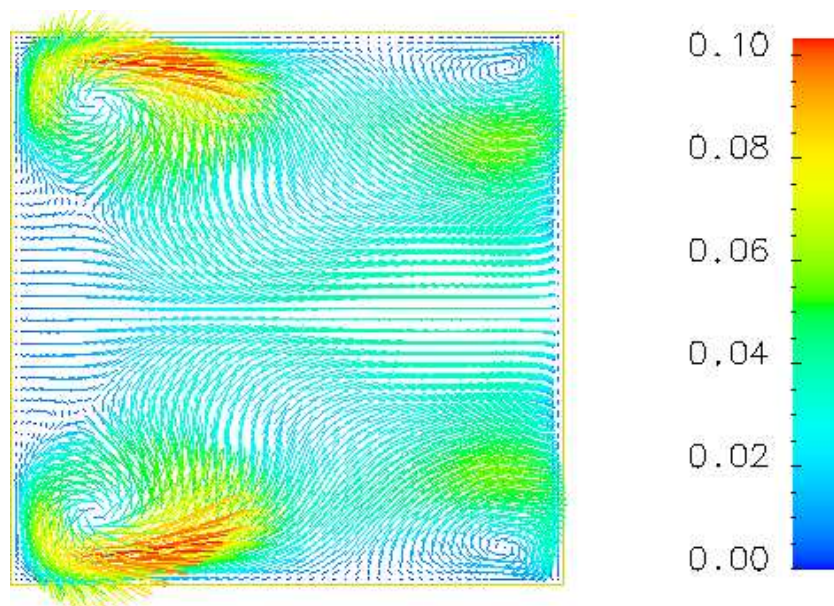


Figura 4.13: Camp de velocitats  $v$ - $w$  al pla  $x = H/2$  per la cavitat tridimensional a  $Re = 1000$ . Simulació amb  $61^3$  nodes.

## 4.2 Dolls plans bidimensionals

En aquest apartat es presenten, analitzen i discuteixen els resultats obtinguts a les diferents simulacions computacionals realitzades per dolls plans bidimensionals. Per facilitar l'anàlisi s'han dividit els resultats en dos apartats: el primer correspon al transport de quantitat de moviment i el segon al transport de matèria dins del sistema reactiu.

### 4.2.1 Camp dinàmic

En aquesta secció es discuteixen els resultats corresponents a l'estudi numèric de dolls bidimensionals. Per tal de controlar millor el desenvolupament del flux s'estudia el cas de dolls dèbils, aquells on la velocitat del flux secundari (*co-flow*) és del mateix ordre que la velocitat característica del doll. La presència d'una velocitat co-corrent alta influeix en l'evolució del flux retardant el desenvolupament del doll cap a la zona d'auto-similitud.

Es denotarà per  $U_2$  la velocitat del flux secundari,  $U_1$  la velocitat característica del doll,  $\Delta U$  la diferència  $U_1 - U_2$ ,  $H$  l'amplada del doll i  $\nu$  la viscositat cinemàtica. Per dolls dèbils se suposa que  $\eta = \Delta U / (U_1 + U_2) = 0.33$ . El número de Reynolds estudiat és  $Re = \Delta U H / \nu = 7000$  i l'amplada inicial de la capa de barreja (*shear layer*) és  $\theta/H = 0.025$ .

La zona analitzada correspon a la regió propera del doll, un domini d'extensió  $L_x = 15H$  i  $L_y = 5H$  discretitzat sobre una xarxa computacional de  $251 \times 121$  nodes. Tal i com s'ha explicat anteriorment, la xarxa és decalada i no uniforme, amb una concentració de punts més gran a les capes de barreja, ja que en aquestes regions apareixen els gradients més forts.

S'han analitzat tres casos diferents en funció de la pertorbació aplicada a la entrada del doll: un cas sense pertorbació, un cas amb pertorbació sinusoidal simètrica i un altre amb sinusoidal alternada.

Als casos amb pertorbació sinusoidal, l'amplitud de la pertorbació a les capes de barreja ha estat d'un 10% de la velocitat de convecció del flux co-corrent. A la figura 2.6 es mostra el perfil de desviació estàndard de la pertorbació. Tant la inestabilitat simètrica com l'alternada han estat observades en dolls plans d'estudis experimentals. La pertorbació alternada ha estat associada amb el perfil del doll després del punt on les dues capes de barreja convergeixen, mentre que la pertorbació



simètrica s'ha observat a la regió propera seguint una transició cap a la inestabilitat alternada. Les freqüències de la pertorbació es presenten adimensionalitzades amb la velocitat  $\Delta U$  i l'amplada del doll  $H$  en el número de Strouhal:  $St = fH/\Delta U$ .

En totes les simulacions, el procediment ha estat similar. Primer s'ha deixat desenvolupar el flux per eliminar tota influència de les condicions inicials i després s'ha continuat el càlcul prenent les dades necessàries per l'anàlisi estadístic.

### 4.2.2 Doll pla sense pertorbació

El primer cas analitzat és el doll pla dèbil sense cap tipus de pertorbació. En el domini que s'ha pogut estudiar aquest flux es manté completament estable sense perdre la simetria. Les capes de barreja no interactuen entre elles i s'obté un flux laminar i estacionari. La figura 4.14 mostra el camp de vorticitat d'aquest cas, completament nul excepte a les zones on hi ha els forts gradients de velocitat on apareixen dues regions de vorticitat de diferent signe. El mòdul de la velocitat mitjana (figura 4.15) presenta el cor del doll mantenint-se pràcticament uniforme al llarg del domini. Les gràfiques 4.16 i 4.17 ho confirmen, mostrant perfils de velocitat a diferents distàncies de l'origen.

Òbviament aquesta solució és inviable experimentalment ja que qualsevol petita pertorbació que s'apliqui al sistema comporta un flux no estacionari. Per tal de demostrar-ho, es va repetir el càlcul aplicant un petit soroll pla a l'entrada. La figura 4.18 mostra el camp de vorticitat instantani d'aquest cas a temps  $t = 150H/\Delta U$ . S'observa que es necessita una regió de 8 diàmetres fins que el flux comença a inestabilitzar-se. A partir d'aquesta distància apareixen estructures coherents no simètriques. A més, cap al final del domini estudiat, apareix el fenomen d'acoblament de vòrtexs descrit a la bibliografia. El mòdul de la velocitat, igual que els perfils de velocitats mitjanes, mostren com el doll es fa més ample al final del domini, disminueix la velocitat a les capes de barreja i evoluciona cap a un perfil parabòlic. A la figura 4.17 s'observa com l'aparició dels vòrtexs augmenta l'aportació de flux lateral notablement.

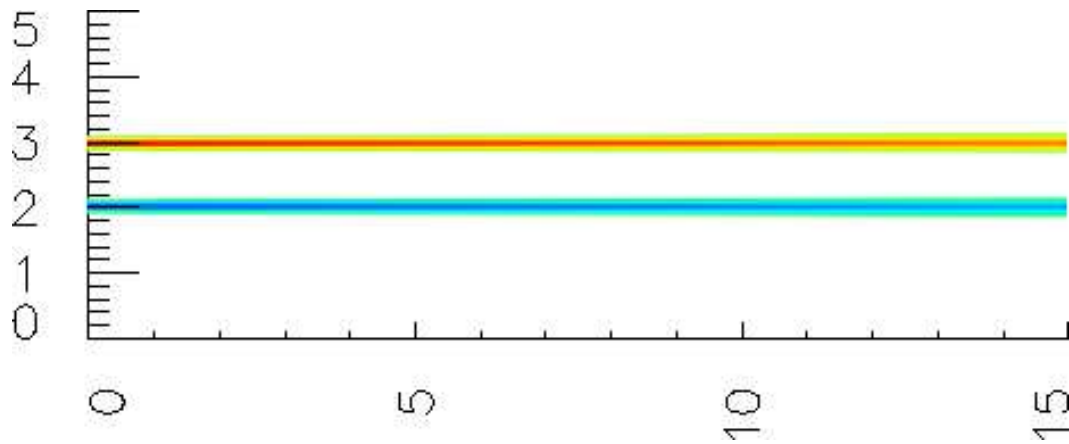


Figura 4.14: Contorns de vorticitat pel doll pla sense pertorbació a Re 7000

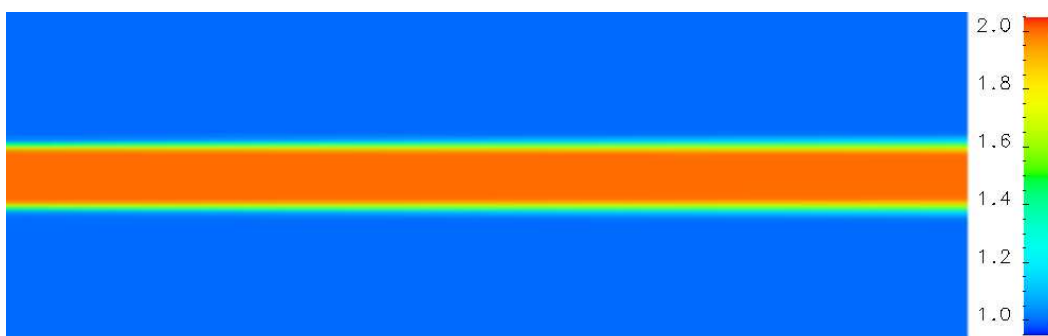


Figura 4.15: Mòdul de la velocitat mitjana pel doll pla sense pertorbació a Re 7000

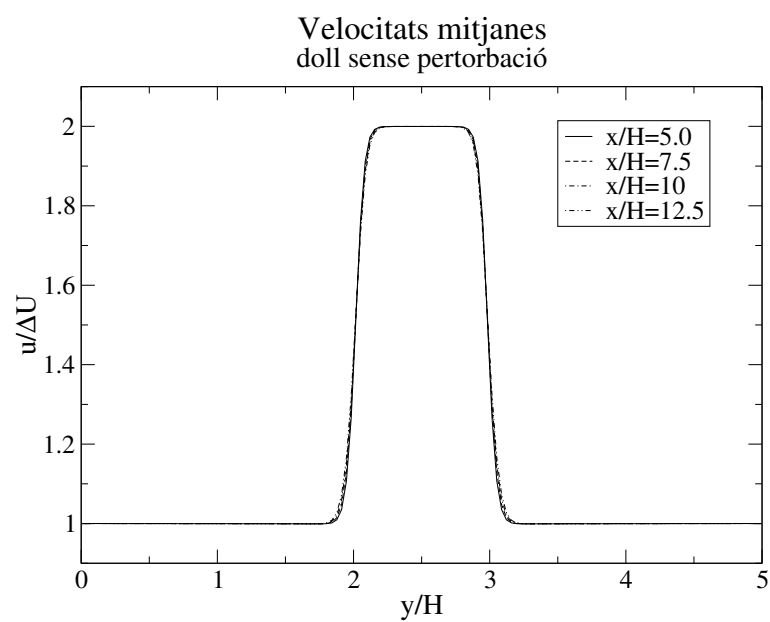


Figura 4.16: Perfils de la component  $u$  de la velocitat mitjana pel doll pla sense pertorbació a  $Re\ 7000$

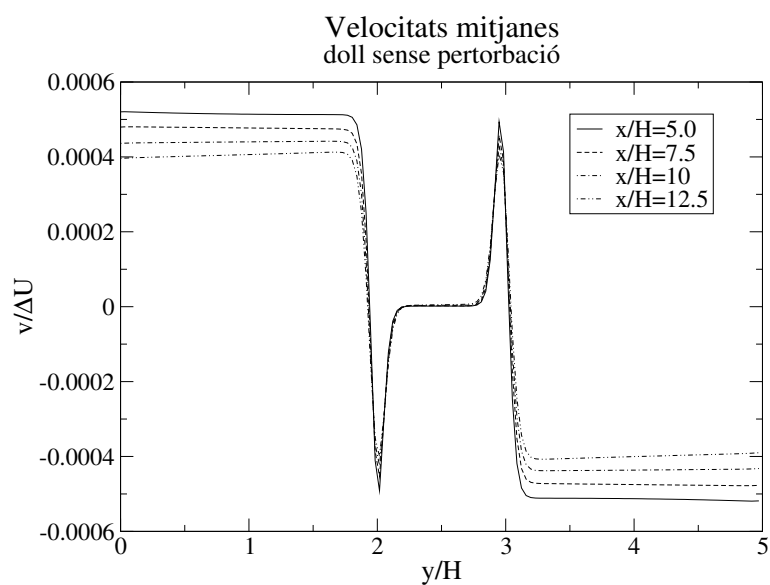


Figura 4.17: Perfils de la component  $v$  de la velocitat mitjana pel doll pla sense pertorbació a  $Re\ 7000$

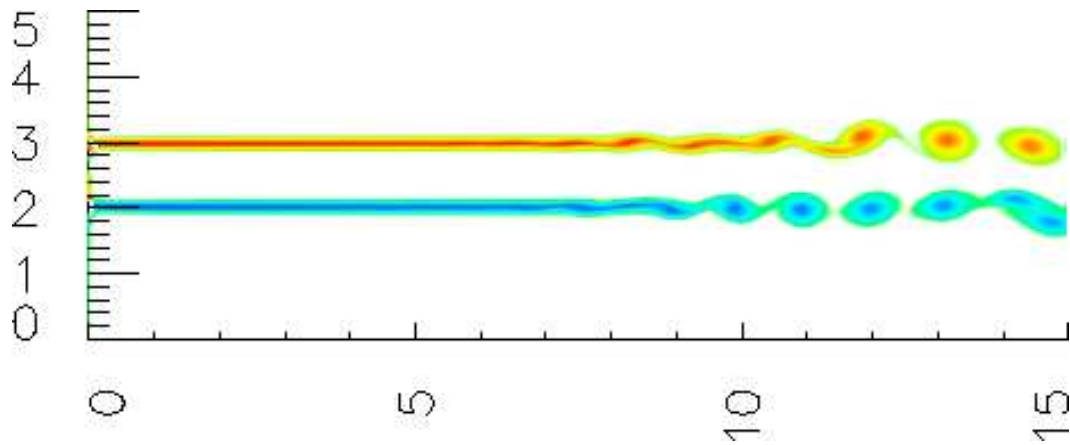


Figura 4.18: Contorns de vorticitat pel doll pla sense pertorbació però amb soroll a  $Re$  7000

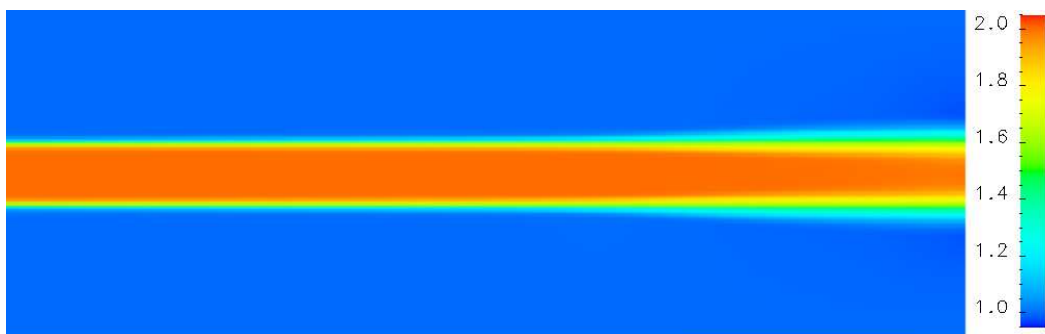


Figura 4.19: Mòdul de la velocitat mitjana pel doll pla sense pertorbació però amb soroll a  $Re$  7000

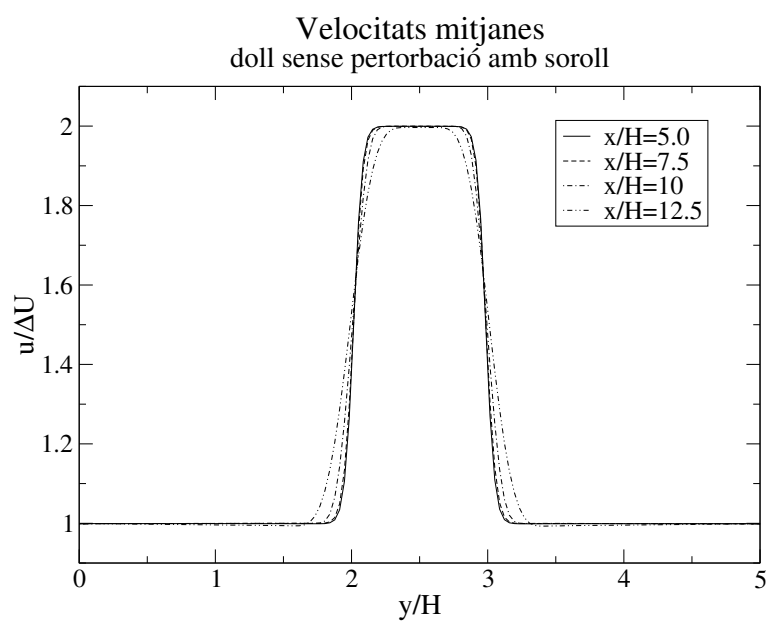


Figura 4.20: Perfils de la component  $u$  de la velocitat mitjana pel doll pla sense pertorbació però amb soroll a  $Re$  7000

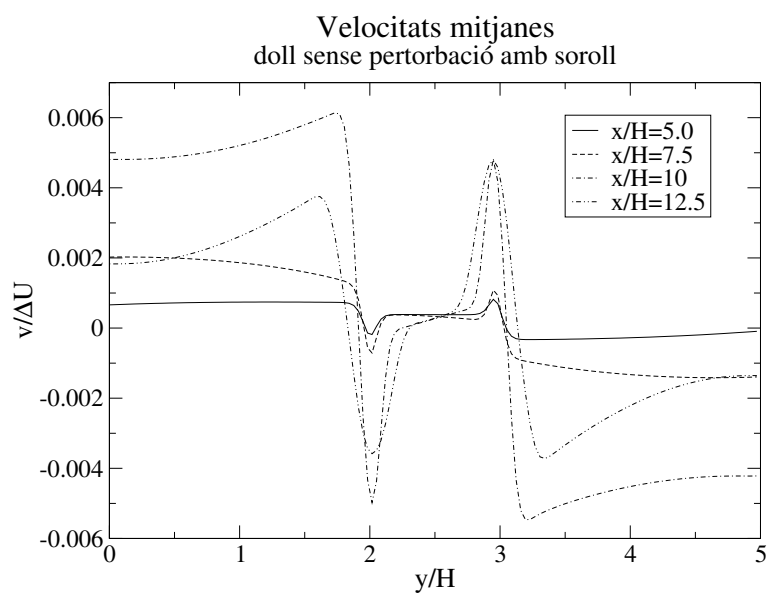


Figura 4.21: Perfils de la component  $v$  de la velocitat mitjana pel doll pla sense pertorbació però amb soroll a  $Re$  7000

### 4.2.3 Doll amb pertorbació sinusoidal simètrica

Tal i com s'ha comentat prèviament, una manera de reduir la longitud necessària pel desenvolupament del doll és aplicar una pertorbació sobre les capes de barreja a l'entrada. D'aquesta manera les estructures coherents poden aparèixer abans del que ho farien de forma natural. Aquest mecanisme artificial, molt emprat a estudis experimentals previs, ens permet controlar el flux i la seva evolució.

La primera simulació analitzada és el doll pla amb pertorbació simètrica, que produeix màxims de velocitat a les capes límits als mateixos temps. Això facilita la producció de vòrtexs simètrics que creixen al llarg del domini. Les figures 4.22 i 4.28 mostren els camps de vorticitat instantanis a  $t=150$  per a dos números de Strouhal diferents: 1.0 i 0.5.

Al camp de vorticitat per  $St=1.0$  s'observa que les estructures coherents apareixen a partir d'una distància  $5H$  amb la freqüència que s'ha pertorbat el perfil d'entrada. El nombre d'estructures coherents ve determinat per la velocitat a la que es desplacen. Com es troben a la capa de barreja, aquesta velocitat és propera a 1.5.

La figura 4.23 mostra com a partir de  $5H$  el doll manté una amplada pràcticament constant fins a la sortida del domini. El gràfic 4.24 ho confirma mostrant els perfils de la component  $u$  a diferents distàncies.

Quan la pertorbació s'aplica a número de Strouhal 0.5, el flux necessita una major distància de desenvolupament. Tal i com s'observa al camp de vorticitat (figura 4.28), en aquest cas apareixen unes grans estructures a la freqüència de pertorbació i unes de mida inferior entre aquestes. Aquest fet demostra que  $St=0.5$  està lluny de la freqüència característica del doll pla dèbil i que aquest evoluciona formant les estructures requerides per la pertorbació i les que el propi flux desenvolupa. A partir d'aquesta observació es pot deduir que la freqüència natural és propera a 1.

Als perfils de desviació estàndard es mostren les diferències entre les dues pertorbacions a freqüències diferents. Mentre que a  $St=0.5$  s'observa una gran variació de la component  $u$  de la velocitat al centre del doll, a  $St=1.0$  el màxim de variació es troba als costats de la capa de barreja. Aquest resultat és conseqüència de la major variació en la grandària dels vòrtexs a  $St=0.5$ , que provoca una modificació de la velocitat al centre del doll de manera periòdica.

Per tal de comprovar els efectes de la intensitat de la pertorbació, es va calcular un doll amb les mateixes condicions que l'anterior a  $St=1.0$  però aplicant una amplitud de pertorbació 4 vegades inferior. La figura 4.34 mostra el camp de vorticitat per

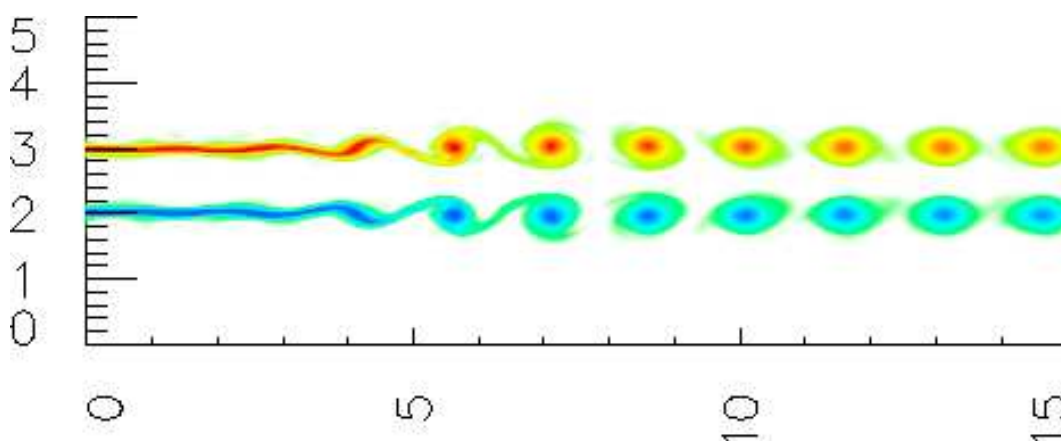


Figura 4.22: Contorns de vorticitat pel doll pla amb pertorbació sinusoidal simètrica a  $St=1.0$  a  $Re=7000$

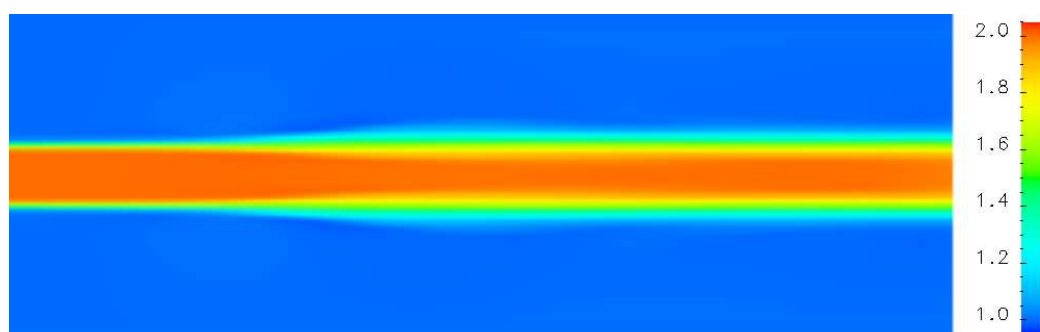


Figura 4.23: Mòdul de la velocitat mitjana pel doll pla amb pertorbació sinusoidal simètrica a  $St=1.0$  a  $Re=7000$

aquest cas. Els resultats confirmen que aquesta disminució de la intensitat comporta un augment en la longitud necessària pel desenvolupament del doll.

Tal i com s'observa als diferents gràfics mostrats, la simulació no està afectada per les condicions de contorn. L'aportació de flux exterior pels contorns laterals i pel contorn de sortida quan els remolins introdueixen flux des de l'exterior resulta ben calculada.

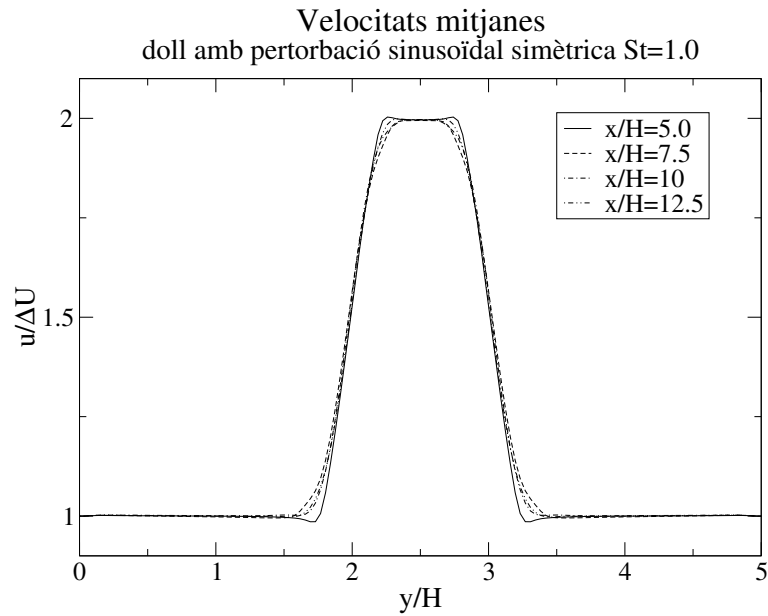


Figura 4.24: Perfils de la component  $u$  de la velocitat mitjana pel doll pla amb pertorbació sinusoidal simètrica a  $St=1.0$  a  $Re\ 7000$

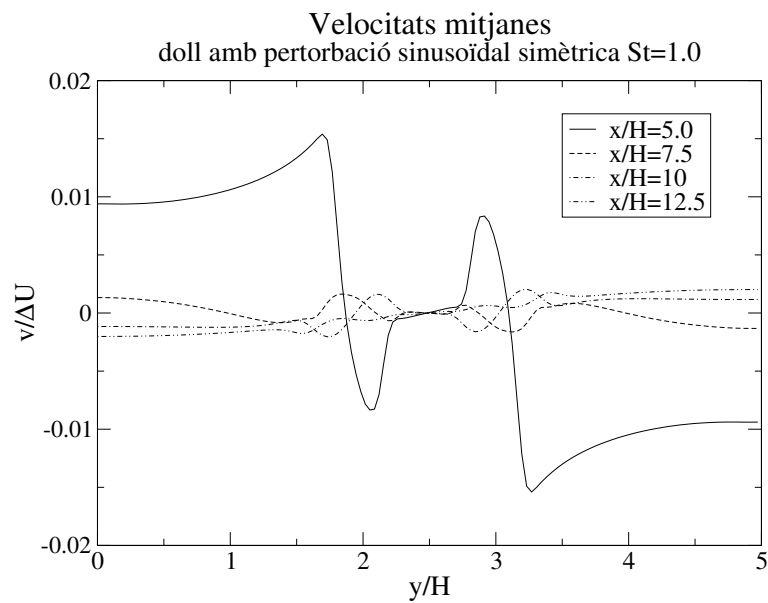


Figura 4.25: Perfils de la component  $v$  de la velocitat mitjana pel doll pla sense pertorbació sinusoidal simètrica a  $St=1.0$  a  $Re\ 7000$



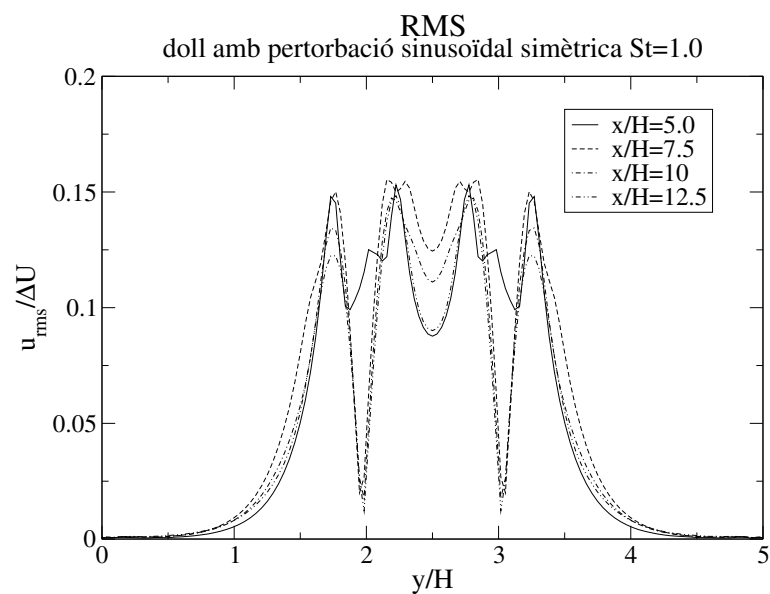


Figura 4.26: Perfils rms de la component  $u$  de la velocitat mitjana pel doll pla amb pertorbació sinusoidal simètrica a  $St=1.0$  a  $Re 7000$

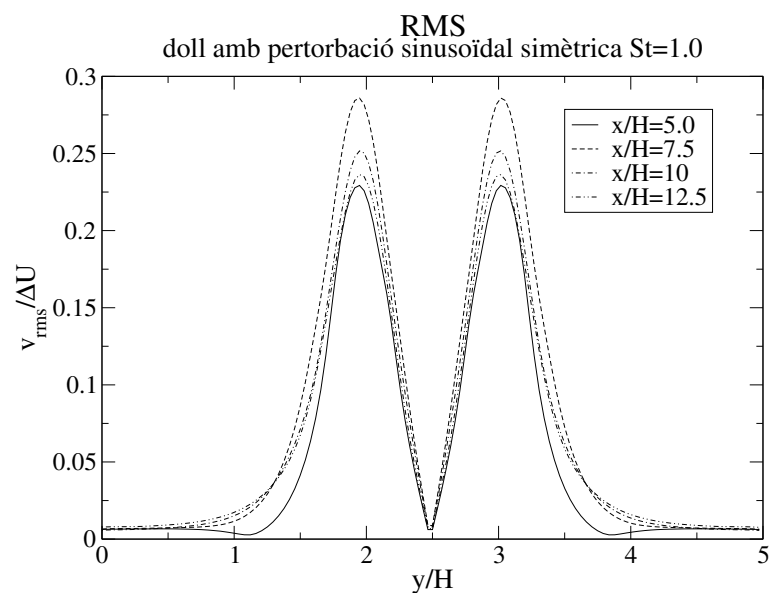


Figura 4.27: Perfils rms de la component  $v$  de la velocitat mitjana pel doll pla sense pertorbació sinusoidal simètrica a  $St=1.0$  a  $Re 7000$

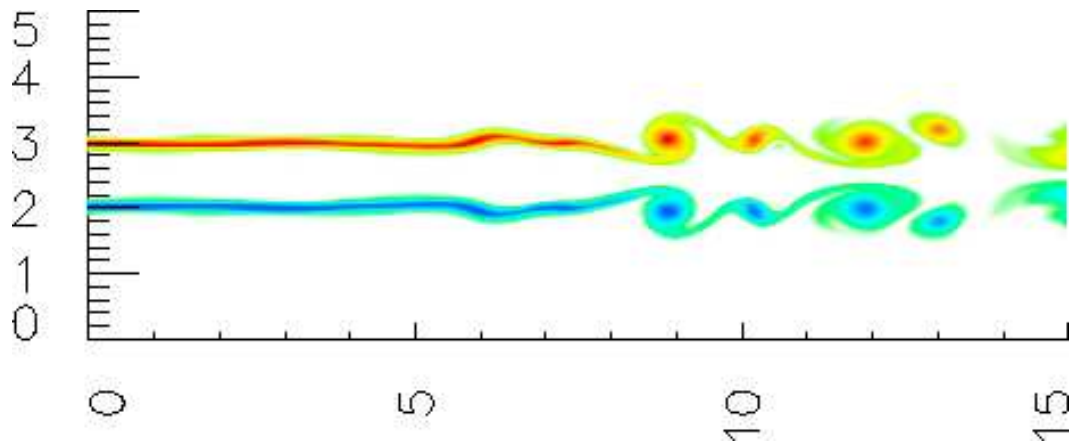


Figura 4.28: Contorns de vorticitat pel doll pla amb pertorbació sinusoidal simètrica a  $St=0.5$  a  $Re\ 7000$

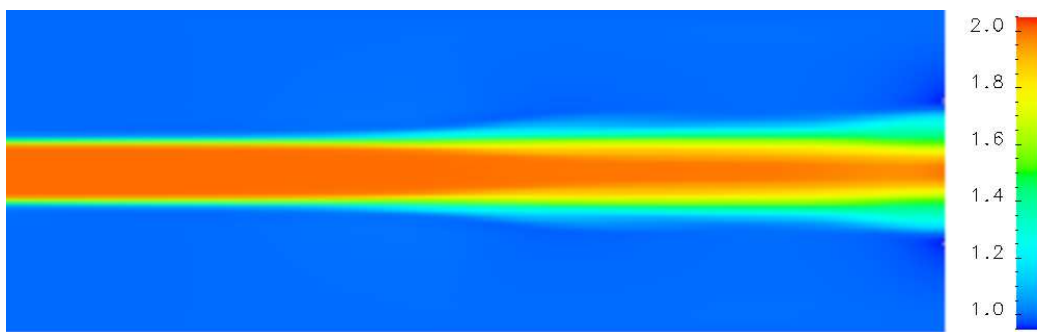


Figura 4.29: Mòdul de la velocitat mitjana pel doll pla amb pertorbació sinusoidal simètrica a  $St=0.5$  a  $Re\ 7000$

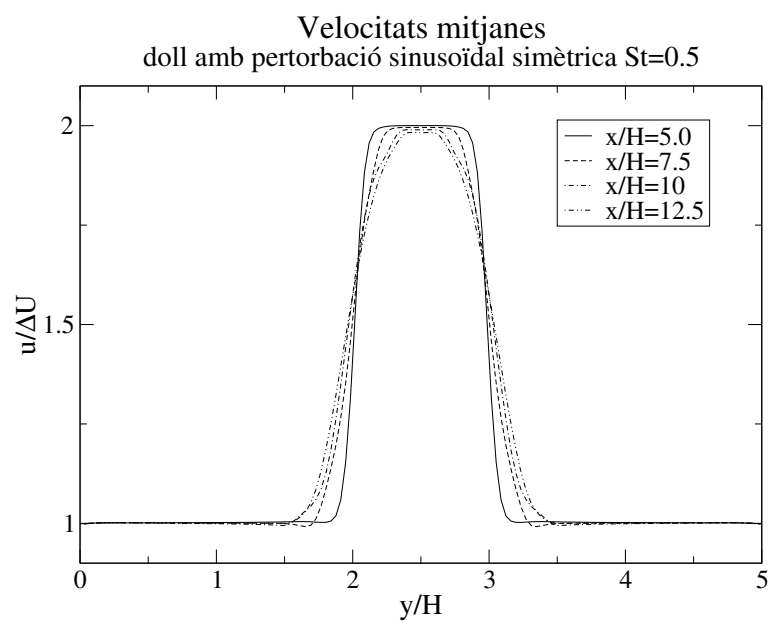


Figura 4.30: Perfils de la component  $u$  de la velocitat mitjana pel doll pla amb pertorbació sinusoidal simètrica a  $St=0.5$  a  $Re\ 7000$

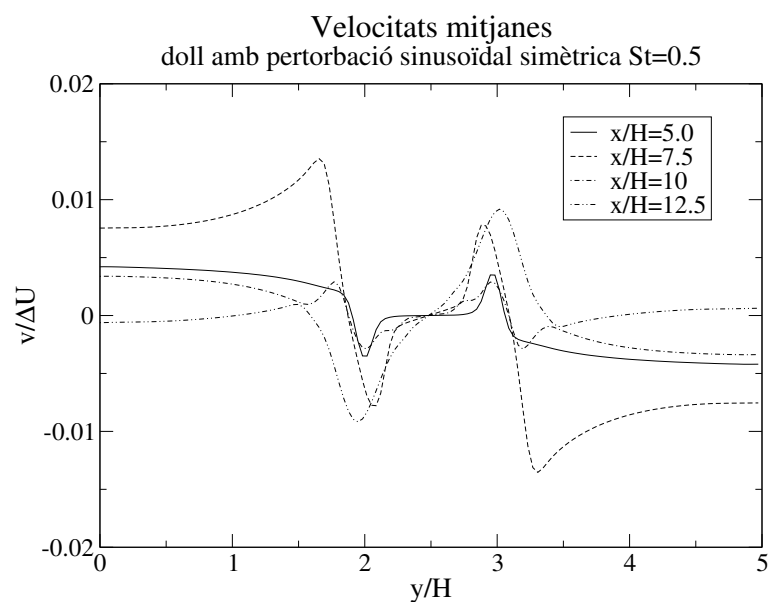


Figura 4.31: Perfils de la component  $v$  de la velocitat mitjana pel doll pla sense pertorbació sinusoidal simètrica a  $St=0.5$  a  $Re\ 7000$

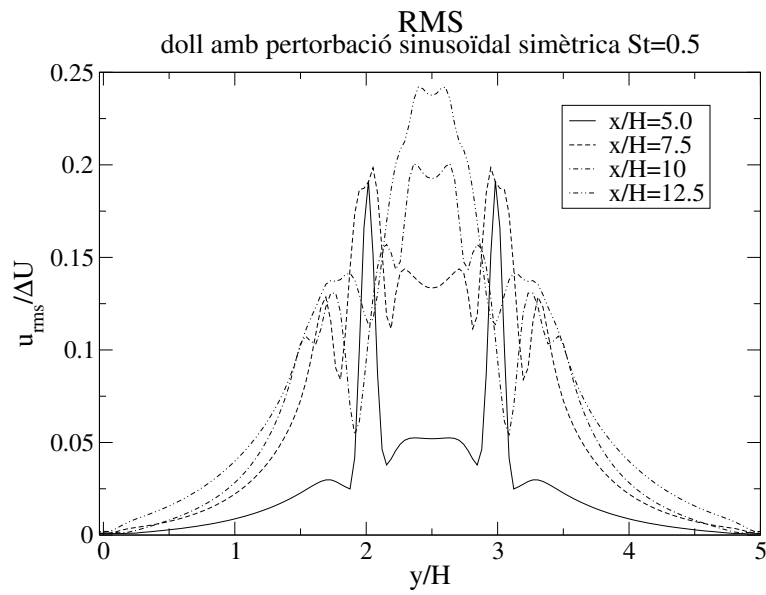


Figura 4.32: Perfils rms de la component  $u$  de la velocitat mitjana pel doll pla amb pertorbació sinusoidal simètrica a  $St=0.5$  a  $Re 7000$

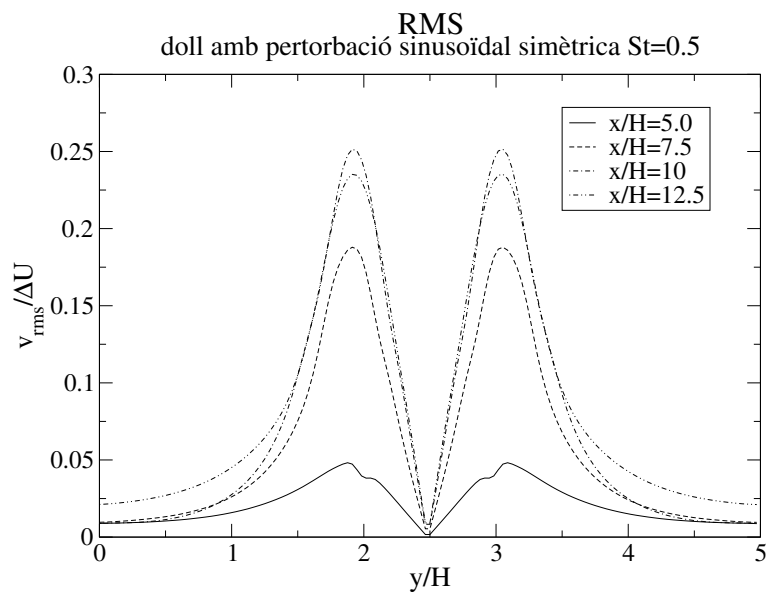


Figura 4.33: Perfils rms de la component  $v$  de la velocitat mitjana pel doll pla sense pertorbació sinusoidal simètrica a  $St=0.5$  a  $Re 7000$

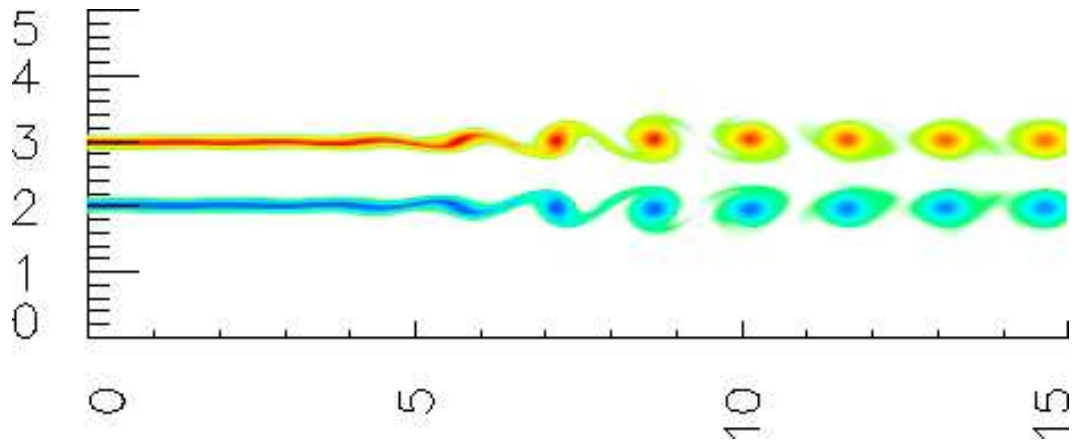


Figura 4.34: Contorns de vorticitat pel doll pla amb perturbació simètrica i  $St = 1.0$  amb una reducció de l'amplada de la perturbació a  $Re = 7000$

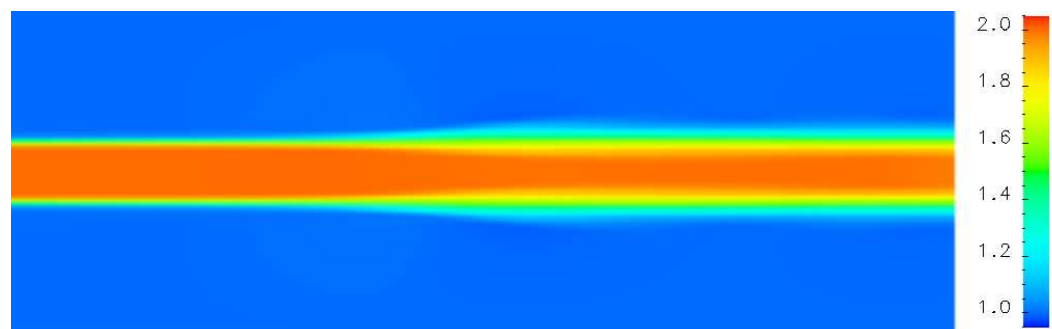


Figura 4.35: Mòdul de la velocitat mitjana pel doll pla amb perturbació sinusoidal simètrica i  $St = 1.0$  amb una reducció de l'amplada de la perturbació a  $Re = 7000$

#### 4.2.4 Doll amb pertorbació sinusoidal alternada

L'altre tipus de pertorbació analitzat és la sinusoidal alternada. En aquest cas, un màxim de velocitat a una de les capes de barreja implica un mínim a l'altra, aconseguint l'estructura típica característica d'una estela Von Karman.

En aquest cas, a més de les pertorbacions a números de Strouhal de 1.0 i 0.5, s'han analitzat dos valors més: 0.25 i 1.5. S'han realitzat aquest estudi més complet per ser aquesta la configuració més característica obtinguda als experiments de dolls plans.

El primer cas analitzat,  $St = 1.0$  ja mostra clarament l'alternança de les estructures coherents (veure figura 4.36). Les recirculacions, inicialment generades amb forma circular a una distància  $4H$ , es deformen en la direcció del flux adoptant una forma el·líptica. Encara que no s'aprecii amb claredat, els vòrtexs de mateix signe de vorticitat estan connectats entre sí mitjançant costelles (traducció literal del terme anglès *rib*) produïdes pel canvi de signe de la velocitat transversal entre el final d'un vòrtex i l'inici del següent. Aquest fenomen també es produeix al cas anterior de pertorbació sinusoidal simètrica.

El component longitudinal de la velocitat mitjana,  $u$ , pràcticament no mostra variació al llarg del doll un cop les estructures coherents han aparegut. En canvi, la component transversal, mostrada a la figura 4.39, està fortament afectada per la deformació que pateixen els vòrtexs. A l'etapa inicial hi ha una aportació gran de flux exterior pels contorns laterals.

Les figures 4.40 i 4.41 mostren els perfils de desviació estàndard a diferents distàncies de l'origen. Les màximes variacions del component  $u$  es produeixen als costats de les capes de barreja, en posicions més o menys fixes al llarg del doll:  $y \sim 1.75H$  i  $y \sim 2.25H$ . A causa de la continua alternança de signe de la component  $v$ , els màxims valors del tensor de Reynolds  $R_{vv}$  es localitzen a la línia que defineixen els centres de les recirculacions.

El cas amb pertorbació a freqüència 0.5 resulta més interessant en quant a estructures. La variació respecte al perfil pla de l'entrada produeix unes grans recirculacions dins del domini computacional. La grandària d'aquests vòrtexs produeix canvis considerables en la direcció del doll, augmentant la seva amplada i reduint la velocitat mitjana al centre. Les costelles de vorticitat que uneixen les recirculacions són molt més notables en aquest cas, arribant a trencar-se prop de la sortida per formar un angle de  $90^\circ$  (figura 4.42). És destacable que a aquest número de Strou-

hal, tant al cas de pertorbació simètrica com al d'alternada, apareixen estructures a una freqüència doble de l'aplicada. Al camp de vorticitat es pot observar les petites recirculacions sobre les costelles dels grans vòrtexs.

Els perfils de velocitat mitjana de les figures 4.44 i 4.45 mostren la variació al llarg del doll. Es pot observar com el flux en mitjana incorpora fluid de l'exterior pels contorns laterals fins a una distància de 10 diàmetres. Els perfils de desviació estàndard, figures 4.46 i 4.47 són molt superiors als obtinguts al cas anterior perquè les estructures són més grans. A més, el desplaçament lateral dels màxims de  $v_{rms}$  confirmen clarament l'augment en l'amplada del doll.

Amb la intensitat aplicada a la pertorbació d'entrada, el doll a  $St = 0.25$  necessita pràcticament la totalitat del domini per desenvolupar-se, tal i com mostren les figures 4.48 i 4.49. Es pot observar que es produeix una gran ondulació del flux principal i una lleu disminució de la velocitat al centre. A una distància de 12.5 diàmetres, el perfil de la velocitat mitjana en la direcció longitudinal presenta una forma totalment triangular a causa de la forta ondulació en aquest punt. Igual que en els casos anteriors, el flux desenvolupa recirculacions a una freqüència superior a l'aplicada a l'entrada.

En canvi, quan escollim un número de Strouhal superior al que sembla a priori natural, per exemple  $St = 1.5$ , les estructures coherents són molt més nombroses encara que la interacció entre aquelles de signe oposat és molt petita. La figura 4.55 mostra com el doll pràcticament no evoluciona en mitjana a partir d'una distància de 4 diàmetres. Tal i com s'ha comprovat en casos anteriors, els vòrtexs formats modifiquen la seva forma inicial per adoptar-ne una més elíptica quan són arrossegats pel flux. S'observa que els petits valors que pren la velocitat transversal produeixen un increment de l'error numèric per error d'arrodoniment i el doll es troba lleugerament inclinat cap a un costat. Els perfils de rms per aquest cas són considerablement més petits que als altres casos a causa de la poca variació que sofreix el doll fora de les capes de barreja.

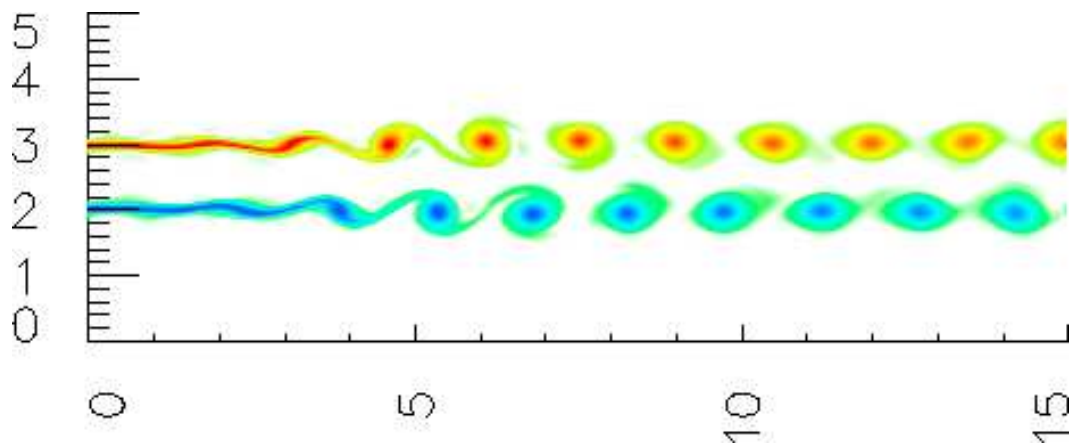


Figura 4.36: Contorns de vorticitat pel doll pla amb pertorbació sinusoidal alternada a  $St=1.0$  a  $Re\ 7000$

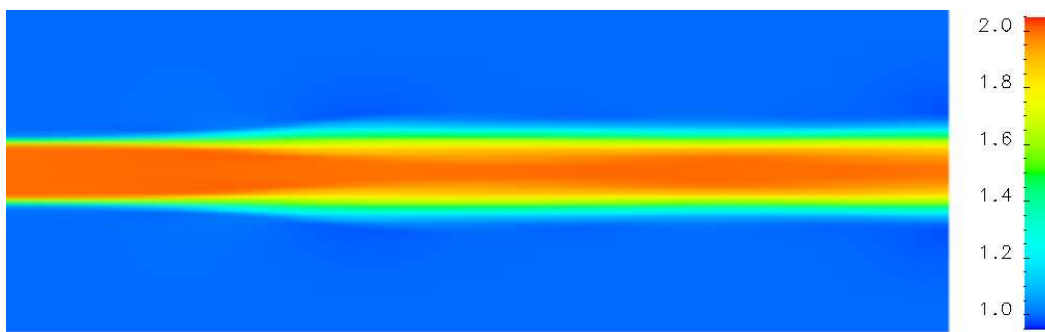


Figura 4.37: Mòdul de la velocitat mitjana pel doll pla amb pertorbació sinusoidal alternada a  $St=1.0$  a  $Re\ 7000$



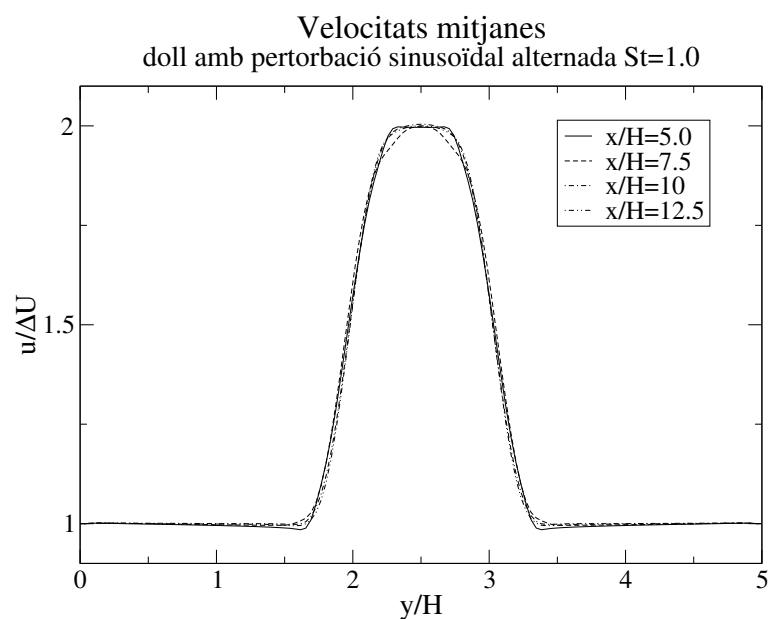


Figura 4.38: Perfils de la component  $u$  de la velocitat mitjana pel doll pla amb pertorbació sinusoidal alternada a  $St=1.0$  a  $Re\ 7000$

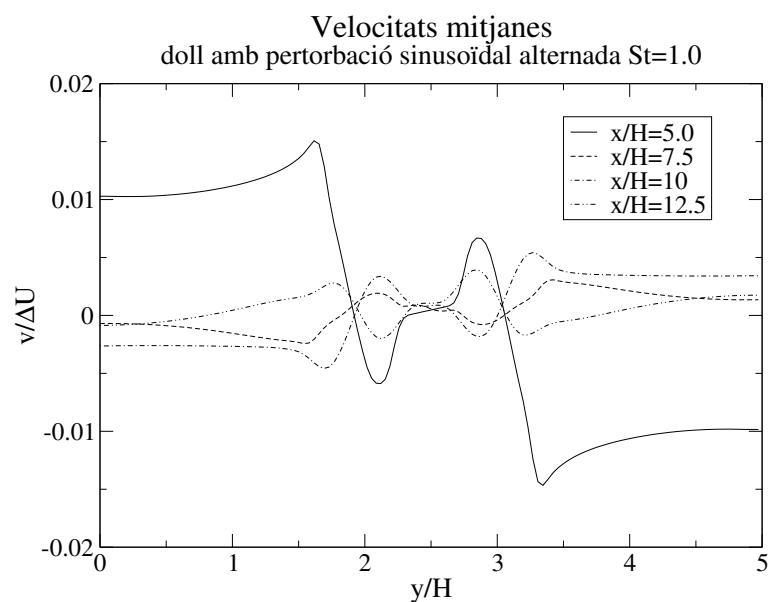


Figura 4.39: Perfils de la component  $v$  de la velocitat mitjana pel doll pla sense pertorbació sinusoidal alternada a  $St=1.0$  a  $Re\ 7000$

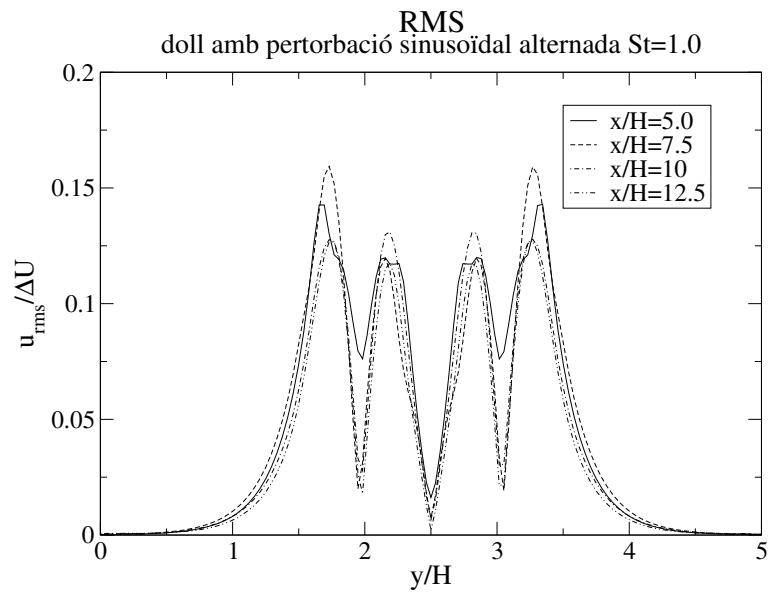


Figura 4.40: Perfils rms de la component  $u$  de la velocitat mitjana pel doll pla amb pertorbació sinusoidal alternada a  $St=1.0$  a  $Re\ 7000$

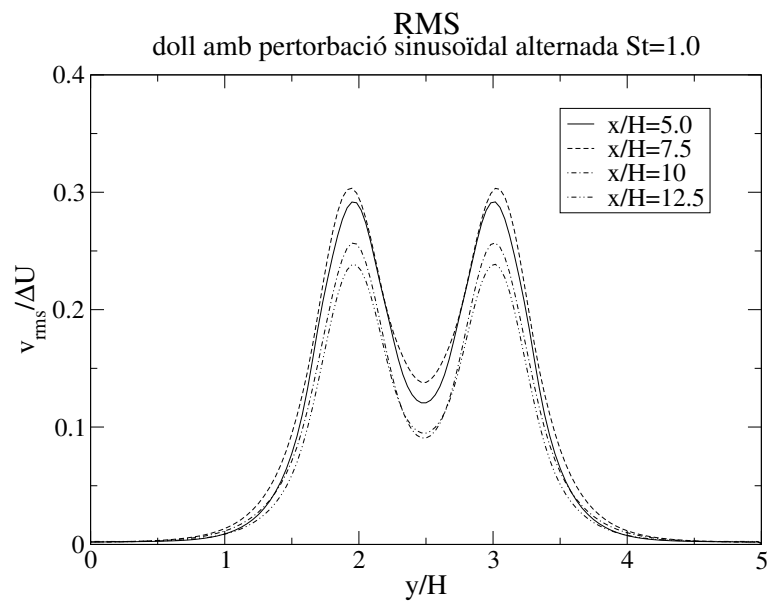


Figura 4.41: Perfils rms de la component  $v$  de la velocitat mitjana pel doll pla sense pertorbació sinusoidal alternada a  $St=1.0$  a  $Re\ 7000$

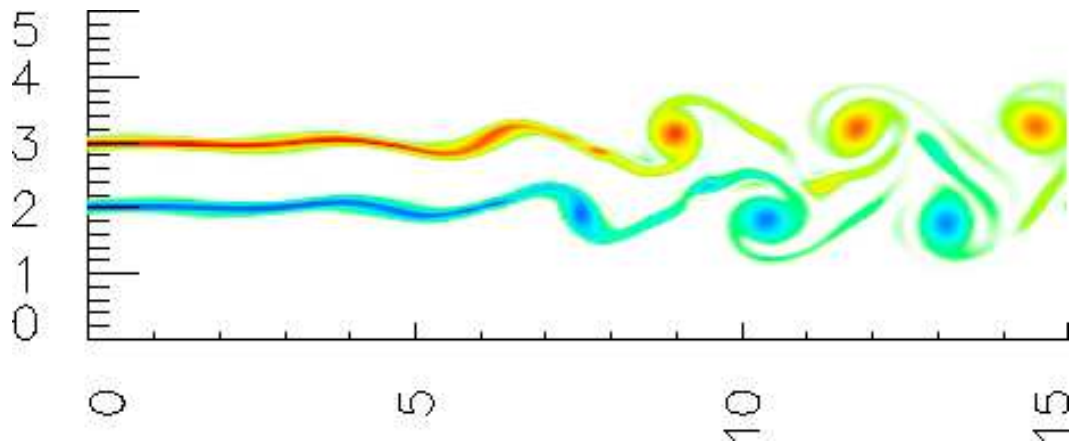


Figura 4.42: Contorns de vorticitat pel doll pla amb pertorbació sinusoidal alternada a  $St=0.5$  a  $Re 7000$

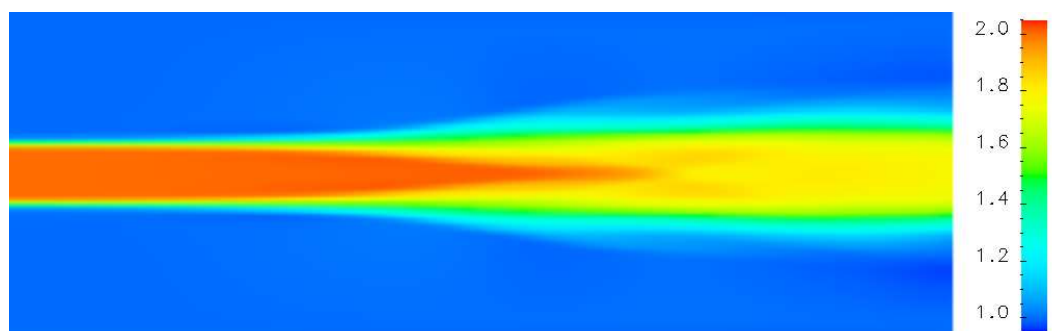


Figura 4.43: Mòdul de la velocitat mitjana pel doll pla amb pertorbació sinusoidal alternada a  $St=0.5$  a  $Re 7000$

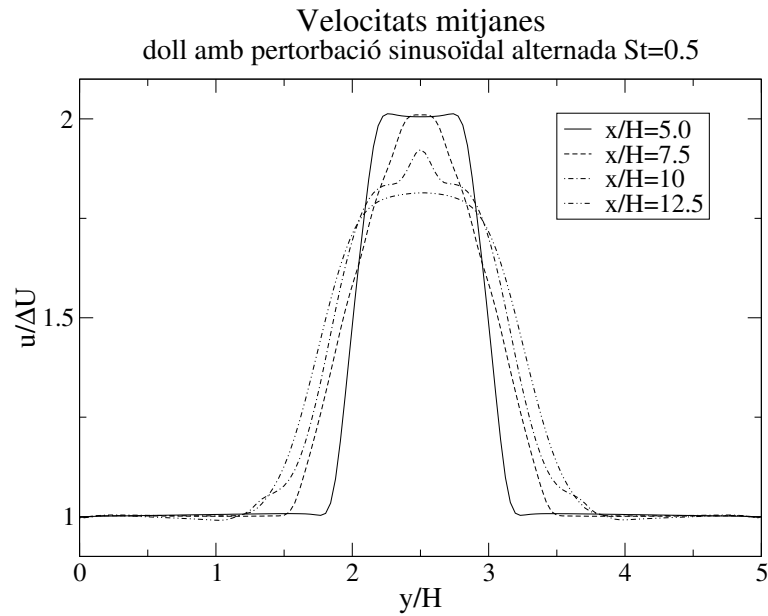


Figura 4.44: Perfils de la component  $u$  de la velocitat mitjana pel doll pla amb pertorbació sinusoidal alternada a  $St=0.5$  a  $Re\ 7000$

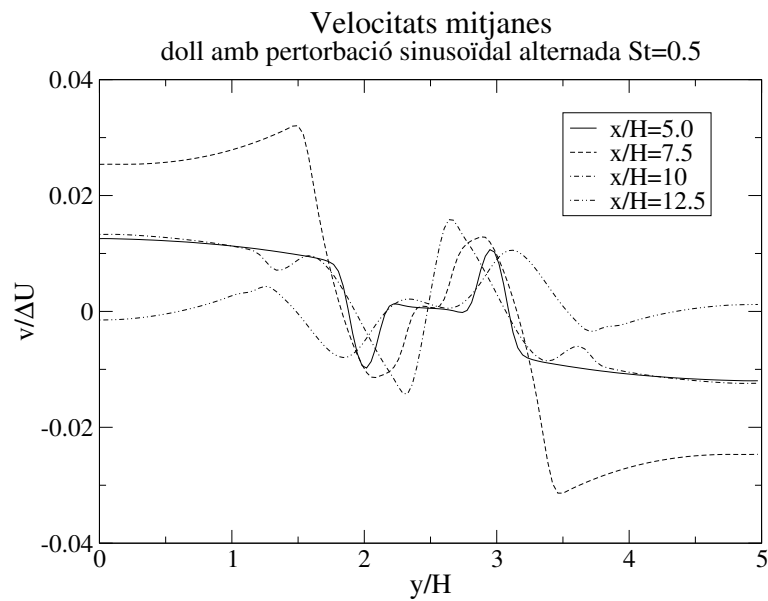


Figura 4.45: Perfils de la component  $v$  de la velocitat mitjana pel doll pla sense pertorbació sinusoidal alternada a  $St=0.5$  a  $Re\ 7000$

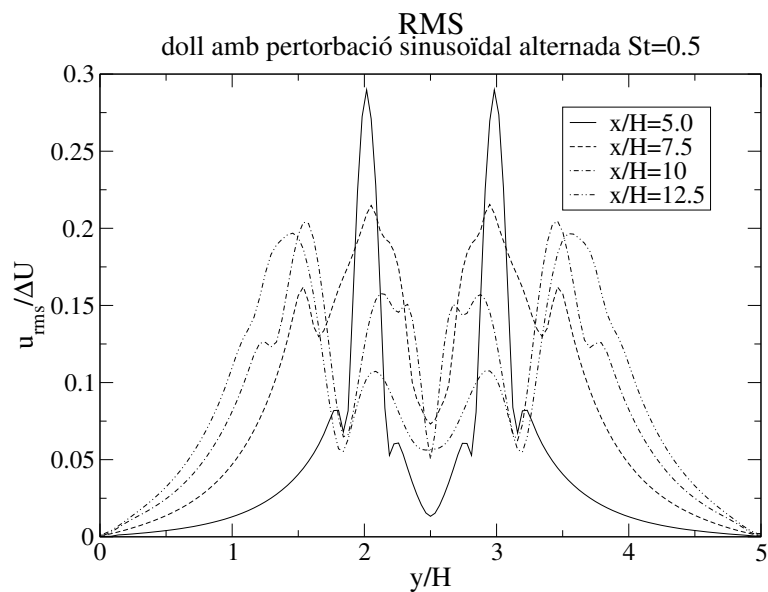


Figura 4.46: Perfils rms de la component  $u$  de la velocitat mitjana pel doll pla amb pertorbació sinusoidal alternada a  $St=0.5$  a  $Re 7000$

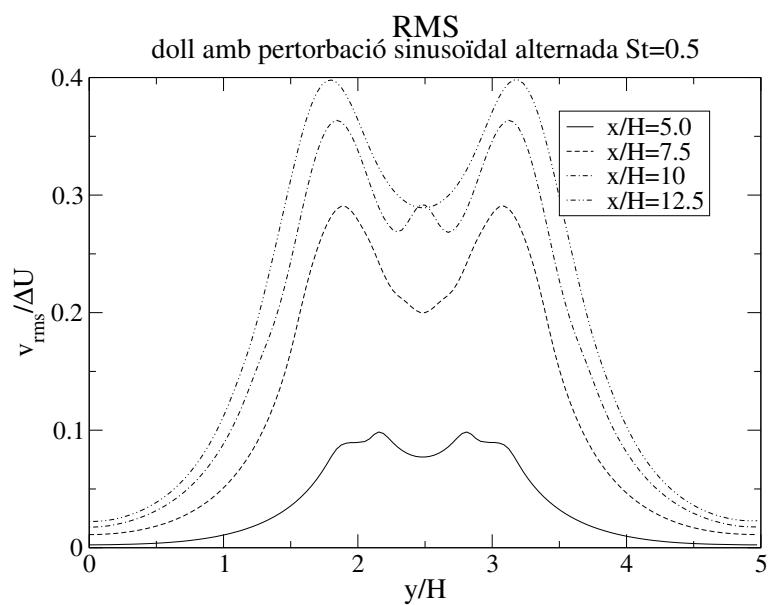


Figura 4.47: Perfils rms de la component  $v$  de la velocitat mitjana pel doll pla sense pertorbació sinusoidal alternada a  $St=0.5$  a  $Re 7000$

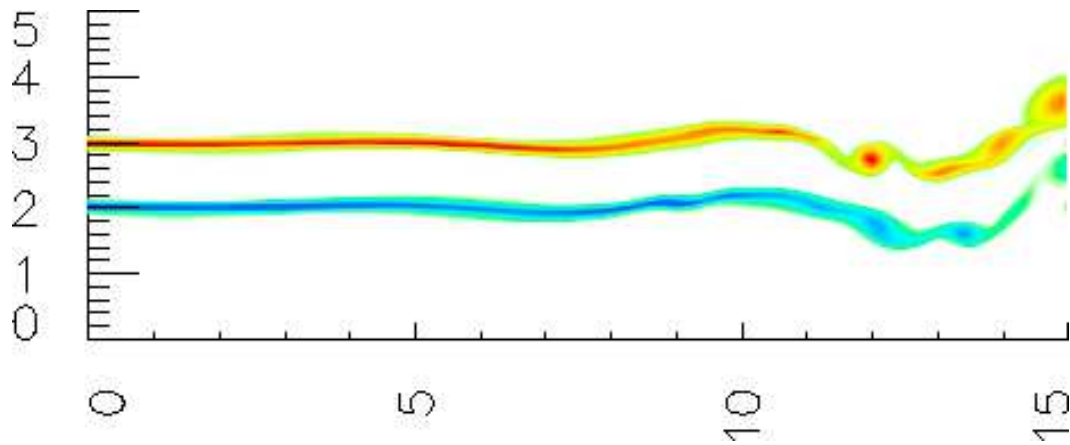


Figura 4.48: Contorns de vorticitat pel doll pla amb pertorbació sinusoidal alternada a  $St=0.25$  a  $Re\ 7000$

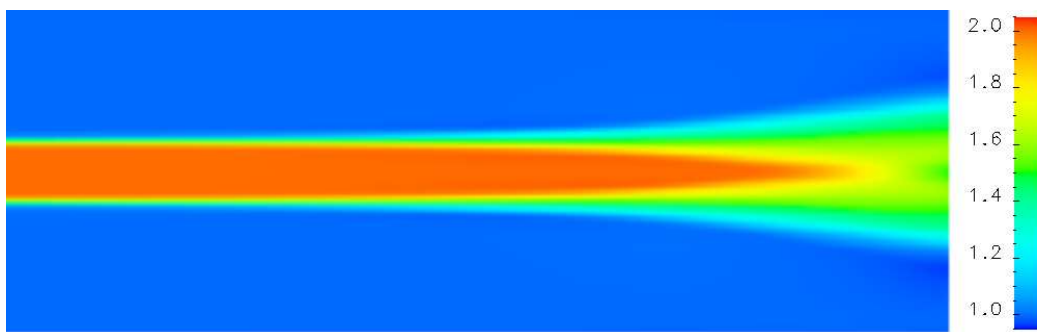


Figura 4.49: Mòdul de la velocitat mitjana pel doll pla amb pertorbació sinusoidal alternada a  $St=0.25$  a  $Re\ 7000$

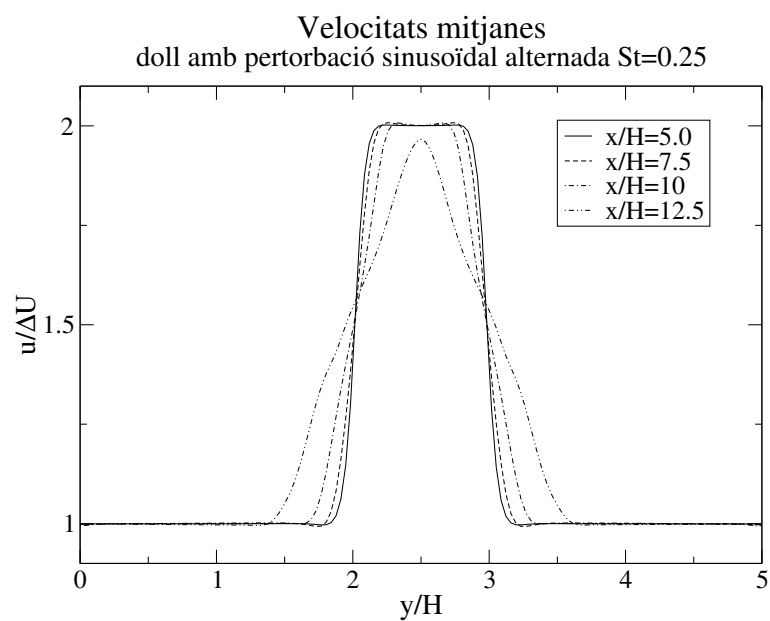


Figura 4.50: Perfils de la component  $u$  de la velocitat mitjana pel doll pla amb pertorbació sinusoidal alternada a  $St=0.25$  a  $Re=7000$

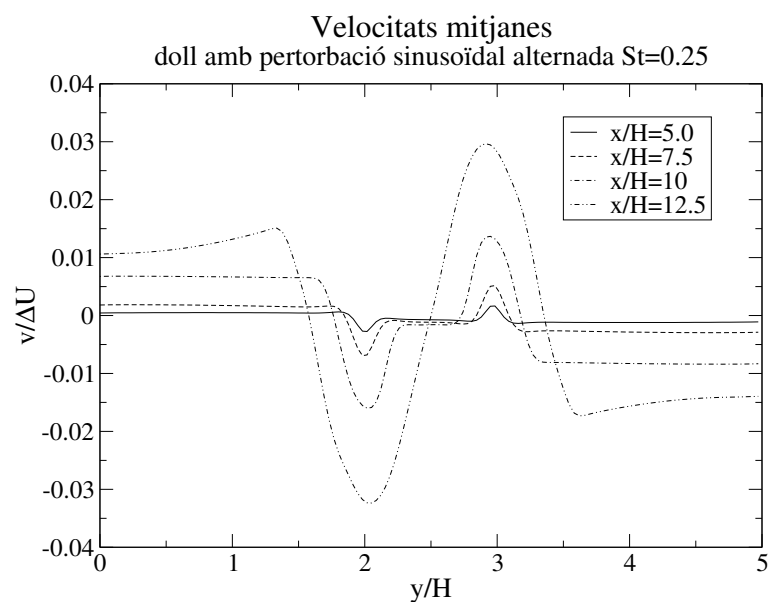


Figura 4.51: Perfils de la component  $v$  de la velocitat mitjana pel doll pla sense pertorbació sinusoidal alternada a  $St=0.25$  a  $Re=7000$

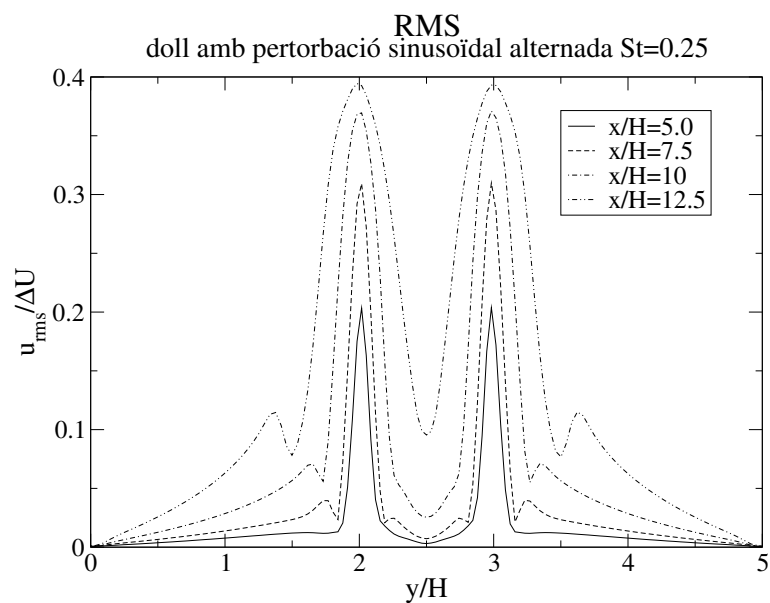


Figura 4.52: Perfils rms de la component  $u$  de la velocitat mitjana pel doll pla amb pertorbació sinusoidal alternada a  $St=0.25$  a  $Re 7000$

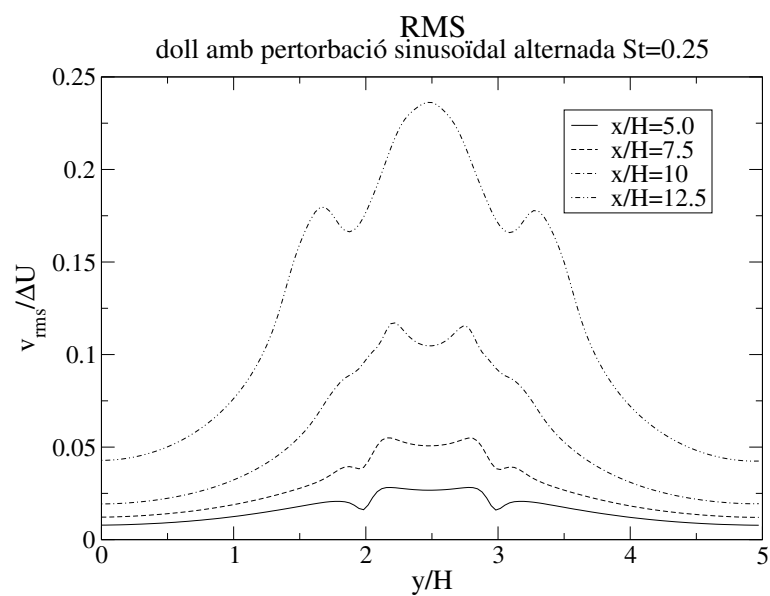


Figura 4.53: Perfils rms de la component  $v$  de la velocitat mitjana pel doll pla sense pertorbació sinusoidal alternada a  $St=0.25$  a  $Re 7000$



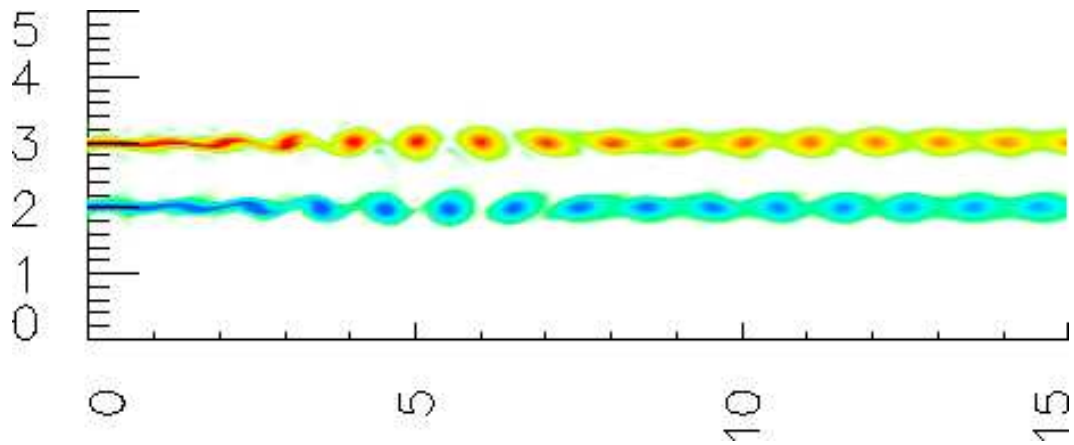


Figura 4.54: Contorns de vorticitat pel doll pla amb pertorbació sinusoidal alternada a  $St=1.5$  a  $Re=7000$

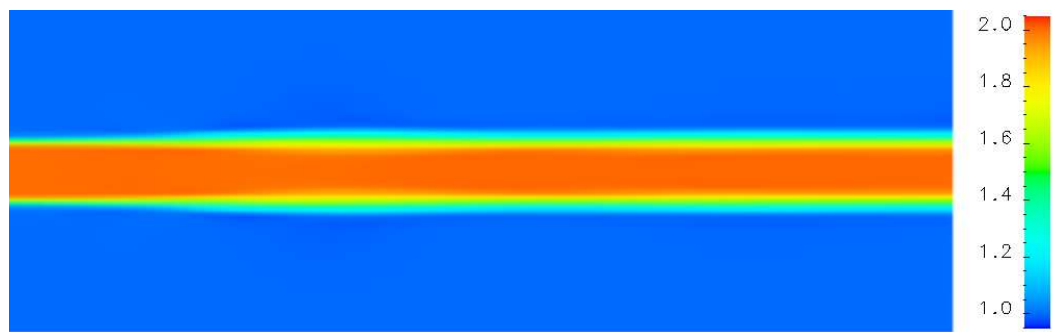


Figura 4.55: Mòdul de la velocitat mitjana pel doll pla amb pertorbació sinusoidal alternada a  $St=1.5$  a  $Re=7000$

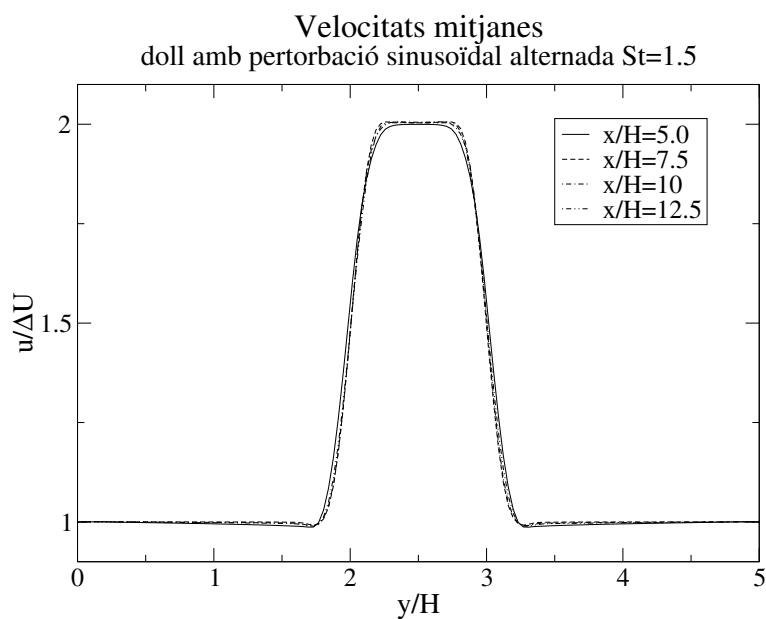


Figura 4.56: Perfils de la component  $u$  de la velocitat mitjana pel doll pla amb pertorbació sinusoidal alternada a  $St=1.5$  a  $Re\ 7000$

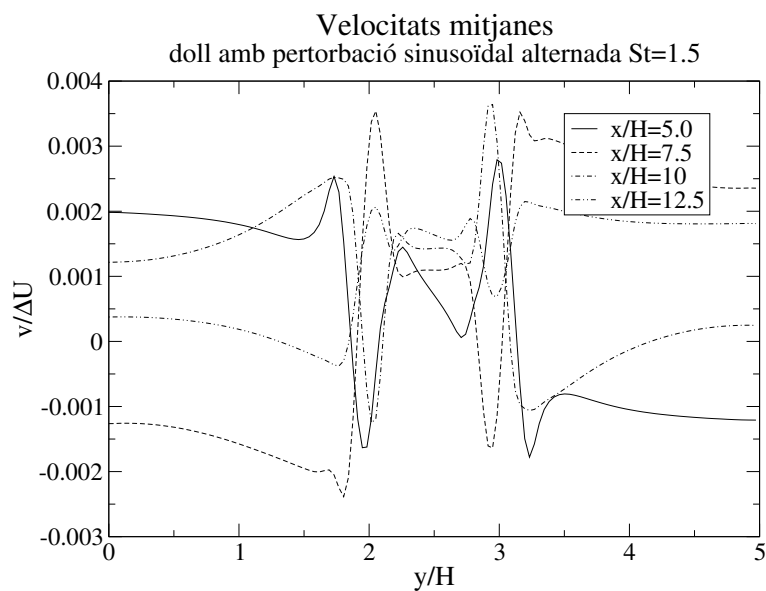


Figura 4.57: Perfils de la component  $v$  de la velocitat mitjana pel doll pla sense pertorbació sinusoidal alternada a  $St=1.5$  a  $Re\ 7000$

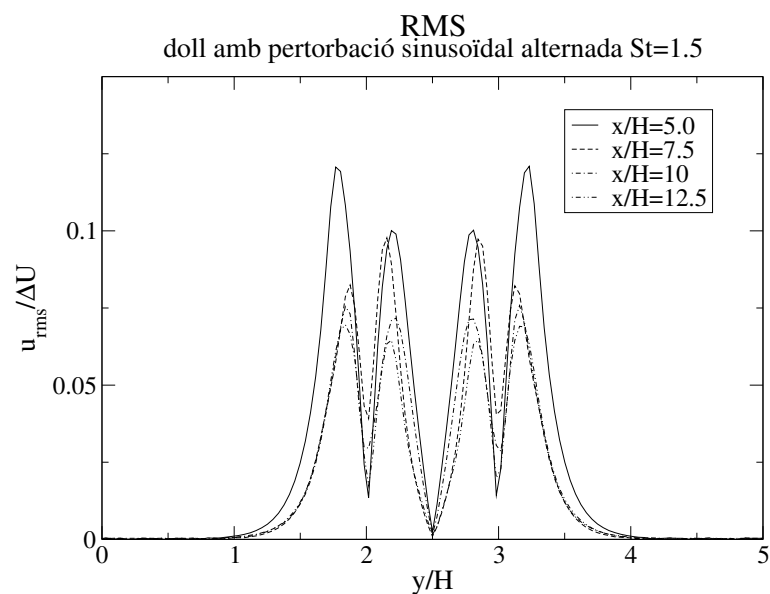


Figura 4.58: Perfils rms de la component  $u$  de la velocitat mitjana pel doll pla amb pertorbació sinusoidal alternada a  $St=1.5$  a  $Re 7000$

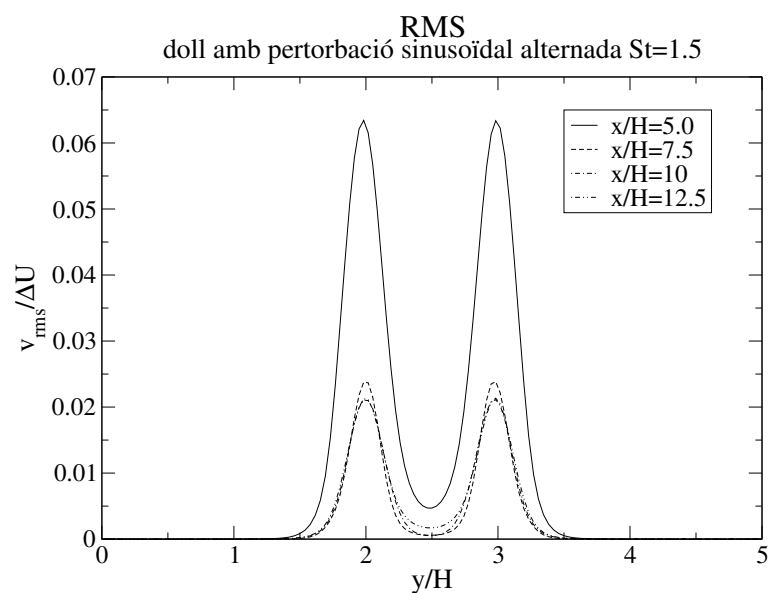


Figura 4.59: Perfils rms de la component  $v$  de la velocitat mitjana pel doll pla sense pertorbació sinusoidal alternada a  $St=1.5$  a  $Re 7000$

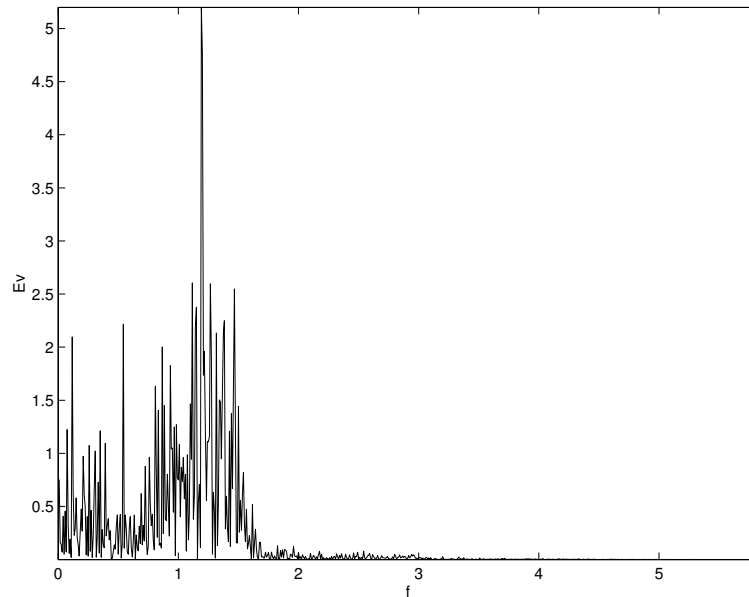


Figura 4.60: Espectre de freqüències per la component  $u$  de la velocitat al punt  $x/h = 10$ ,  $y/H = 2$  al llarg del temps per al doll pla sense perturbació però amb soroll a  $Re\ 7000$

### 4.2.5 Freqüències

Durant el càlcul del camp dinàmic s'han monitoritzat les velocitats i pressions al llarg del temps a diferents punts fixos del domini. Aquestes dades ens aporten gran informació sobre les freqüències que el flux presenta en aquell punt determinat. De totes aquestes sondes numèriques, s'ha analitzat un punt situat sobre la capa de barreja a 10 diàmetres de l'entrada. La seva situació el fa un bon indicador de les estructures coherents evidenciades als camps de vorticitats mostrats anteriorment.

La figura 4.60 mostra l'espectre de freqüències obtingut pel doll pla bidimensional sense perturbació aplicant-hi un soroll pla a l'entrada. Clarament, existeix una freqüència principal que marca l'aparició de les grans estructures. Aquest valor es troba a 1.18, molt proper al que s'havia pronosticat quan vam detectar les segones estructures a  $St = 0.5$ .

Pel cas amb  $St = 1.0$ , tant per perturbacions simètriques com alternades, l'espectre mostra la freqüència aplicada i els seus múltiples immediats (figures 4.61 i 4.62). Aquests valors superiors són freqüències que coexisteixen perquè els vòrtexs no són simètrics respecte al centre. El cap i el final de les recirculacions no són iguals i produeixen deformacions a la senyal registrada a la sonda computacional.

La periodicitat del flux provoca que aquestes asimetries es produeixin amb la mateixa freqüència que els vòrtexs. Com la senyal que produeixen no és neta però sí és periòdica amb la freqüència marcada a la pertorbació, obtenim que la resta de freqüències que apareixen han de ser múltiples de la inicial.

Els espectres de les simulacions realitzades per pertorbacions a  $St = 0.5$  confirmen els comentaris realitzats prèviament respecte a l'aparició de petites estructures a freqüència doble. S'observa a les gràfiques 4.63 i 4.64 que els valors de l'espectre per freqüència 1.0 és tant o més important com l'obtingut per la freqüència aplicada a l'entrada del doll.

Altres simulacions realitzades per pertorbacions amb  $St = 2.0, 3.0$  i  $5.0$  mostren com l'augment de la freqüència provoca que les estructures acabin colapsant-se i que s'obtingui de nou el valor de la freqüència dominant trobat pel doll sense pertorbació, 1.18.

#### 4.2.6 Independència de xarxa

Per tal de comprovar que els resultats eren independents de la xarxa computacional escollida, s'han repetit algunes simulacions amb una xarxa molt més fina. La nova xarxa de 60375 nodes,  $375 \times 161$ , implica un augment de gairebé el doble de punts de càlcul, que ens permet situar molts més punts a les regions de grans gradients. Malgrat l'increment de nodes, els resultats mostren que amb la xarxa inicial de  $251 \times 121$  n'hi ha prou punts, ja que les diferències en les velocitats mitjanes són pràcticament nul·les per la component  $u$  i inferiors a un 3% per la component  $v$ .

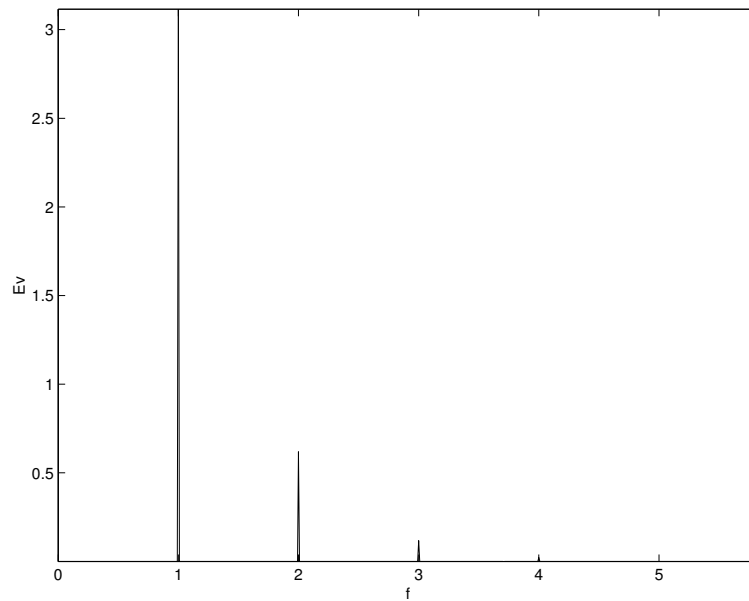


Figura 4.61: Espectre de freqüències per la component  $u$  de la velocitat al punt  $x/h = 10$ ,  $y/H = 2$  al llarg del temps per al doll pla amb pertorbació sinusoidal simètrica amb  $St=1.0$  a  $Re 7000$

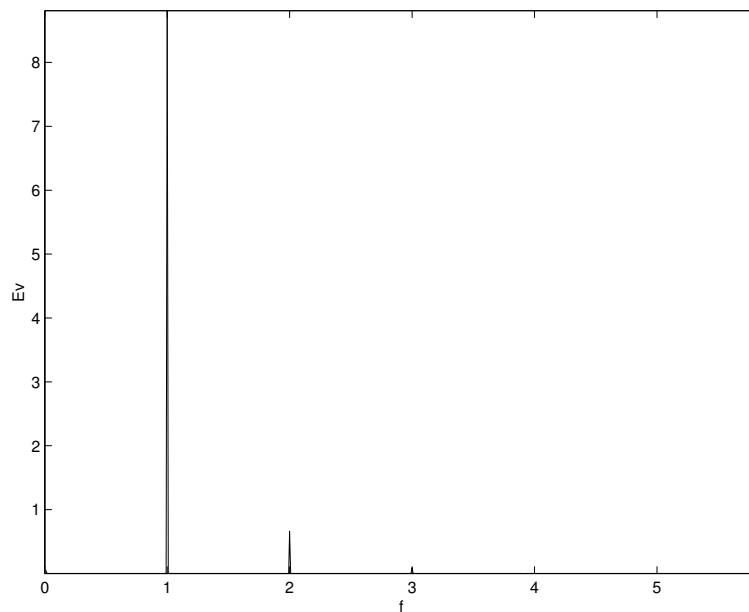


Figura 4.62: Espectre de freqüències per la component  $u$  de la velocitat al punt  $x/h = 10$ ,  $y/H = 2$  al llarg del temps per al doll pla amb pertorbació sinusoidal alternada amb  $St=1.0$  a  $Re 7000$

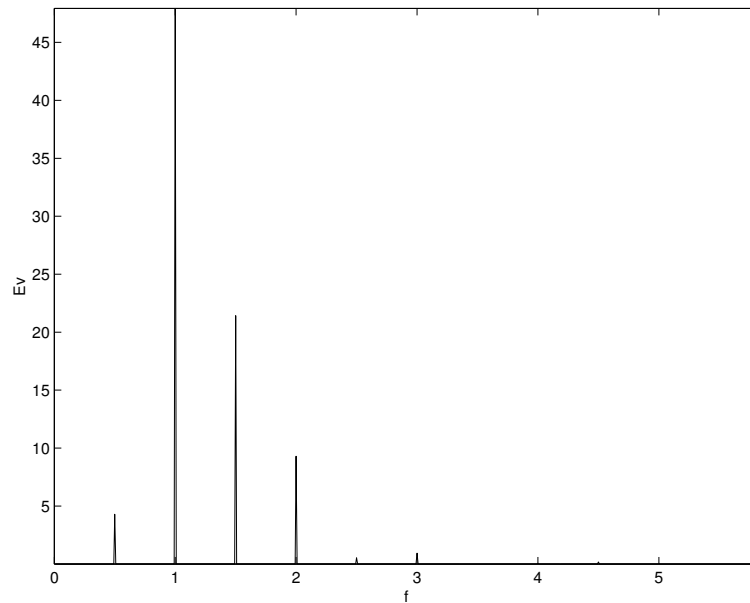


Figura 4.63: Espectre de freqüències per la component  $u$  de la velocitat al punt  $x/h = 10$ ,  $y/H = 2$  al llarg del temps per al doll pla amb pertorbació sinusoidal simètrica amb  $St=0.5$  a  $Re 7000$

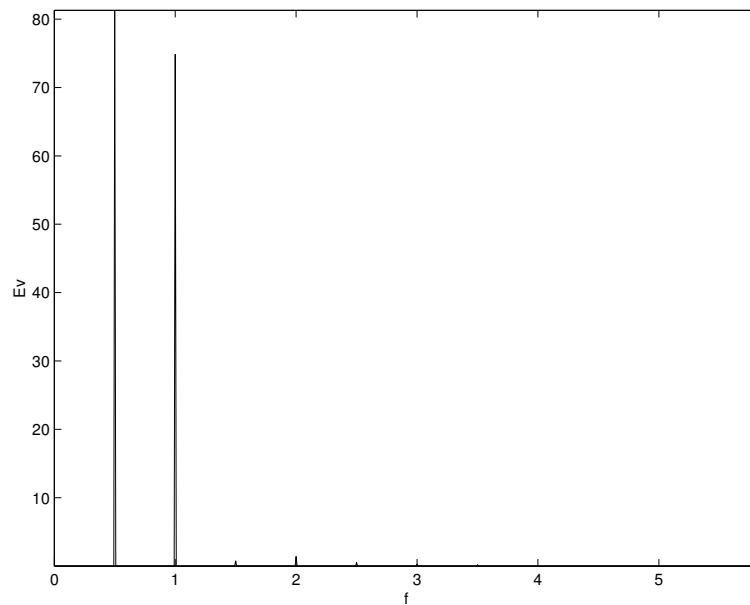


Figura 4.64: Espectre de freqüències per la component  $u$  de la velocitat al punt  $x/h = 10$ ,  $y/H = 2$  al llarg del temps per al doll pla amb pertorbació sinusoidal alternada amb  $St=0.5$  a  $Re 7000$

### 4.2.7 Camp reactiu

En aquesta secció s'analitzen els resultats obtinguts resolent les equacions de transport de matèria per a dolls plans dèbils bidimensionals.

Tal i com es descriu al capítol 2, la reacció estudiada és  $A + B \rightarrow P$ , on  $A$  i  $B$  són els reactius i  $P$  el producte resultant. Com les equacions es resolien adimensionalment per poder generalitzar els resultats, la velocitat de reacció està fixada pel número de Damköhler escollit.

Per tal d'obtenir amb més claredat els efectes dels paràmetres que determinen el sistema, s'han realitzat dos dissenys factorials a dos nivells i tres variables: els números de Schmidt, Damköhler i Strouhal. Aquests dissenys són fàcils d'utilitzar, organitzen els experiments i aporten una gran quantitat d'informació sobre els efectes de cadascuna de les variables escollides així com els efectes creuats. Els resultats quantifiquen el comportament del sistema davant una variació d'un o més paràmetres.

Els dissenys factorials  $2^n$  consisteixen en estudiar els efectes de  $n$  paràmetres analitzant-los a 2 nivells o valors diferents. En el aquest cas, es prenen dos números de Strouhal que mostren diferències significatives al camp dinàmic, com són 0.5 i 1.5, dos números de Schmidt típics de gasos i dos valors per al número de Damköhler que determinen dues velocitats de reacció de diferent ordre, 0.1 i 0.01, típiques de reaccions lentes. La taula 4.1 resumeix aquests valors en un quadre.

		St	Sc	Da
valor alt	+	1.5	1.5	0.1
valor baix	-	0.5	0.5	0.01

Taula 4.1: Paràmetres utilitzats als dissenys factorials de dos nivells

Com a variable quantificadora de cada cas es pren la conversió mitjana d'A a una distància de 14 diàmetres. S'ha desestimat escollir la sortida per evitar possibles influències de les condicions de contorn. Definim la conversió d'A com

$$X_A = 100 \times \frac{F_0 - F_{14D}}{F_0} \quad (4.1)$$

on  $F_0$  és el flux màssic mitjà d'A a l'entrada del domini

$$F_0 = \frac{1}{t_f - t_0} \int_{t=t_0}^{t_f} \int_{x=0} u C_A dy dt \quad (4.2)$$



i  $F_{14D}$  és el flux màssic mitjà a una distància de 14 diàmetres de l'origen.

Al primer disseny (disseny factorial 1) s'estudia un doll on el component B entra al domini computacional amb concentració constant  $C_B = 1.0$  tant pel centre del doll com per la regió del flux secundari (*coflow*). En aquest cas, només hi ha aport de reactiu A pel doll, també a concentració constant  $C_A = 1.0$ . D'aquesta manera, A es converteix en l'espècie limitant del sistema.

Els resultats de les 8 simulacions es troben llistats a la taula 4.2. Així per exemple, al primer cas que correspon a  $St = 1.5$ ,  $Sc = 1.5$  i  $Da = 0.1$  s'ha obtingut una conversió del 45.86%. Per tant, prop de la sortida del domini el flux màssic d'A es redueix a la meitat. Al segon cas, amb els mateixos valors per als números de Strouhal i Schmidt i però variant el valor de Damköhler a 0.01, la conversió disminueix fins a un 7.25%, gairebé 7 vegades menys. Anàlogament, combinant els valors de les tres variables analitzades, es formulen la resta dels casos.

La taula 4.3 mostra la mitjana dels resultats així com els efectes individuals i creuats per aquest primer disseny factorial. D'aquests valors hom pot concloure que el número de Damköhler, constant de reacció adimensionalitzada, és el factor més influent de tots els analitzats. La seva variació afecta considerablement la conversió d'A. Per altra banda, el canvi del número de Schmidt, dins del rang escollit pràcticament no s'aprecia. L'augment del número de Strouhal influeix sobre el sistema disminuint lleugerament la conversió a 14 diàmetres. A la taula també s'observa que tant les interaccions de 2 factors com la de tots 3 són menyspreables.

A les figures 4.65 i 4.66 es presenten els camps instantanis de concentració dels productes de la reacció, amb notables diferències entre tots dos. El primer camp, corresponent a Strouhal 1.5, mostra màxims de conversió al centre del doll al llarg de tot el domini computacional. La concentració de P també és més gran dins de les petites recirculacions ja que augmenta el temps de residència de A i B. Al cas  $St = 0.5$ , la concentració de P es distribueix de manera molt diferent. S'observa com els màxims es troben a la regió de les costelles dels vòrtex. Dins de la regió del doll, existeixen grans zones on la concentració de P és nul·la, ja que l'espècie química A no hi arriba. Als vòrtex, el producte de la reacció apareix enrotllant-se en forma espiral cap al centre, mostrant les zones on la concentració de l'espècie limitant és màxima.

Els perfils 4.67 i 4.68 mostren la concentració mitjana d'A per als dos casos esmentats amb diferent freqüència de pertorbació. Aquests gràfics confirmen que a  $St = 1.5$ , la concentració d'A disminueix ràpidament al centre del doll, mentres que

Cas	St	Sc	Da	$X_A$
1	+	+	+	45.86
2	+	+	-	7.25
3	+	-	+	45.97
4	+	-	-	7.25
5	-	+	+	46.81
6	-	+	-	7.50
7	-	-	+	46.93
8	-	-	-	7.50

Taula 4.2: Conversió d'A als diferents casos del disseny factorial 1

Mitjana	26.87
Efectes Principals	
St	-0.77
Sc	-0.06
Da	39.03
Interaccions de 2 factors	
St×Sc	0.00
St×Da	-0.35
Sc×Da	-0.06
Interacció de 3 factors	
St×Sc×Da	0.00

Taula 4.3: Efectes de les variables als disseny factorial 1

per  $St = 0.5$  hi ha una gran dispersió de l'espècie química a partir d'una distància de 7-8 diàmetres.

L'evolució de la conversió al llarg del doll es mostra a les figures 4.69 i 4.70. De nou es demostra que la influència de la difusivitat molecular és nul·la i que la velocitat de reacció augmenta considerablement el consum de les espècies químiques. Malgrat que les dues pertorbacions, representades pel número de Strouhal, presenten una conversió similar en el domini estudiat, és destacable la diferència en el pendent de la corba. Donada la tendència mostrada, sembla que aigües avall la freqüència més baixa hagi de proporcionar millor conversió. Caldria realitzar un càlcul sobre un domini molt més llarg per poder confirmar aquesta tendència.

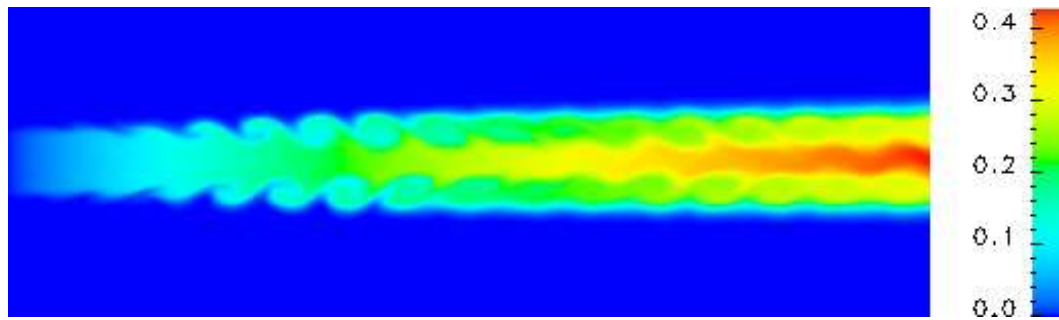


Figura 4.65: Concentracions instantànies del producte de la reacció química per  $Sc=0.5$ ,  $Da=0.1$  i  $St=1.5$ . Disseny factorial 1.

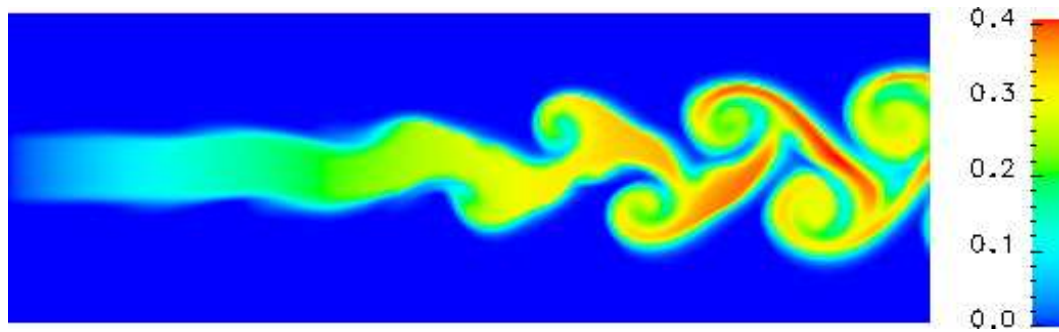


Figura 4.66: Concentracions instantànies del producte de la reacció química per  $Sc=0.5$ ,  $Da=0.1$  i  $St=0.5$ . Disseny factorial 1.

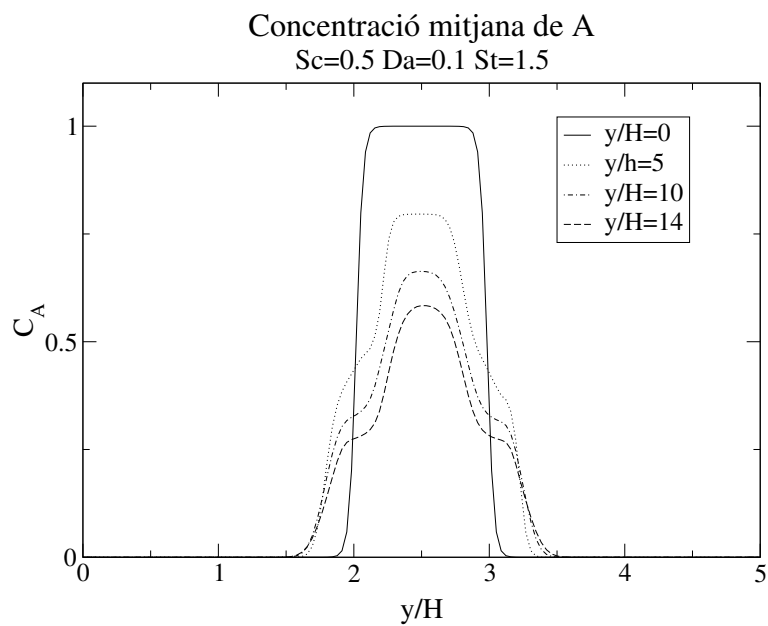


Figura 4.67: Perfils de concentracions d'A a diferents distàncies de l'origen a  $Sc=0.5$ ,  $Da=0.1$  i  $St=1.5$ . Disseny factorial 1.

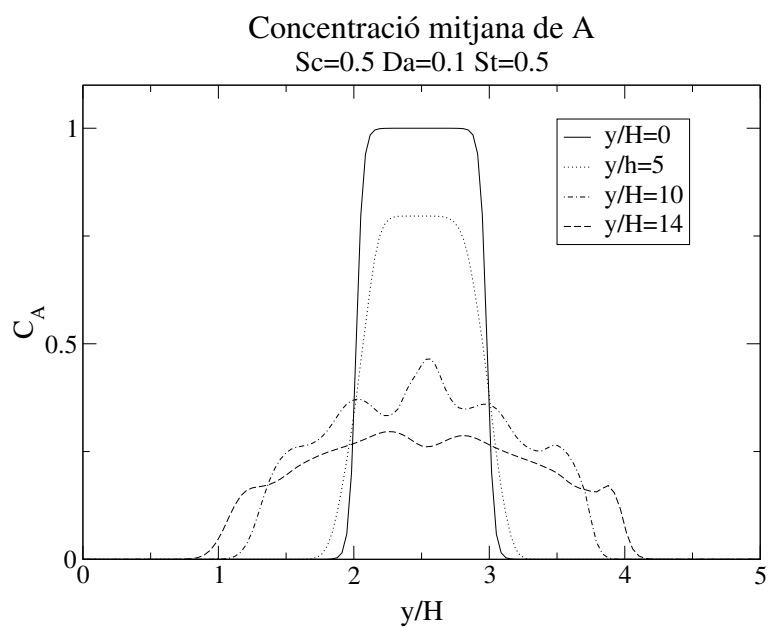


Figura 4.68: Perfils de concentracions d'A a diferents distàncies de l'origen a  $Sc=0.5$ ,  $Da=0.1$  i  $St=0.5$ . Disseny factorial 1.

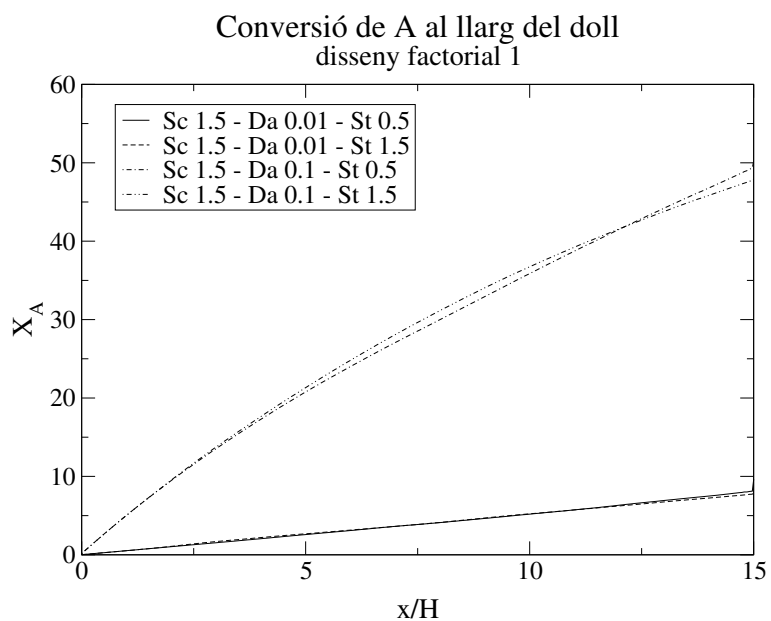


Figura 4.69: Conversió de l'espècie química A al llarg del doll a  $Sc=0.5$ . Disseny factorial 1.

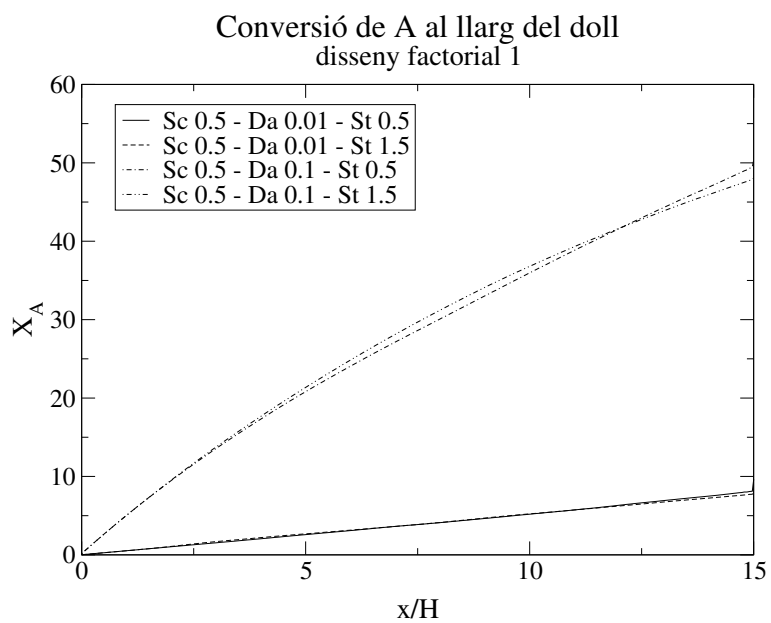


Figura 4.70: Conversió de l'espècie química A al llarg del doll a  $Sc=1.5$ . Disseny factorial 1.

També s'ha realitzat un segon disseny factorial amb gairebé les mateixes condicions. La diferència ha estat en l'aportació de B de l'exterior. En aquest cas, l'espècie química B només entra al sistema a través del flux secundari amb concentració  $C_B = 1.0$ . L'altre reactiu continua entrant exclusivament pel flux principal amb concentració constant  $C_A = 1.0$ . La taula 4.4 mostra els resultats obtinguts. En aquest cas, les conversions es redueixen respecte al cas anterior ja que no existeix premescla dels components químics. A la taula amb els efectes principals i creuats (taula 4.5) es confirma que el número de Damköhler continua essent la variable que més influeix sobre el resultat i que els efectes creuats són menyspreables.

Les figures amb els camps de concentració instantanis de P (4.71 i 4.72) mostren com la reacció només es produeix sobre les capes de barreja. Al cas amb pertorbació a Strouhal 1.5, les petites recirculacions es converteixen en barrejadors entre l'espècie que es troba al centre del doll i la que està a l'exterior. Així, cada vòrtex es converteix en un petit reactor amb aportació contínua de reactius. Al cas a Strouhal 0.5, la grandària dels vòrtexs torna a ser un punt primordial. La mescla d'A i B es produeix a escales més grans però de manera més lenta. Els centres de les recirculacions determinen el màxim de producció.

Els perfils de concentració d'A (figures 4.73 i 4.74) mostren diferències amb el disseny factorial anterior. En aquest cas la concentració al centre es manté màxima per  $St = 1.5$  al llarg de tot el domini estudiat. La diferència amb el cas premesclat es fa evident en aquest detall. Pel cas amb pertorbació a freqüència més baixa, la dispersió a partir d'una distància 7-8 diàmetres continua essent destacable.

Els gràfics 4.75 i 4.76 mostren la conversió al llarg del doll. Igual que al cas anterior, s'observa que la influència de la variació de la difusivitat és nul·la en tot el domini. També es torna a confirmar una diferència destacable en la tendència que segueix la conversió al variar la freqüència. Mentre que per  $St = 1.5$  la corba té derivada segona negativa, a  $St = 0.5$  és positiva i gran.

Aquests dos dissenys factorials  $2^3$  es poden considerar un disseny factorial  $2^4$  on la quarta variable estudiada seria l'existència o no de premescla al doll.

Cas	St	Sc	Da	$X_A$
1	+	+	+	10.63
2	+	+	-	1.34
3	+	-	+	10.90
4	+	-	-	1.39
5	-	+	+	9.92
6	-	+	-	1.13
7	-	-	+	10.31
8	-	-	-	1.22

Taula 4.4: Conversió d'A als diferents casos del disseny factorial 2

Mitjana	5.85
Efectes Principals	
St	0.42
Sc	-0.2
Da	9.17
Interaccions de 2 factors	
St×Sc	0.04
St×Da	0.23
Sc×Da	-0.13
Interacció de 3 factors	
St×Sc×Da	0.02

Taula 4.5: Efectes de les variables als disseny factorial 2

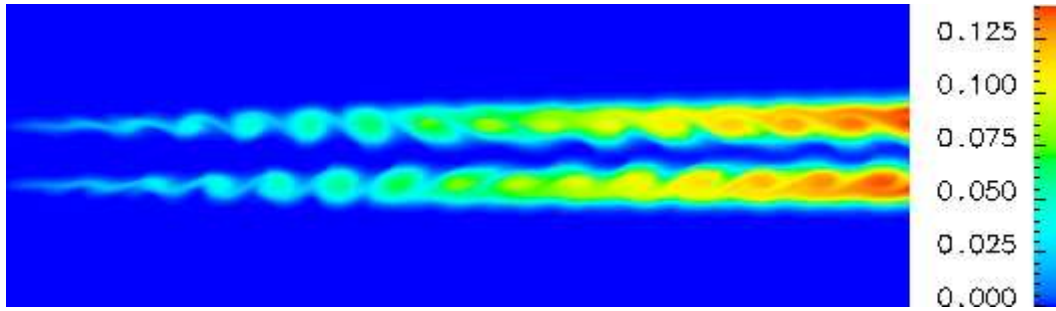


Figura 4.71: Concentracions instantànies del producte de la reacció química per  $Sc=0.5$ ,  $Da=0.1$  i  $St=1.5$ . Disseny factorial 2.

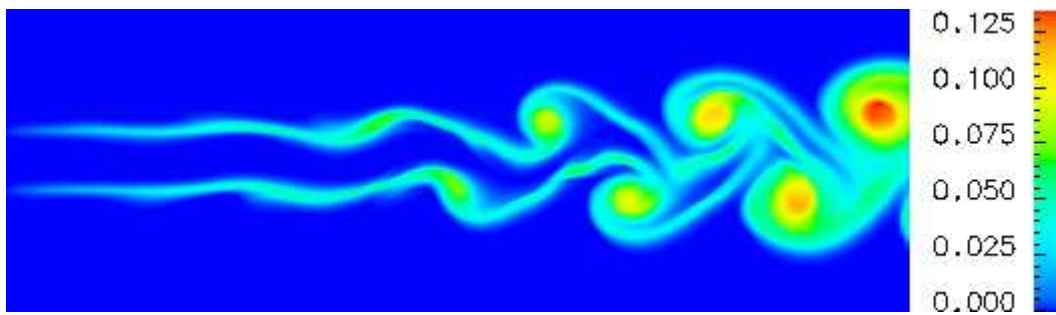


Figura 4.72: Concentracions instantànies del producte de la reacció química per  $Sc=0.5$ ,  $Da=0.1$  i  $St=0.5$ . Disseny factorial 2.



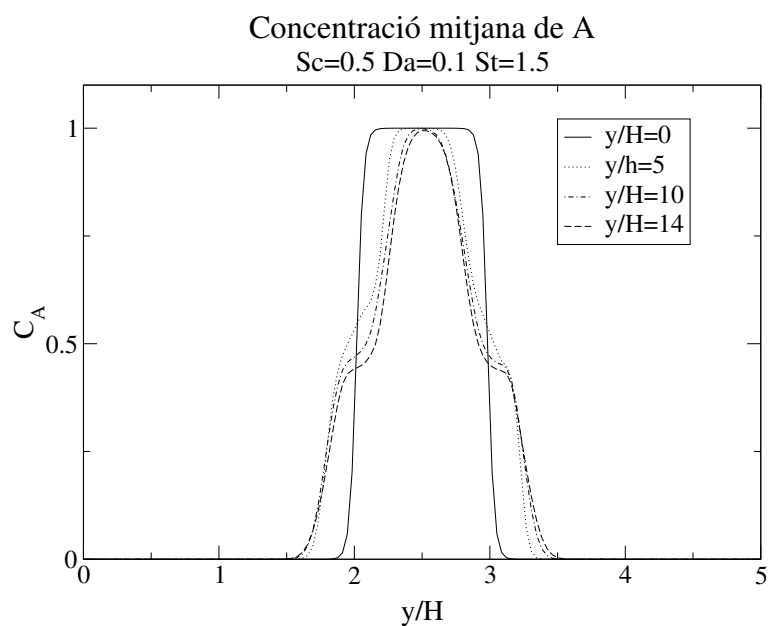


Figura 4.73: Perfils de concentracions d'A a diferents distàncies de l'origen a  $Sc=0.5$ ,  $Da=0.1$  i  $St=1.5$ . Disseny factorial 2.

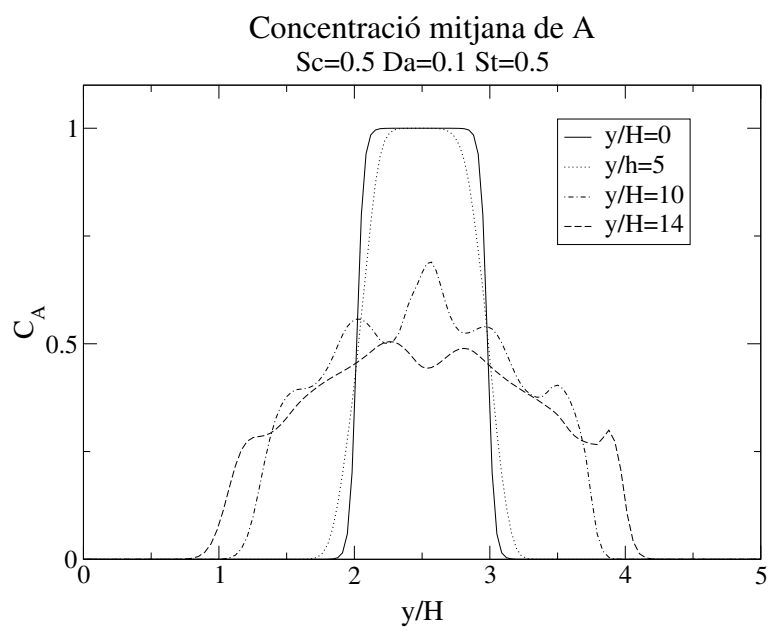


Figura 4.74: Perfils de concentracions d'A a diferents distàncies de l'origen a  $Sc=0.5$ ,  $Da=0.1$  i  $St=0.5$ . Disseny factorial 2.

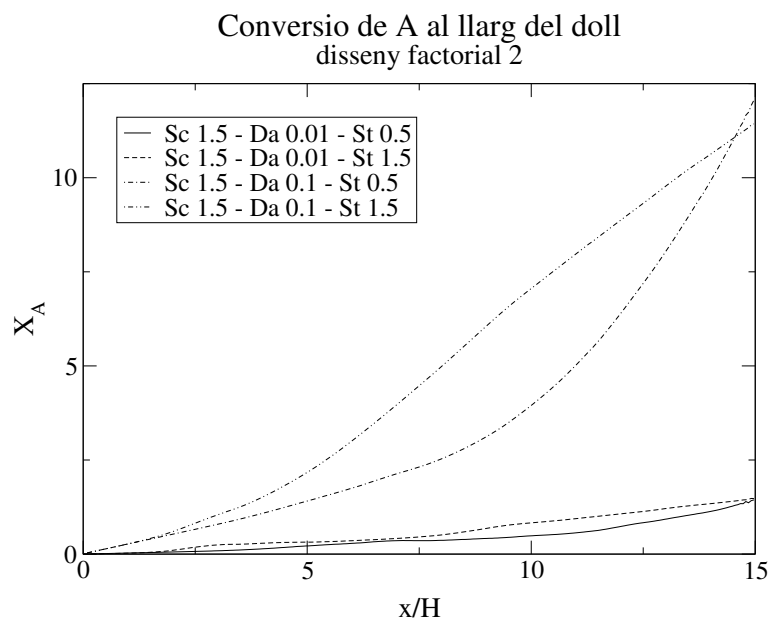


Figura 4.75: Conversió de l'espècie química A al llarg del doll a  $Sc=0.5$ . Disseny factorial 2.

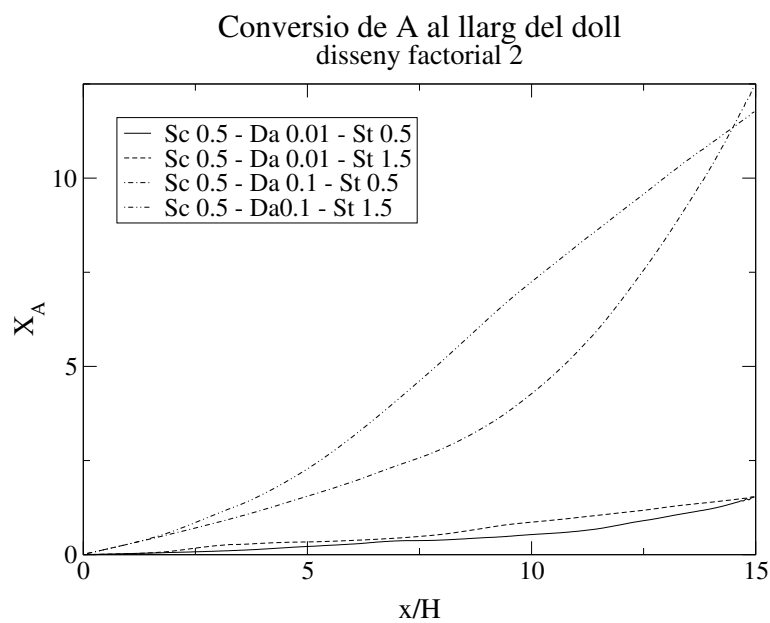


Figura 4.76: Conversió de l'espècie química A al llarg del doll a  $Sc=1.5$ . Disseny factorial 2.

A més dels dos dissenys factorials, s'han realitzat altres simulacions del doll dèbil amb reacció. El primer estudi analitza la influència de la difusió molecular, variant el número de Schmidt a un valor de 100, valor poc comú en gasos però molt més freqüent en líquids. Malgrat aquest augment, la seva influència sobre el sistema continua essent nul·la. Aquest fet demostra que en aquest sistema el transport per convecció és el principal mecanisme dels fluxos de matèria.

Un altre test realitzat ha consistit en augmentar la intensitat de la pertorbació aplicada a l'entrada. En aquest cas, l'amplitud de la pertorbació ha augmentat fins a un 25% de la velocitat secundària. El camp de vorticitat per  $St = 0.5$  es mostra a la figura 4.77. Tal i com s'ha comentat prèviament, l'increment de la intensitat comporta un escurçament del domini necessari pel desenvolupament del doll. L'evolució de la conversió d'A al llarg del doll per aquest cas i pel d'amplitud 10% es pot observar a la gràfica 4.78. Prop de la sortida, la diferència és de gairebé un 50%. A més, la millora de la mesca comporta una tendència creixent superior per al cas amb amplitud més gran.

Com a últim cas, s'ha realitzat la simulació d'un doll reactiu sense pertorbació però amb soroll a l'entrada. Els resultats de conversió, mostrats a la figura 4.79 demostren que l'ús del doll com a reactor pot millorar el seu rendiment si s'escull una pertorbació adequada per a l'origen. Aquesta inestabilitat artificial, que a la pràctica pot produir-se amb mecanismes pertorbadors situats a la boca del doll, pot millorar la conversió de les espècies fins a més d'un 100% a certes distàncies de l'origen.

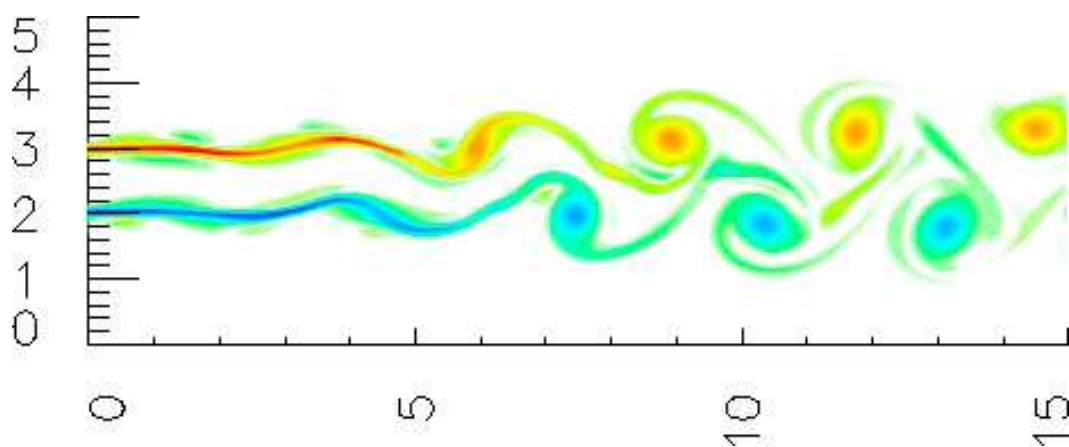


Figura 4.77: Contorns de vorticitat pel doll pla amb pertorbació sinusoidal alternada a  $St=0.5$  a  $Re$  7000 canviant l'amplada de la pertorbació

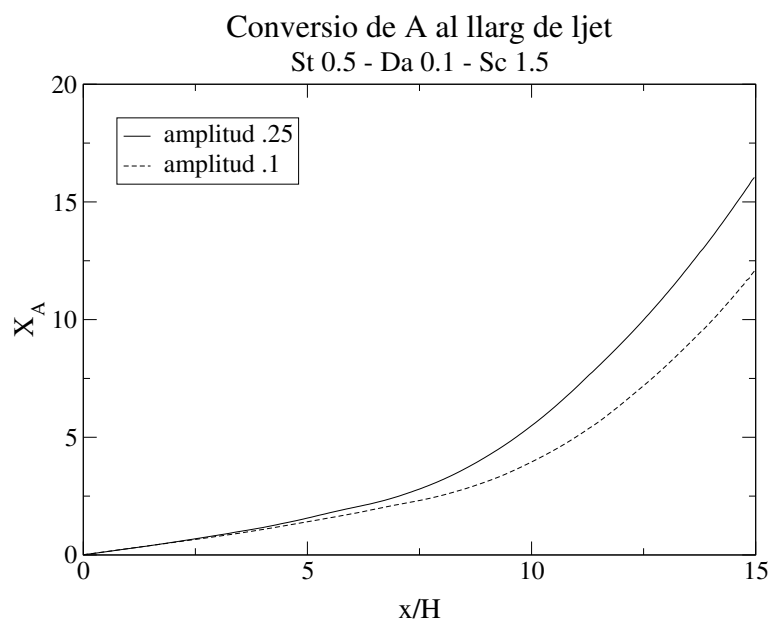


Figura 4.78: Comparació de la conversió de l'espècie química A al llarg del doll a  $St=0.5$  modificant l'amplada de la pertorbació.

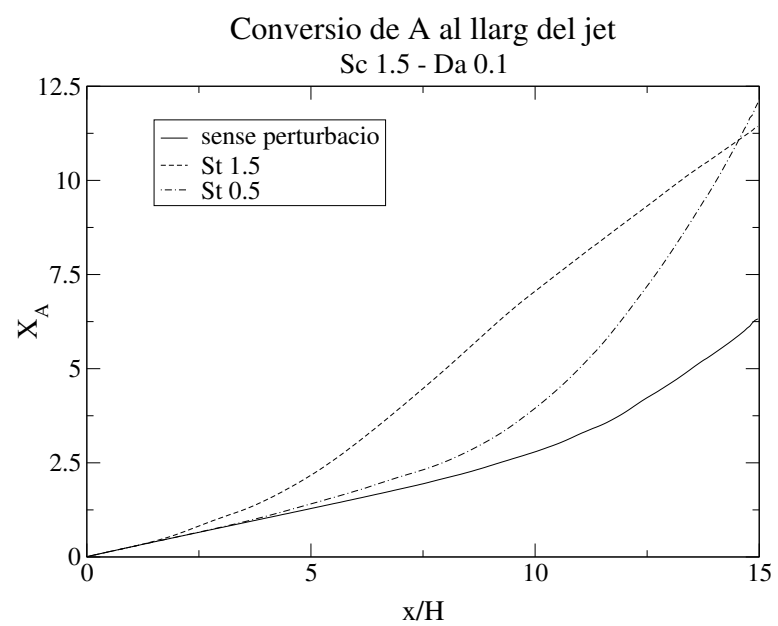


Figura 4.79: Comparació de la conversió de l'espècie química A al llarg del doll per diferents pertorbacions.

### 4.3 Dolls plans tridimensionals

En aquest apartat es descriuen els resultats obtinguts en la simulació realitzada d'un doll pla tridimensional turbulent i reactiu. En una primera part es presenten les dades estadístiques i instantànies obtingudes pel camp dinàmic. A la segona secció es discuteix sobre el sistema reactiu i com l'estructura del flux turbulent afecta la conversió de les espècies químiques.

#### 4.3.1 Camp dinàmic

En aquest cas, el domini estudiat és una regió rectangular de dimensions  $25H \times 20H \times 4H$  i discretitzat amb una xarxa computacional de  $151 \times 211 \times 16$  nodes. En la direcció  $z$  se suposa que el doll és periòdic.

A diferència dels casos bidimensionals estudiats, considerem el doll tridimensional fort, és a dir, que la velocitat del flux secundari és baixa i d'ordre inferior a la velocitat principal.

$$\eta = \frac{U_1 - U_2}{U_1 + U_2} = \frac{\Delta U}{U_1 + U_2} = 0.83$$

Aquest fet facilita el desenvolupament de la zona turbulenta prop de l'entrada del doll. Els valors petits de la velocitat del flux co-corrent,  $U_2$  asseguren que l'evolució del doll estudiat és similar a un doll sense flux co-corrent. No obstant, l'existència del flux secundari estabilitza el càlcul ja que la quantitat de matèria que s'introdueix al domini computacional pels contorns és menor. L'anàlisi numèrica s'ha realitzat a Reynolds 3000, amb un número de Schmidt igual a 1.0 i un número de Prandtl 0.71. L'amplada inicial de la capa de barreja considerada és  $\theta/H = 0.05$

Les dades obtingudes dels estudis numèrics portats a terme s'han contrastat amb resultats experimentals i de simulacions directes documentades a la bibliografia. Per comparar l'evolució corrent avall de la mitja amplada i el decaïment de la velocitat al centre hem emprat els treballs de Thomas i Chu [47], Browne [99] i Stanley [68]. Els perfils d'autosimilitud s'han comparat amb els treballs experimentals de Gutmark i Wygnanski [27] i Ramaprian i Chandrasekhara [28], així com la simulació numèrica de Stanley [68].

### Camp de vorticitat

Una manera fàcil d'il·lustrar el camp dinàmic i detectar les estructures principals del flux és mitjançant el vector vorticitat, que quantifica la rotació del fluid a cada punt. La figura 4.80 mostra isosuperfícies de mòdul de vorticitat. S'observa que, sota les condicions estudiades, el doll necessita una regió inicial de 7 diàmetres per inestabilitzar-se. Superada aquesta distància, els màxims de vorticitat confirmen que les grans estructures tendeixen a orientar-se de manera alternada. La regió final presenta una gran varietat d'estructures tridimensionals, destacant els fils de vorticitat que uneixen l'exterior de la capa de barreja amb el centre del doll.

La figura 4.81 mostra la component  $\omega_y$  de la vorticitat a temps  $t = 400H/\Delta U$ . S'observa que a la regió inicial el valor de  $\omega_y$  és nul ja que no existeix rotació al pla normal a la direcció  $y$  fins a una distància de 6 diàmetres. A partir d'aquest punt hi ha un augment constant de la tridimensionalitat de les estructures presents. Com es pot observar, l'evolució cap al comportament turbulent es produeix quan les dues capes de barreja convergeixen i interaccionen entre elles.

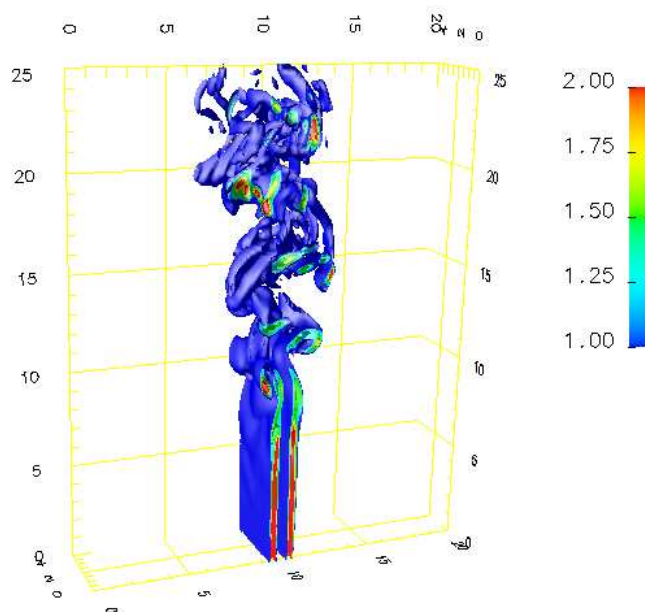
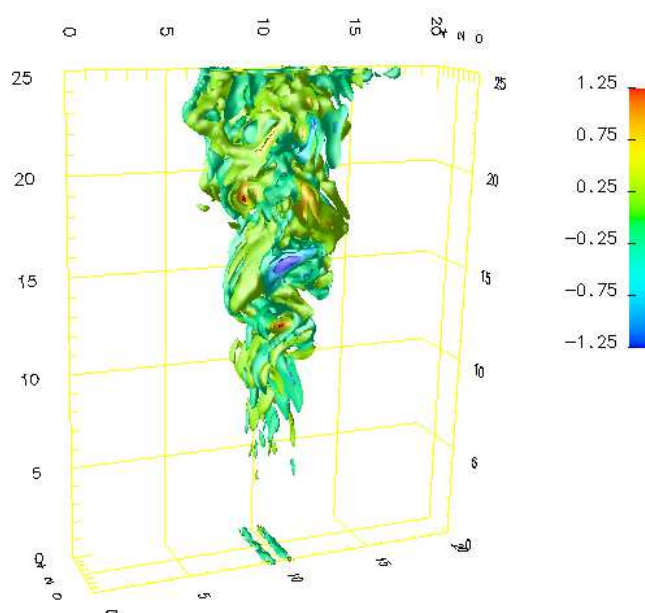
### Velocitat mitjana

La mitja amplada del doll,  $\delta_U(x)$ , és el punt on la velocitat d'excés,  $U - U_2$ , decau un 50% respecte la velocitat d'excés al centre. La figura 4.82 mostra l'evolució de la mitja amplada obtinguda i la concordança amb els resultats bibliogràfics. A causa de la diferència en el número de Reynolds estudiat (taula 4.6), els dolls comparats requereixen una regió de desenvolupament diferent. Aquest fet alenteix o accelera l'aparició de la zona turbulenta. Per aquest motiu, per visualitzar millor la comparació, els resultats bibliogràfics han estat desplaçats en la direcció longitudinal.

Expressant la distància al centre del doll normalitzada per la mitja amplada, hom pot comprovar que les velocitats mitjanes col·lapsen seguint un perfil independent del número de Reynolds. Aquest comportament és a causa de la linialitat de la mitja amplada i la coordenada longitudinal,  $x$ . Històricament, aquesta relació s'ha expressat com

$$\frac{\delta_U}{H} = K_1 \left[ \frac{x}{H} + K_2 \right] \quad (4.3)$$

Realitzant una regressió linial per mínims quadrats a la regió des de  $x/H = 12$

Figura 4.80: Isosuperfícies del mòdul de vorticitat a  $t=400$ Figura 4.81: Isosuperfícies de la component  $\omega_y$  de la vorticitat a  $t=400$



Autor	Re	$K_1$	$K_2$	$M_1$	$M_2$
Treball present	3000	0.101	-4.48	0.243	-6.07
Ramaprian [28]	1600	0.110	-1.00	0.093	-1.60
Browne [99]	7620	0.129	-5.00	0.143	-9.00
Thomas [100]	8000	0.110	0.104	0.220	-1.20
Thomas [47]	8300	0.110	0.104	0.220	-1.19
Gutmark [27]	30000	0.100	-2.00	0.189	-4.72
Stanley [68]	3000	0.094	0.904	0.208	-0.577

Taula 4.6: Dades del creixement de la mitja amplada i el decaïment de la velocitat al centre del doll. Resultats d'aquest treball, d'estudis experimentals i de simulació directa.

fins a 24 dels resultats, obtenim  $K_1 = 0.101$  i  $K_2 = -4.48$  pel creixement lineal de la mitja amplada. A la taula 4.6 es comparen aquests valors amb els de la bibliografia. Mentre que el número de Reynolds varia, els valors del pendent de la mitja amplada es mantenen relativament constants. El resultat obtingut es troba dins del rang dels treballs experimentals

El valor trobat per la constata  $K_2$  en els diferents estudis presenta una gran dispersió ja que l'origen virtual del doll està fortament afectat per les condicions a l'origen. El resultat obtingut en aquest treball fixa aquest punt a 4.5 diàmetres posterior a l'entrada del doll.

La figura 4.83 mostra el decaïment de la velocitat al centre del doll en comparació amb els resultats de Thomas i Chu [47], Browne [99] i Stanley [68]. S'observa una bona concordança entre els resultats.

L'anàlisi d'auto-similitud del doll pla prediu que el decaïment de la velocitat segueix una potència  $-1/2$  en funció de la coordenada longitudinal. Normalment aquesta relació s'escriu com

$$\left(\frac{\Delta U_0}{\Delta U_c}\right)^2 = M_1 \left[\frac{x}{H} + M_2\right] \quad (4.4)$$

on  $\Delta U_0$  és l'excés de velocitat a la sortida del doll i  $\Delta U_c$  és l'excés de velocitat a la posició  $x/H$ . Les simulacions realitzades prediuen uns valors  $M_1 = 0.243$  i  $M_2 = -6.07$ . La taula 4.6 confirma que existeix una gran variació en els valors donats a aquestes variables en els diferents estudis realitzats. No obstant, els valors trobats en aquest treball són similars als proposats per altres autors.

El gràfic 4.84 mostra els resultats obtinguts per la velocitat mitjana. Tal i com

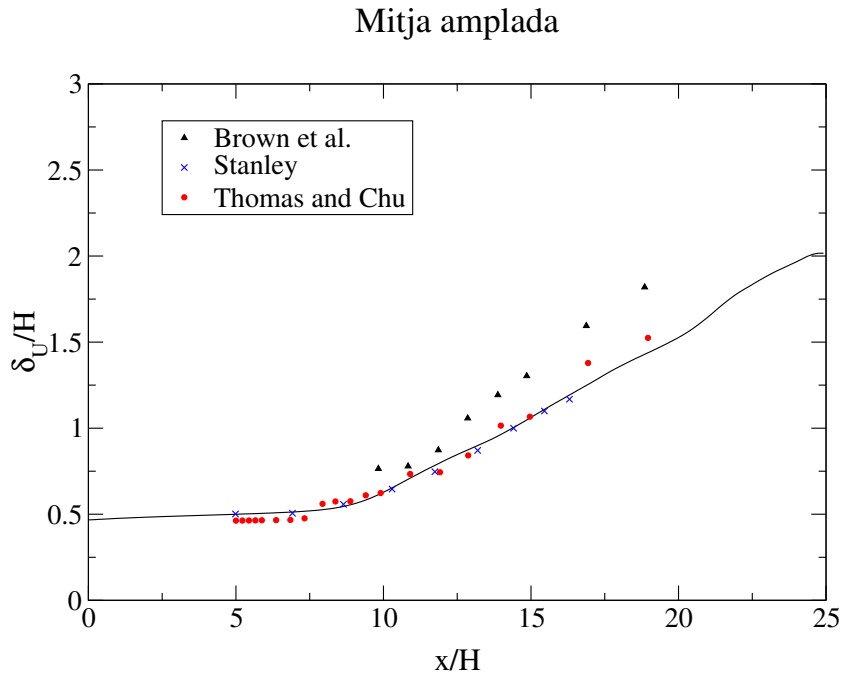


Figura 4.82: Mitja amplada del doll

prediu la teoria d'auto-similitud, els perfils de velocitat normalitzada amb la velocitat al centre col·lapsen quan la distància al centre del doll està normalitzada per la mitja amplada.

Donat el caràcter turbulent del doll, el temps de simulació necessari per obtenir les dades mitjanes convergides és excessivament alt. Aquest fet es fa més notable en el cas de la velocitat transversal on els valors són petits i les fluctuacions són altes. Per poder amitjanar amb més dades, suposarem certa la hipòtesi de simetria al doll pla respecte la línia central.

A la gràfica 4.85 es mostren els perfils de la component transversal de la velocitat. Observem que aproximen amb gran exactitud els valors de la simulació directa realitzada per Stanley [68] i es localitzen en el rang comprés pels valors experimentals de Gutmark [27] i Ramaprian [28].

### Desviació estàndar

Les figures 4.86, 4.87 i 4.88 mostren els perfils de les desviacions estàndards de les components de la velocitat en la zona turbulenta. Els resultats es mostren comparats amb els valors obtinguts als experiments realitzats per Gutmark [27] a

## Decaïment de la velocitat mitjana

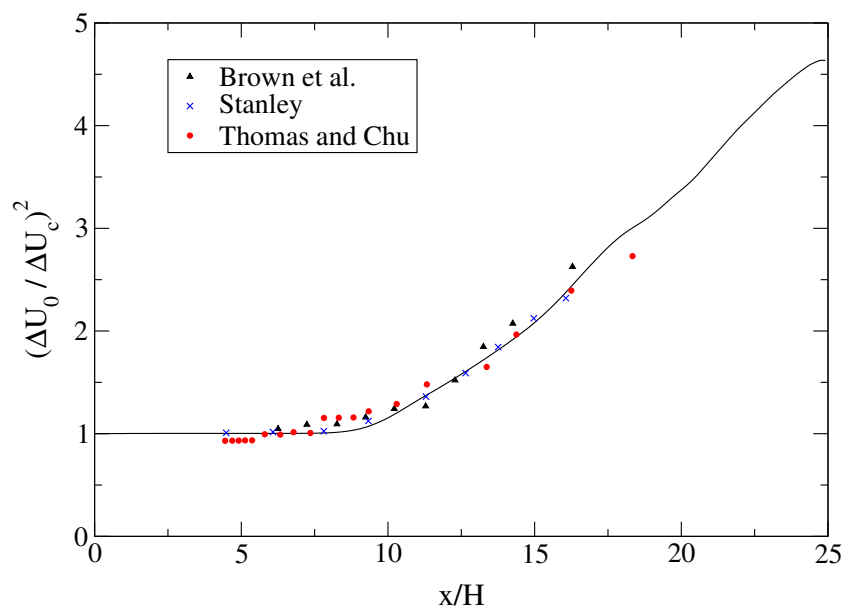


Figura 4.83: Decaïment de la velocitat mitja del doll

## Velocitat longitudinal mitjana

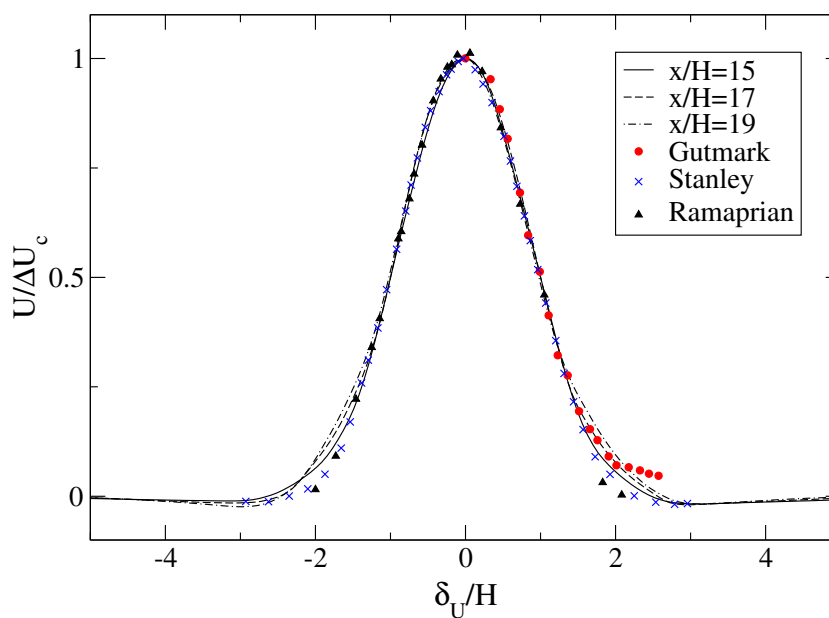


Figura 4.84: Component u de la velocitat mitjana

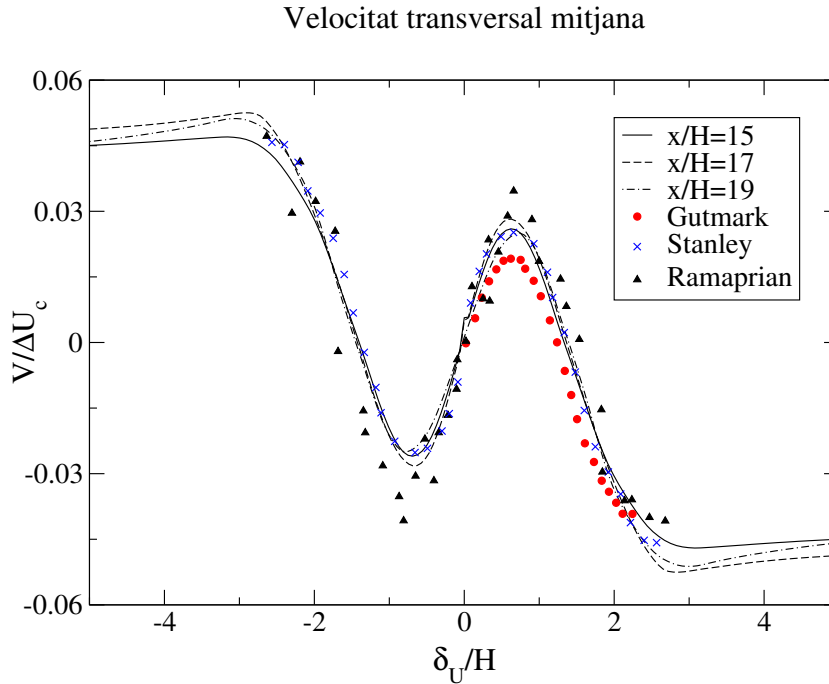


Figura 4.85: Component  $v$  de la velocitat mitjana

Reynolds 30000. S'observa que existeixen algunes discrepàncies, principalment per la segona component de la velocitat. En general, els valors obtinguts són superiors als experimentals.

Tal i com comenten Tennekes i Lumley [101] les velocitats mitjanes assoleixen el perfil d'auto-similitud a menor distància que les desviacions estàndards. Aquest autor afirma que als dolls les desviacions estàndards necessiten una distància superior a 40 diàmetres respecte l'origen per poder seguir el perfil d'autosimilitud. En el nostre cas, els perfils dibuixats són a menys de la meitat d'aquesta distància. Això podria explicar les diferències que s'observen.

A més, l'existència de recirculacions grans i baixes freqüències a causa de la proximitat a l'entrada justifica el gran valor de la desviació estàndard per la velocitat transversal. La presència d'estructures grans força a aquesta component a oscil·lar al voltant del valor mig amb una desviació superior. Aquest fet també explica perquè la desviació estàndard de la component longitudinal és més gran al centre del domini.

El tensor de Reynolds,  $R_{uv}$ , es mostra a la figura 4.89. En aquest cas, es compara el valor amb els resultats experimentals de Ramaprian [28] i Gutmark [27] i la

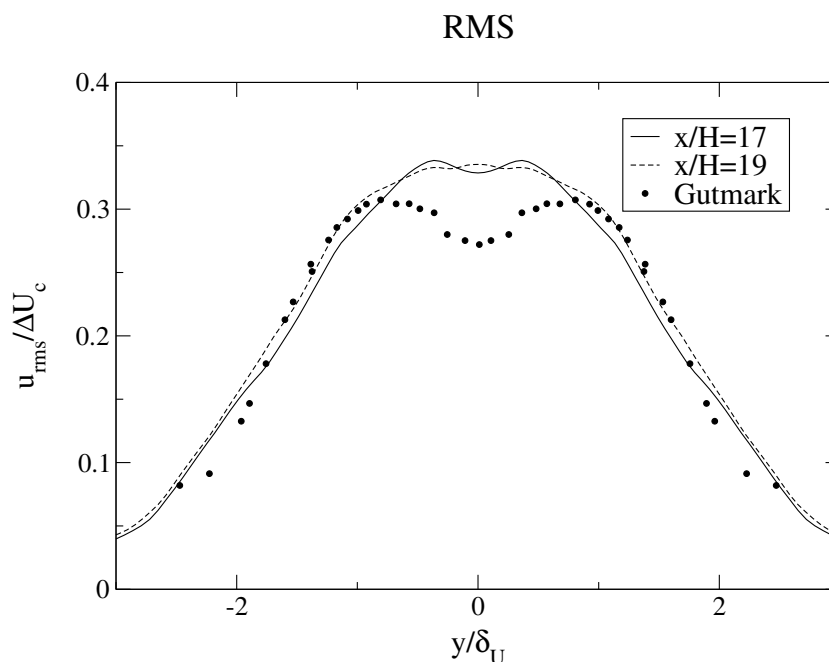


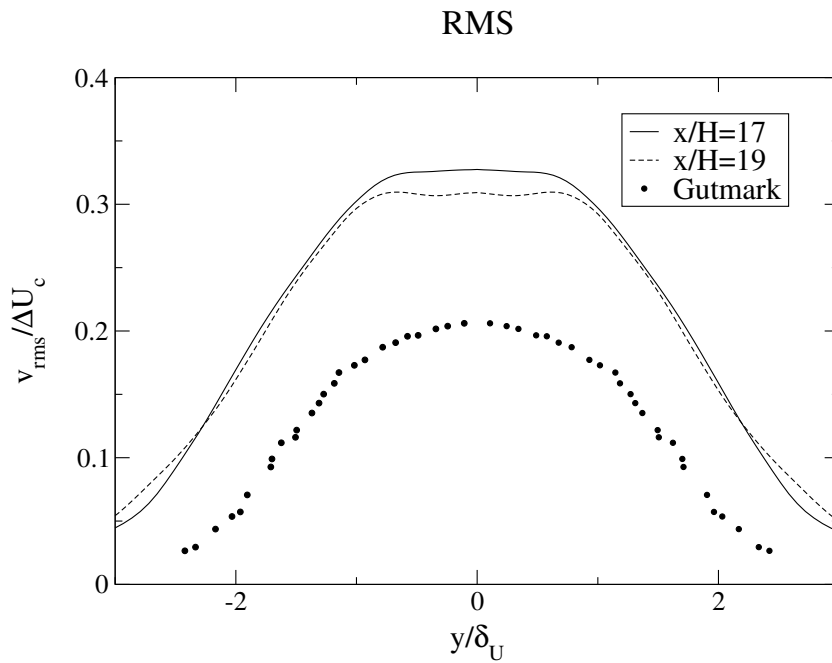
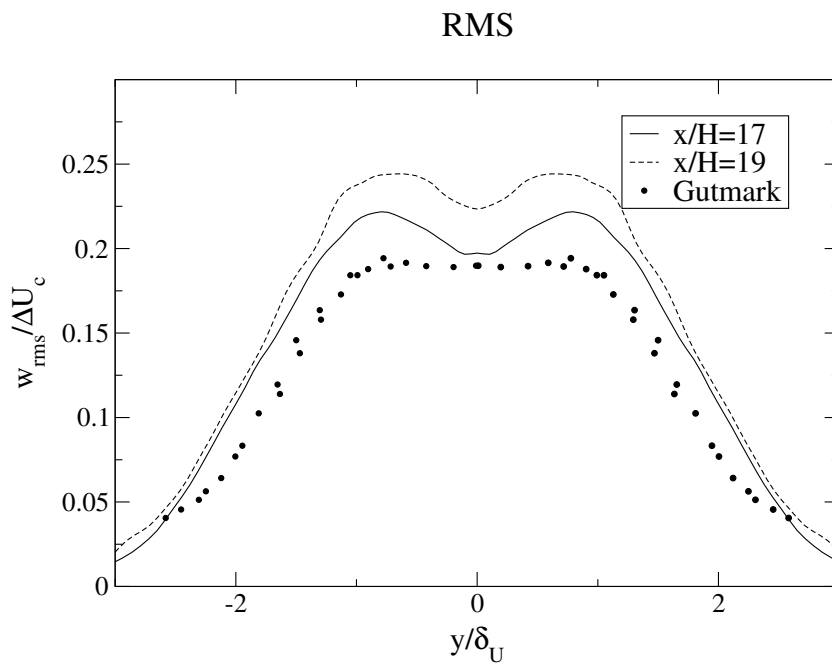
Figura 4.86: Desviació estàndard de la component u de la velocitat

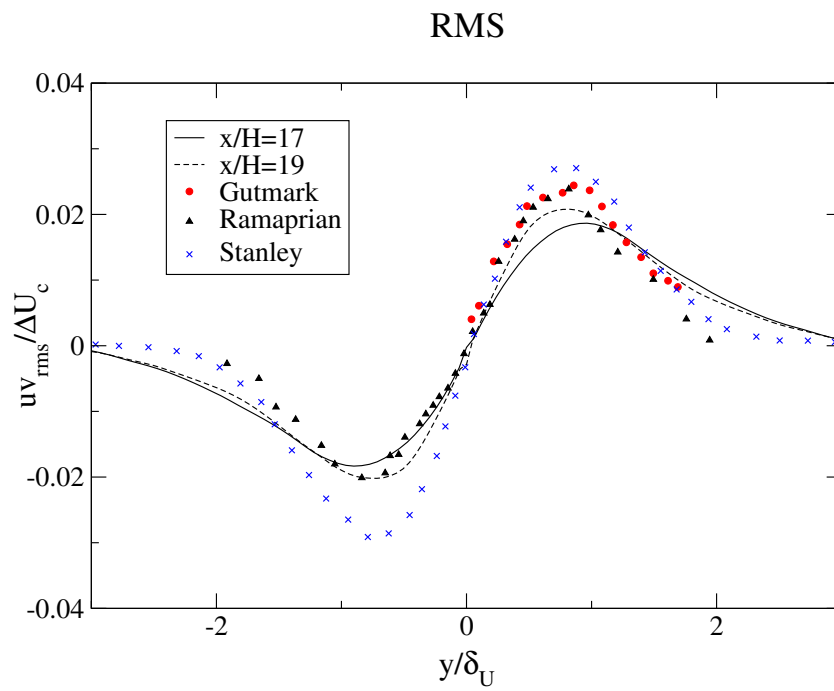
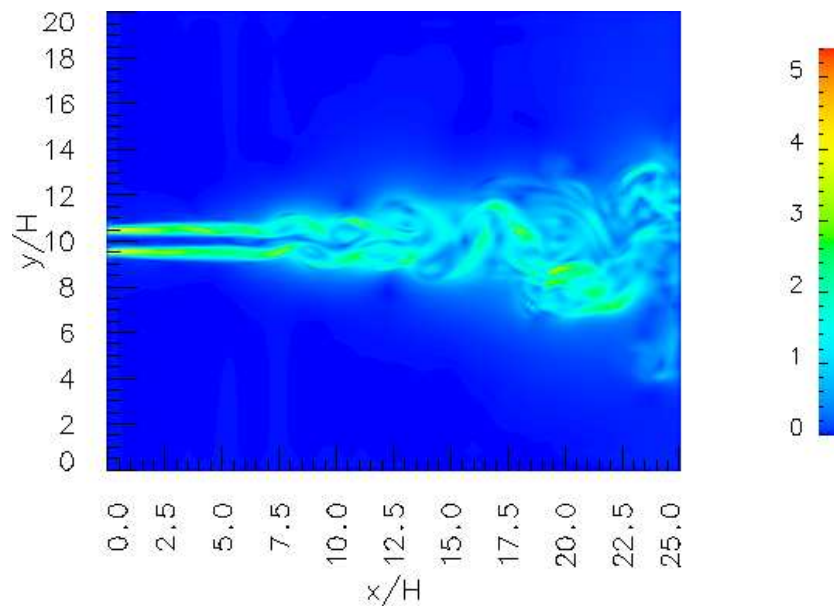
simulació directa de Stanley [68]. La localització dels punts màxim i mínim es troba a  $y/\delta_U = \pm 0.75$  i concorda amb les dades dels treballs anteriors. Les diferències més notables es troben en el decaïment del tensor a mesura que s'allunya del centre. En l'estudi numèric realitzat el decaïment és més suau. Aquest fet confirmaria la hipòtesi anterior de l'existència d'estructures grans a causa de la proximitat a l'entrada del domini.

### Viscositat turbulenta

La figura 4.90 mostra la viscositat turbulenta instantània calculada amb el model de grans escales de Smagorinsky. Observem que la major contribució es troba a la zona turbulenta, on es modelitza l'efecte de les petites escales. En aquesta regió, aquesta variable arriba a valors 5 vegades superiors a la viscositat cinemàtica.

A la gràfica també s'observa uns valors alts per la difusió turbulenta en la regió inicial introduïts pel model de Smagorinsky. Aquest fet influeix principalment en el retard del desenvolupament del doll ja que les inestabilitats artificials aplicades a l'entrada són esmoreïdes per la difusió turbulenta afegida pel model.

Figura 4.87: Desviació estàndard de la component  $v$  de la velocitatFigura 4.88: Desviació estàndard de la component  $w$  de la velocitat

Figura 4.89: Tensor de Reynolds  $uv$ Figura 4.90: Viscositat turbulenta instantània al pla  $z=2H$  normalitzada per la viscositat cinemàtica

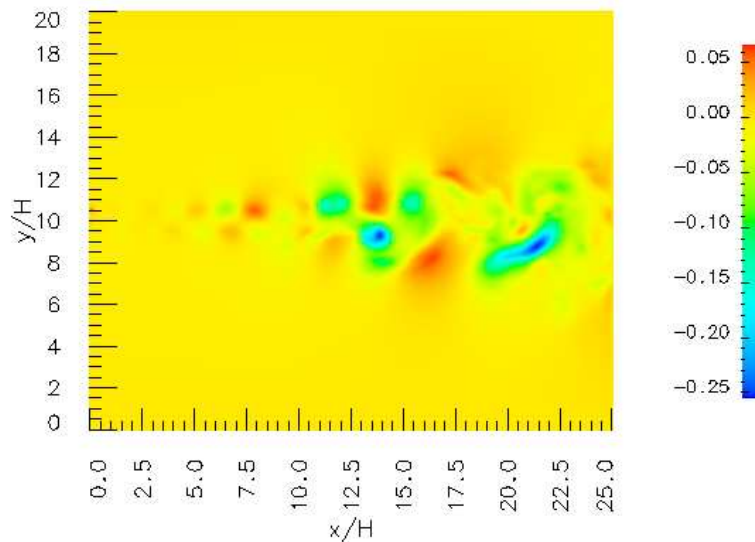


Figura 4.91: Camp instantani de pressions al pla  $z/H=2$  a  $t=400$

### Efectes de les condicions de contorn

El camp instantani de pressió de la figura 4.91 mostra amb claredat com les condicions de contorn implementades per la sortida del flux no provoquen cap tipus de xoc ni ona cap a l'interior del domini. A més, es pot observar que el mínims de pressió de la zona propera ( $3H-9H$ ) demostren que la inestabilitat característica d'aquest doll és l'alternada, tal i com s'ha comentat amb anterioritat.

A l'última regió del domini computacional, les partícules que s'incorporen pels contorns laterals experimenten un recorregut molt curt. Aquesta trajectòria tan curta provoca que la velocitat transversal sigui lleugerament inferior al valor desitjat en aquesta zona. No obstant, la influència d'aquesta divergència en els resultats és mínima.



### 4.3.2 Camp de temperatura

Al doll pla tridimensional també s'ha analitzat numèricament el transport d'energia. Sota les condicions considerades, les equacions pel transport d'energia coincideixen amb les del transport d'un escalar passiu. A la bibliografia s'hi troben alguns treballs que han estudiat el transport de matèria sense reacció en dolls turbulents, tant experimentalment com numèricament. Ramaprian i Chandrasekhara [28], Jenkins i Goldschmidt [35] i Davies, Keffer i Baines [36] estudiaren experimentalment dolls calents en aire i en aigua. El treball numèric de Stanley [68] realitzà una simulació directa per calcular el transport d'un escalar passiu en aquesta configuració.

A la figura 4.92 es mostra el perfil de temperatura mitjana en la zona d'autosimilitud. S'observa que els resultats obtinguts reproduïen correctament els perfils de la bibliografia, amb una petita discrepància a la zona més llunyana de les capes de tall.

Els perfils d'autosimilitud no mostren els efectes de la barreja que es produeix aigües avall. Per tal de diferenciar amb més claredat la dispersió de temperatura la figura 4.93 mostra l'evolució de la mitja amplada (punt on la temperatura mitjana pren un valor igual a la meitat de la temperatura del centre del doll). Igual que al cas de la velocitat, la mitja amplada en funció de la temperatura presenta una linealitat amb la distància a l'origen:

$$\frac{\delta_T}{H} = K_{1T} \left[ \frac{x}{H} + K_{2T} \right] \quad (4.5)$$

S'observa a la gràfica que en l'estudi portat a terme la linealitat s'inicia a una distància  $10H$  de l'origen. Al cas de la mitja amplada calculada a partir de la velocitat mitjana, aquesta distància era menor. A la taula 4.7 es presenten els valors obtinguts per  $K_{1T}$  i  $K_{2T}$  i es compara amb altres estudis. El valor del pendent obtingut en aquest treball es troba dins del rang dels treballs experimentals. Per l'origen virtual definit per la variable  $K_{2T}$  s'ha obtingut un valor superior a causa de la distància necessària pel desenvolupament del doll.

A la figura 4.94 es mostra el decaïment de la temperatura mitjana al centre del doll. Igual que al cas del decaïment de la velocitat, el perfil segueix una potència  $-1/2$  que es pot expressar com

Autor	$K_{1T}$	$K_{2T}$	$M_{1T}$	$M_{2T}$
Treball present	0.158	-4.00	0.346	-4.52
Ramaprian [28]	0.167	2.00	0.194	6.00
Browne [99]	0.128	5.00	0.189	7.86
Jenkins [35]	0.123	0.090	0.261	-5.62
Davies [36]	0.115	2.05	0.258	0.920
Stanley [68]	0.128	-0.465	0.280	-1.71

Taula 4.7: Dades del creixement de la mitja amplada i el decaïment de la temperatura al centre del doll. Resultats d'aquest treball, d'estudis experimentals i de simulació directa.

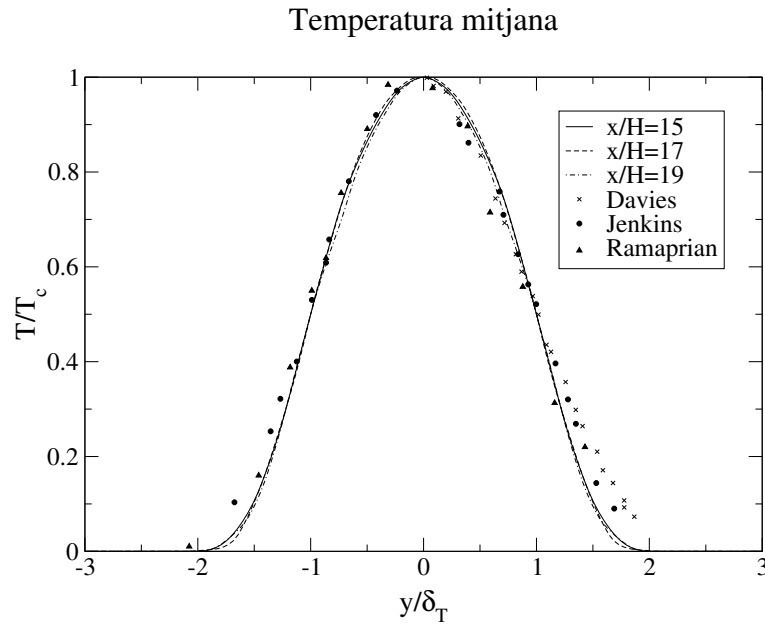


Figura 4.92: Perfils de temperatura mitjana

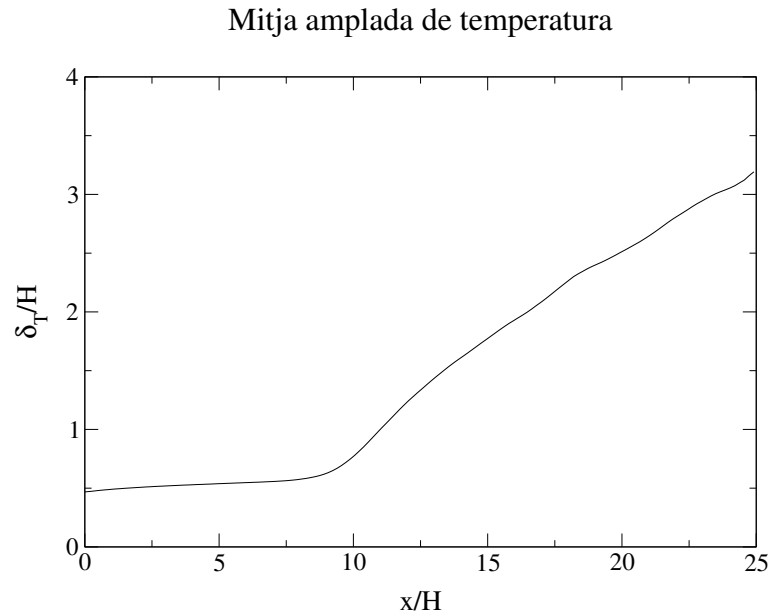


Figura 4.93: Mitja amplada del doll en funció de la temperatura

$$\left(\frac{T_0}{T_c}\right)^2 = M_{1T} \left[\frac{x}{H} + M_{2T}\right] \quad (4.6)$$

A la taula 4.7 es presenten els valors obtinguts. En aquest cas el decaïment de la temperatura és lleugerament més lent que en treballs previs, obtenint un valor superior per la variable  $M_{2T}$ . Aquesta diferència és a causa de la proximitat a l'origen i la necessitat d'un domini computacional més gran per analitzar correctament la zona d'autosimilitud.

A la figura 4.95 es mostra la desviació estàndard de la temperatura al doll. S'observa que els diferents estudis previs varien substancialment entre ells. El perfil obtingut presenta dos màxims localitzats a  $y = \delta_T$  i  $y = -\delta_T$  i un mínim al centre del doll. Per tant, a la regió turbulenta les oscil·lacions principals de la temperatura es produeixen sobre els punts que defineixen la mitja amplada.

## Decaïment de la temperatura mitjana

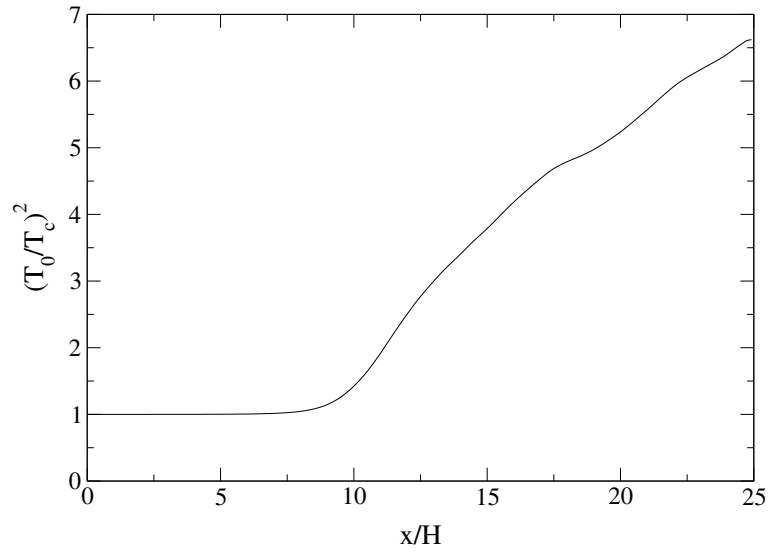


Figura 4.94: Decaïment de la temperatura mitja al doll

## RMS

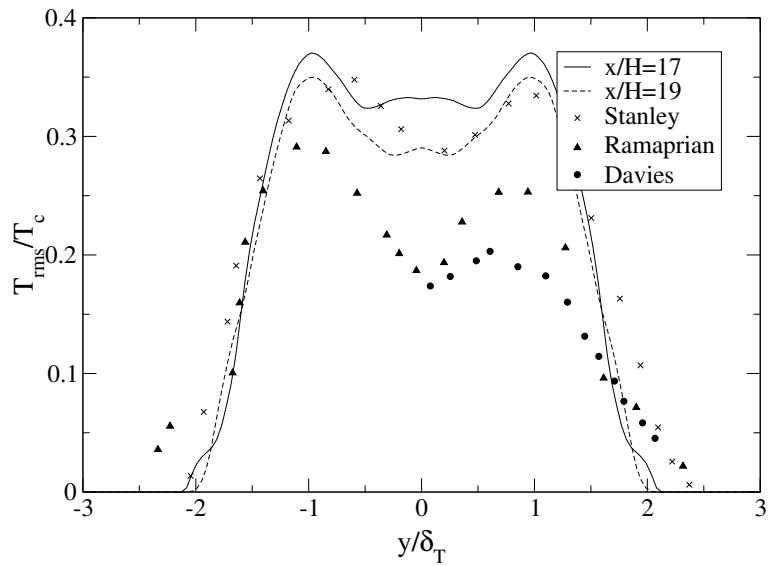


Figura 4.95: Desviació estàndard de la temperatura al doll

### 4.3.3 Camp reactiu

Existeix un gran interès pels processos de transport i mescla en fluxos turbulents amb capes de barreja per la seva importància en la propagació de contaminants en fluxos mediambientals. En aquests casos, la influència de la turbulència és decisiva ja que les petites escales augmenten la barreja.

En aquest treball, s'ha analitzat el transport de matèria amb reacció  $A + B \rightarrow P$  al doll pla tridimensional turbulent. Igual que al segon disseny factorial del cas bidimensional, suposarem que no existeix premescla i que el reactiu A entra al domini pel flux principal, mentre que B ho fa pel secundari. El número de Schmidt escollit és 1.0 i el Damköhler 0.01.

La figura 4.96 mostra el camp de concentracions instantani del producte de la reacció a un pla central al doll. S'observa com inicialment l'espècie química P es forma només a la regió de les capes de barreja. Un cop s'inicia la zona turbulenta, la mescla de A i B es torna molt més important i augmenta la concentració del producte.

El camp de concentració de P sobre la capa de barreja es mostra a la figura 4.97. Per facilitar la visualització, s'ha repetit el camp en la direcció periòdica. La sinuositat del flux fins gairebé la meitat del domini i les grans estructures formades a prop de l'entrada provoquen l'alternança de regions amb mínims i màxims de concentració en aquest camp. Així per exemple, a  $x/H = 12$  decreix la concentració mentre que a  $x/H = 8$  i  $13$  aquesta augmenta.

A la figura 4.98 es presenten els perfils mitjans de concentració per l'espècie química A. S'observa que fins a una distància de 10 diàmetres el perfil no sofreix cap canvi significatiu. A partir d'aquest punt, la regió turbulenta provoca una ràpida dispersió del reactiu i disminueix la concentració al centre. En comparació amb les simulacions bidimensionals realitzades on la dispersió estava produïda per l'aparició de les estructures, el cas turbulent mostra un perfil més ample, ocupant més regió del domini.

El canvi de règim al flux a  $x/H=10$  es fa notable en la gràfica de conversió (figura 4.99). El pendent de la corba varia significativament passat aquest punt, augmentant el creixement de la conversió. Prop del final del domini computacional, la conversió obtinguda supera el 15%.

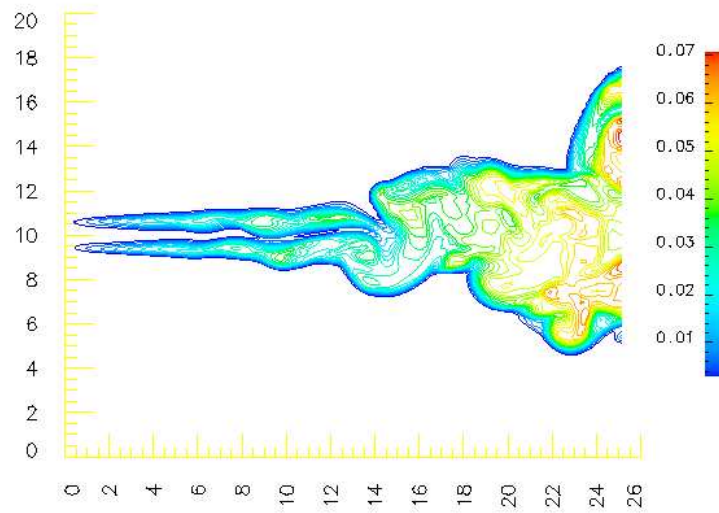


Figura 4.96: Concentració instantània de l'espècie química P al pla  $z/H=2$  a temps  $t=400$

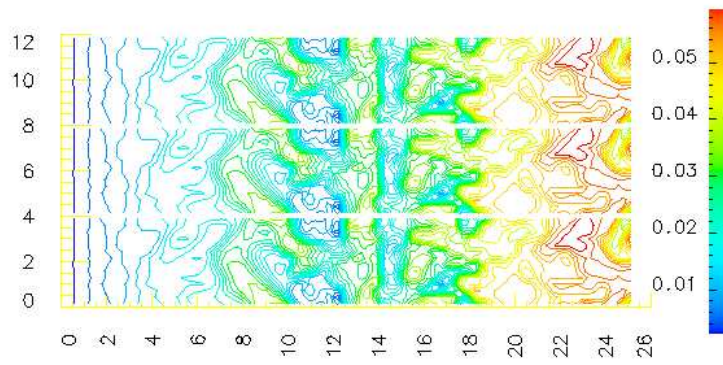


Figura 4.97: Concentració instantània de l'espècie química P al pla  $y/H=9.5$  a temps  $t=400$

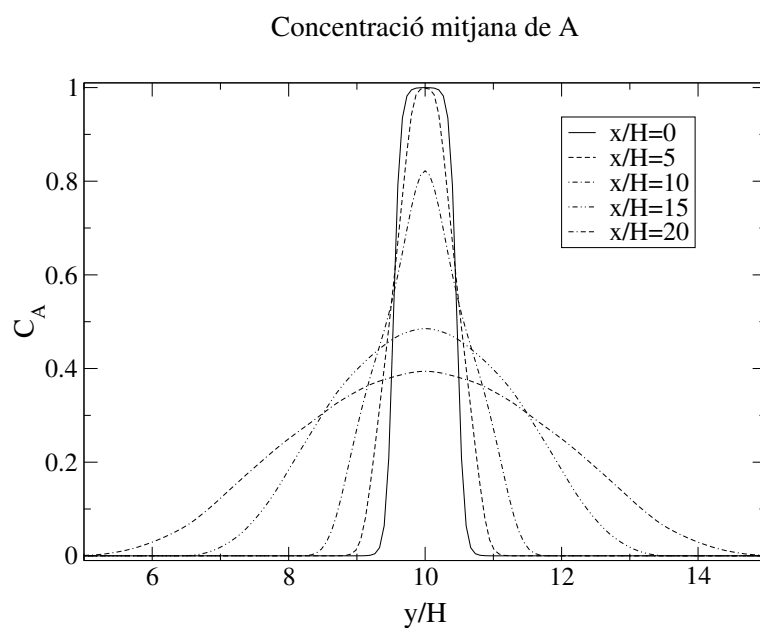


Figura 4.98: Concentració mitjana de A a diferents distàncies de l'origen.

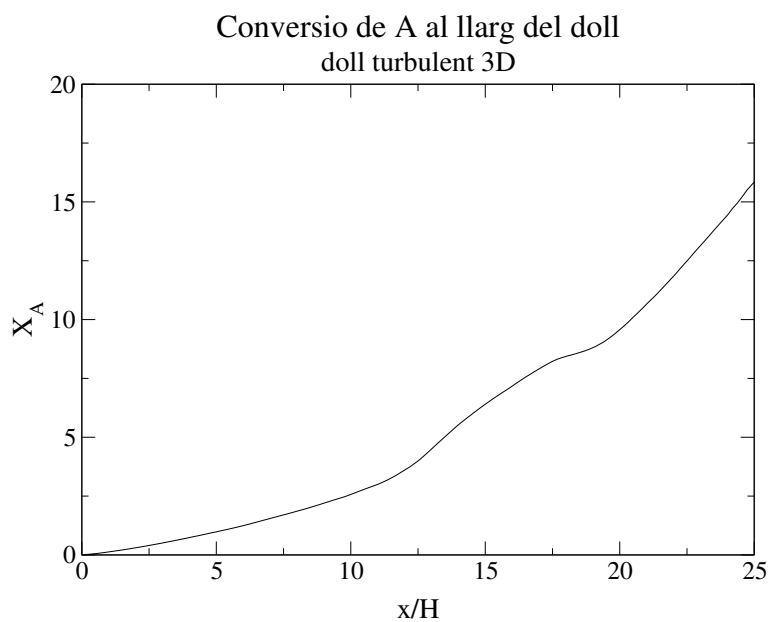


Figura 4.99: Conversió de l'espècie química A al llarg del doll





# Capítol 5

## Conclusions

Al llarg de tot aquest treball s'ha estudiat la influència de les estructures coherents del flux d'un doll pla sobre un sistema reactiu  $A + B \rightarrow P$ . L'anàlisi numèrica s'ha realitzat amb un nou codi de computació paral·lela desenvolupat en Fortran 90 sota la interfície d'intercanvi de missatges MPI. Aquest programari informàtic resol numèricament les equacions de transport de quantitat de moviment, energia i matèria en un domini computacional estructurat, rectangular i obert.

Les equacions s'han discretitzat utilitzant esquemes de segon ordre. Per eliminar inestabilitats i falses oscil·lacions produïdes pel transport altament convectiu dels forts gradients de temperatura i matèria s'ha implementat l'esquema ULTIMATE de Leonard.

Les condicions de contorn implementades permeten estudiar un domini completament obert, ja que faciliten la incorporació de fluid extern i la sortida de les estructures coherents a fora del domini.

El codi ha estat paral·lelitzat per poder executar-se en màquines multicomputadores. El domini computacional es divideix entre els processadors i cadascun resol les equacions discretitzades sobre els nodes d'una regió determinada. L'intercanvi de dades entre els diferents processadors es realitza mitjançant les comandes de la llibreria MPI. Els resultats demostren que hi ha una gran millora en el temps de càlcul i que es pot aconseguir una bona eficiència si es compara amb un codi seqüencial optimitzat.

Inicialment el codi ha estat validat realitzant càlculs de fluxos ben documentats a la bibliografia, com són el flux de Couette i el flux en una cavitat cúbica generat per una paret mòbil. La coherència dels resultats comparats amb les solucions

analítiques o de treballs previs demostra el correcte funcionament del codi i la validesa dels seus resultats.

En una primera etapa, s'ha simulat un doll pla dèbil bidimensional laminar a Reynolds 7000 afegint diferents pertorbacions artificials al seu perfil de velocitats a l'entrada. Sota aquestes condicions, dins del domini de càlcul el doll és periòdic en el temps i amb grans recirculacions que es desplacen en la direcció principal. El valor alt de la velocitat del flux secundari permet centrar l'estudi en la regió de règim laminar i de transició, ja que el doll es desenvolupa més lentament. En aquest cas, s'han estudiat els efectes que aquestes inestabilitats simètriques i alternades sobre les capes de barreja provoquen en l'estructura del flux. S'ha demostrat que les pertorbacions aplicades, a més de determinar el flux a l'origen, fixen la posterior evolució del doll, així com les seves propietats corrent avall.

Analitzant l'evolució al llarg del temps de les velocitats en un punt del domini, s'ha determinat les freqüències característiques del flux. Per un doll pla sense pertorbacions, la freqüència adimensional natural obtinguda ha estat de 1.18. En el cas de dolls amb pertorbacions a Strouhal 0.5, s'ha comprovat l'aparició de noves estructures amb freqüència doble de l'aplicada.

El control aconseguït sobre el camp de velocitats mitjançant les inestabilitats artificials s'ha aplicat a un doll pla dèbil amb transport de matèria i reacció. Amb les simulacions realitzades, s'ha analitzat els efectes de la freqüència de la pertorbació, de la velocitat de la reacció i del coeficient de difusió molecular de les espècies químiques en casos amb i sense premescla dels reactius. Els resultats conclouen que determinades inestabilitats artificials afavoreixen el consum dels reactius, aconseguint una major conversió en menys domini. Els càlculs mostren que la pertorbació a Strouhal 1.5 afavoreix un ràpid augment de la concentració de l'espècie resultant prop de l'entrada, mentre que Strouhal 0.5 mostra una conversió més baixa als primers diàmetres. No obstant, amb l'aparició dels vòrtexs, la mescla de les espècies químiques millora considerablement a aquesta freqüència més baixa, presentant una tendència creixent. També s'ha comprovat que la variació de la difusió molecular no afecta al sistema ja que aquest està fortament governat pel transport convectiu.

S'ha demostrat que en les condicions estudiades el doll dèbil és molt més eficaç com a reactor si es pertorba artificialment el seu perfil de velocitat inicial que no pas si es deixa evolucionar lliurement. La diferència en la conversió per la regió estudiada pot arribar a ser del 50%.

Implementant al codi la tècnica de simulació de grans escales amb el model de

Smagorinsky, s'ha estudiat un doll pla fort tridimensional, turbulent i reactiu a Reynolds 3000. La velocitat del flux secundari en els doll forts és d'ordre inferior a la velocitat del doll i per tant es pot suposar que la seva influència és mínima sobre els resultats i que aquests són similars als d'un doll sense flux co-corrent. En les condicions estudiades, el doll presenta dues zones ben diferenciades: una regió de desenvolupament i inestabilització i una regió turbulenta lluny de l'entrada. Els resultats obtinguts pel camp dinàmic en aquest cas presenten bona concordança amb els experimentals disponibles a la bibliografia. El decaïment de la velocitat mitjana al centre i el creixement de la mitja amplada segueixen els perfils lineals determinats per l'anàlisi d'autosimilitud. Els perfils de velocitat mitjana coincideixen amb els obtinguts en treballs experimentals previs. Als valors de les desviacions estàndards es troba alguna discrepància produïda principalment per la limitació de la longitud del domini. A les distàncies estudiades aquestes variables encara estan influenciades per les grans estructures de la regió de transició. El gran nombre d'estructures tridimensionals existents al camp instantani en la regió turbulenta es fa evident en els gràfics de vorticitat. L'anàlisi dels perfils de concentració de les espècies químiques mostra un influència clara de les dues zones existents. Mentre que a la regió de desenvolupament la reacció es produeix principalment a les capes de barreja, la zona turbulenta augmenta la dispersió i mescla dels contaminants. Aquesta millora influeix en la conversió de les espècies químiques incrementant l'eficàcia del doll com a reactor.



## Capítol 6

### Treball futur i recomanacions

En aquest treball s'ha analitzat numèricament un número limitat dels paràmetres que intervenen a l'evolució del doll reactiu. El treball es podria continuar estudiant altres variables que aportarien més informació de la influència de l'estructura del flux sobre el sistema reactiu. Així per exemple, es podria analitzar amb més exactitud els efectes de l'amplitud de la pertorbació aplicada a l'entrada del doll, la influència d'introduir a la velocitat de reacció una funcionalitat respecte la temperatura o els efectes de la variació del número de Reynolds.

Amb el nou codi de simulació desenvolupat s'ha aconseguit una eina de càlcul potent, eficaç i flexible per futures línies de recerca en l'àmbit de la mecànica de fluids computacional. No obstant, aquest codi necessita més esforç per continuar millorant i ampliant-se per tal de poder simular altres geometries i condicions.

Algunes de les millores que es podrien realitzar són:

- Afegir nous models de Large Eddy Simulation que poden millorar els resultats de Smagorinsky en determinades situacions, com per exemple, el cas d'existència de parets físiques als contorns del domini.
- Implementar les equacions de fluid compressible, que facilitarien les simulacions on s'introdueixen pertorbacions.
- Introduir algorismes *multigrid*, que estalviarien gran part del temps computacional necessari per la resolució de l'equació de Poisson.
- Resoldre les equacions discretitzades amb esquemes implícits, reduint el temps de computació en la integració temporal.

- Canviar la resolució de l'equació de Poisson per un mètode més paral·lelitzable. D'aquesta manera s'eliminarà el coll d'ampolla existent que impedeix millorar l'eficiència.

La implementació d'aquests millores estendria l'aplicabilitat i funcionalitat del codi.

# Bibliografia

- [1] J.E. Martin i E. Meiburg. Numerical investigation of three-dimensionally evolving jets subject to axisymmetric and azimuthal perturbations. *Journal of fluid mechanics*, 230:271–318, 1991.
- [2] C. Tong i Z. Warhaft. Passive scalar dispersion and mixing in a turbulent jet. *Physics of fluids A*, 292:1–38, 1995.
- [3] P. Brancher, J.M Chomaz i P. Huerre. Direct numerical simulation of round jets: vortex induction and side jets. *Physics of fluids*, 6(5):1768–1774, 1994.
- [4] M. Fatica, R. Verzicco i P. Orlandi. Rib vortices in round jets: direct and large eddy simulation. Dins *Applications of direct and large eddy simulation to transition and turbulence*, pàgines 27.1–27.10. Advisory Group for Aerospace Research and Development, 1994.
- [5] F.F. Grinstein, E.J. Gutmark, T.P. Parr, D.M. Hanson-Parr i U. Obey-sekare. Streamwise and spanwise vortex interaction in an axisymmetric jet. a computational and experimental study. *Physic of fluids*, 8(6):1515–1524, 1996.
- [6] M. Olsson i L. Fuchs. Large eddy simulation of the proximal region of a spatially developing circular jet. *Physic of fluids*, 8(8):2125–2137, 1996.
- [7] G. Urbin, C. Brun i O. Métais. Large eddy simulation of three-dimensional spatially evolving round jets. Dins *Proceedings Eleventh Symposium on Turbulent Shear Flows*, volum 3, pàgines 25.23–25.28. Grenoble, France, 1997.
- [8] B.J. Boersma, B. Brethouwer i F.T.M. Nieuwstadt. A numerical investigation on the effect onf the inflow conditions on the self-similar region of a round jet. *Physics of fluids*, 10(4):899–909, 1998.

- [9] J.C. Hermanson i B.M. Cetegen. Shock-induced mixing of nonhomogeneous density turbulent jets. *Physics of fluids*, 12(5):1210–1225, 2000.
- [10] A. Hilgers i B.J. Boersma. Optimization of turbulent jet mixing. *Fluid dynamics research*, 29:345–368, 2001.
- [11] W.C. Reynolds, D.E. Parekh, P.J.D. Juvet i M.J.D. Lee. Bifurcating and blooming jets. *Annual reviews of fluid mechanics*, 35:295–315, 2003.
- [12] G. Hoffmann i C. Benocci. Numerical simulation of spatially-developing planar jets. Dins *Applications of direct and large eddy simulation to transition and turbulence*, pàgines 26.1–26.6. Advisory Group for Aerospace Research and Development, 1994.
- [13] S.V. Alekseenko, A.V. Bilsky, D.M. Markovich i V.I. Semenov. Sensitivity of impinging turbulent jets to the external disturbances. Dins *Proceedings Eleventh Symposium on Turbulent Shear Flows*, volum 2, pàgines 22.18–22.23. Grenoble, France, 1997.
- [14] M. Qi, Z. Chen i R. Fu. Flow structure of the plane turbulent impinging jet in cross flow. *Journal of hydraulic research*, 39(2):155–161, 2001.
- [15] W.R. Quinn i J. Militzer. Experimental and numerical study of a turbulent free square jet. *Physics of fluids*, 31(5):1017–1025, 1988.
- [16] R.S. Miller, C.K. Madnia i P. Givi. Numerical simulation of non-circular jets. *Computer and fluids*, 24(1):1–25, 1995.
- [17] F.F. Grinstein i C.R. DeVore. Dynamics of coherent structures and transition to turbulence in free square jets. *Physics of fluids*, 8(5):1237–1251, 1996.
- [18] R.V. Wilson i A.O. Demuren. Numerical simulation of turbulent jets with rectangular cross-section. *Journal of fluids engineering*, 120:285–290, 1998.
- [19] E.J. Gutmark i F.F. Grinstein. Flow control with noncircular jets. *Annual reviews of fluid mechanics*, 31:239–272, 1999.
- [20] F.F. Grinstein. Vortex dynamics and entrainment in rectangular free jets. *Journal of fluids mechanics*, 437:69–101, 2001.



- [21] W.P. Jones i M. Wille. Large-eddy simulation of a plane jet in a cross-flow. *International journal of heat and fluid flow*, 17(3):296–306, 1996.
- [22] L.L. Yuan i R.L. Street. Trajectory and entrainment of a round jet in cross-flow. *Physics of fluids*, 10(9):2323–2335, 1998.
- [23] Y.B. Albertson, Y.B. Dai, R.A. Jenson i H. House. Diffusion of submerged jets. *Transactions- American Society of Civil Engineering*, 115:639–664, 1950.
- [24] D.R. Miller i E.W. Comings. Static pressure distributions in the free turbulent jet. *Journal of Fluid Mechanics*, 3:1–16, 1957.
- [25] L.J.S. Bradbury. The structure of a self-preserving turbulent plane jet. *Journal of Fluid Mechanics*, 21(1):31–64, 1965.
- [26] G. Heskestad. Hot-wire measurements in a plane turbulent jet. *Journal of Applied Mechanics*, 32(4):721–734, 1965.
- [27] E. Gutmark i I. Wygnanski. The planar turbulent jet. *Journal of Fluid Mechanics*, 73(3):465–495, 1976.
- [28] B.R. Ramaprian i M.S. Chandrasekhara. Lda measurements in plane turbulent jets. *ASME journal of fluids engineering*, 107:264–271, 1985.
- [29] L.J.S. Bradbury i J. Riley. The spread of a turbulent jet issuing into a parallel moving airstream. *Journal of Fluid Mechanics*, 27(2):381–394, 1967.
- [30] K.W. Everitt i A.G. Robins. The development and structure of turbulent plane jets. *Journal of Fluid Mechanics*, 88(3):563–583, 1978.
- [31] J.C. LaRue, T. Ly, H. Rahai i P.Y. Jan. On similarity of a plane turbulent jet in a co-flowing stream. Dins *Proceedings Eleventh Symposium on Turbulent Shear Flows*, volum 3, pàgines 25.11–25.16. Grenoble, France, 1997.
- [32] J. Bashir i M.S. Uberoi. Experiments on turbulent structure and heat transfer in a two-dimensional jet. *Physics of Fluids*, 18(4):405–410, 1975.
- [33] N.E. Kotsovinos. Plane turbulent bouyant jets. part2. turbulence structure. *Journal of Fluid Mechanics*, 81(1):45–62, 1977.

- [34] N.E. Kotsovinos i E.J. List. Plane turbulent bouyant jets. part1. integral properties. *Journal of Fluid Mechanics*, 81(1):25–44, 1977.
- [35] P.E. Jenkins i V.W. Goldschmidt. Mean temperature and velocity in a plane turbulent jet. *Journal of Fluid Engineering*, 95(4):581–584, 1973.
- [36] A.E. Davies, J.F. Keffer i W.D. Bines. Spread of a heated plane turbulent jet. *Physics of fluids*, 18(7):770–775, 1975.
- [37] V.W. Goldschmidt i P. Bradsha. Flapping of a plane jet. *Physics of fluids*, 16(3):354–355, 1973.
- [38] J. Cervantes de Gortari i V.W. Goldschmidt. The apparent flapping motion of a turbulent plane jet - further experimental results. *Journal of fluid engineering*, 103(1):119–126, 1981.
- [39] J.W Oler i V.W. Goldschmidt. A vortex-street model of the flow in the similarity region of a two-dimensional free turbulent jet. *Journal of fluid mechanics*, 123:523–535, 1982.
- [40] J.C. Mumford. The structure of the large eddies in flully developed turbulent shear flows. part 1: The plane jet. *Journal of fluid mechanics*, 118:241–268, 1982.
- [41] R.A. Antonia, L.W.B. Browne, S. Rajagopalan i A.J. Chambers. On the organized motion of a turbulent plane jet. *Journal of fluid mechanics*, 134:49–66, 1983.
- [42] V.W. Goldschmidt, M.K. Moallemi i J.W Oler. Structures and flow reversal in trubulent plane jets. *Physics of fluids*, 26(2):428–432, 1983.
- [43] H. Sato. The stability and transition of a two-dimensional jet. *Journal of fluid mechanics*, 7(1):53–80, 1960.
- [44] D.O. Rockwell i W.O. Niccolls. Natural breakdown of planar jets. *Transactions ASME: journal of basic engineering*, 1:720–730, 1972.
- [45] F.O. Thomas i V.W. Goldschmidt. Structural characteristics of a developing turbulent planar jet. *Journal of fluid mechanics*, 163:227–256, 1986.

- [46] F.O. Thomas i V.W. Goldschmidt. Acoustically induced enhancement of widening and fluctuation intensity in a two-dimensional turbulent jet. *ASME Journal of fluids engineering*, 108:331–337, 1986.
- [47] F.O. Thomas i H.C. Chu. An experimental investigation of the transition of a planar jet: subharmonic suppression and upstream feedback. *Physics of fluids A*, 1(9):1566–1587, 1989.
- [48] T. Peacock, V.M. Bright, Y-C Lee, J.R. Hertzbert i E. Bradley. Micro-active control of a planar jet. <http://citeseer.nj.nec.com/384014.html>.
- [49] G.P Lemieux i P.H Oosthuizen. Experimental study of the behaviour of plane turbulent jets at low reynolds number. *AIAA journal*, 23(12):1845–1846, 1985.
- [50] I. Namer i M.V. Ötügen. Velocity measurements in a plane turbulent air jet at moderate reynolds numbers. *Experiments in fluids*, 6:387–399, 1988.
- [51] J.M. Huang i F.B. Hsiao. On the mode development in the developing region of a plane jet. *Physics of fluids*, 1999.
- [52] D. Faghani, A. Sévrain i H.C. Boisson. Physical eddy recovery through bi-orthogonal decomposition in an acoustically forced plane jet. *Flow, turbulence and combustion*, 62:69–88, 1999.
- [53] S.V. Gordeyev i F.O. Thomas. Coherent structure in the turbulent planar jet. part 1. extraction of proper orthogonal decomposition eigenmodes and their self-similarity. *Journal of Fluid Mechanics*, 414:145–194, 2000.
- [54] S.V. Gordeyev i F.O. Thomas. Coherent structure in the turbulent planar jet. part 2. structural topology via pod eigenmode projection. *Journal of Fluid Mechanics*, 460:349–380, 2002.
- [55] P. Comte, M. Lesieur, H. Laroche i X. Normand. *Turbulent shear flows 6*, capítol Numerical simulations of turbulent plane shear layers, pàgines 361–380. 1989.
- [56] Y. Dai, T. Kobayashi i N. Taniguchi. Large eddy simulations of plane turbulent jet flow using a new outflow velocity boundary condition. *JSME international journal*, 37(2):242–253, 1994.

- [57] C. Weinberger, J. Rewerts i J. Janicka. The influence of inlet conditions on a large eddy simulations of a turbulent plane jet. Dins *Proceedings eleventh symposium on turbulent shear flows*, volum 3, pàgines 25.17–25.22. 1997.
- [58] R.S. Reichert i S. Biringen. Numerical simulation of compressible plane jets. *AIAA Paper 97-1924*, 1997.
- [59] F. Bastin, P. Lafon i S. Candel. Computation of jet mixing noise due to coherent structures: the plane jet case. *Journal of fluid mechanics*, 335:261–304, 1997.
- [60] L.I. Cerviño, T.R. Bewley, J.B. Freund i S.K. Lele. Perturbation and adjoint analyses of flow-acoustic interactions in an unsteady 2d jet. Dins *Proceedings of the Summer Program 2002*. Center for Turbulence Research, 2002.
- [61] S.H. Lo, P.R. Voke i N.J. Rockliff. Three-dimensional vortices of a spatially developing plane jet. *International journal of fluid dynamics*, 4, 2000.
- [62] C.B. da Silva i O. Métais. On the influence of coherent structures upon interscale interactions in turbulent plane jets. *Journal of fluid mechanics*, 473:103–145, 2002.
- [63] R. Akhavan, A. Ansari, S. Kang i N. Mangiavacchi. Subgrid-scale interactions in a numerically simulated planar turbulent jet and implications for modelling. *Journal of fluid mechanics*, 408:83–120, 2000.
- [64] C. Le Ribault, S. Sarkar i S.A. Stanley. Large eddy simulation of evolution of a passive scalar in plane jet. *AIAA journal*, 39(8):1509–1516, 2001.
- [65] S. Sarkar i S.A. Stanley. Influence of nozzle conditions and discrete forcing on turbulent planar jets. *AIAA journal*, 38(9):1615–1623, 2000.
- [66] C. Le Ribault, S. Sarkar i S.A. Stanley. Large eddy simulation of a plane jet. *Physics of fluids*, 11(10):3069–3083, 1999.
- [67] S. Sarkar i S.A. Stanley. Simulations of spatially developing two-dimensional shear layers and jets. *Theoretical computations in fluid dynamics*, 9:121–147, 1997.

- [68] S.A. Stanley. *Acomputational study of spatially evolving turbulent plane jets*. Tesi Doctoral, University of California, San Diego, 1998.
- [69] A. Nasr i J.C.S. Lai. Two parallel plane jets: mean flow and effects of acoustic excitation. *Experiments in fluids*, 22(3):251–260, 1997.
- [70] J.C.S. Lai i A. Nasr. *Laser techniques applied to fluid mechanics*, volum II.7, capítol Weakly interacting two parallel plane jets, pàgines 232–242. 2000.
- [71] M.F. Scibilia i J. Lain. Study of large-coherent structures in a plane wall jet. *Physics of fluids*, 8(11):3149–3162, 1996.
- [72] I. Cuesta. *Estudi numèric de fluxos laminars i turbulents en una cavitat cúbica*. Tesi Doctoral, Universitat Rovira i Virgili, 1993.
- [73] U. Piomelli. *Transition and turbulence modelling*, capítol Large-eddy simulations: theory and applications. Henningson and Hallback and Alfredsson and Johansson, 1996.
- [74] J. Smagorinsky. General circulation experiments with the primitive equations. *Monthly weather review*, 91:99–164, 1963.
- [75] B. Vreman, B. Geurts i H. Kuerten. Large-eddy simulation of the turbulent mixing layer. *Journal of fluid mechanics*, 339:357–390, 1997.
- [76] M. Rogers, P. Moin i W.C. Reynolds. The structure and modeling of the hydrodynamic and passive scalar fields in homogeneous turbulent shear flow. Report tècnic TF-25, Stanford University, Dept. of Mechanical Engineering, 1986.
- [77] G. Erlebacher, M.Y. Hussaini, C.G. Speziale i T.A. Zang. Toward the large-eddy simulation of compressible turbulent flows. Report tècnic 90-76, Nasa/Langley Research Center, 1990.
- [78] P. Moin, K. Squires, W. Cabot i S. Lee. A dynamics subgrid-scale model for compressible turbulence and scalar transport. *Physics of Fluids A*, 3:2746–2757, 1991.
- [79] J.P. Meeder i F.T.M. Nieuwstadt. Large-eddy simulation of the turbulent dispersion of a reactive plume from a point source into a neutral atmospheric boundary layer. *Atmospheric environment*, 34:3563–3573, 2000.

- [80] S. Komori, J.C.R. Hunt, T. Kanzaki i Y. Murakami. The effects of turbulent mixing on the correlation between two species and on concentration fluctuations in nonpremixed reacting flows. *Journal of fluid mechanics*, 228:629–659, 1991.
- [81] S. Komori, T. Kanzaki i Y. Murakami. Simultaneous measurements on instantaneous concentrations of two reacting species in a turbulent flow with a rapid reaction. *Physics of fluids A*, 3:507–510, 1991.
- [82] J.D. Li i R.W. Bilger. The diffusion of conserved and reactive scalars behind line sources in homogeneous turbulence. *Journal of fluid mechanics*, 318:339–372, 1996.
- [83] S.V. Patankar. *Numerical heat transfer and fluid flow*. Series in computational methods in mechanics and thermal sciences. Mc Graw Hill, 1980.
- [84] F.H. Harlow i J.E. Welch. Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with free surface. *Physics of fluids*, 8:2182–2189, 1965.
- [85] S.V. Patankar i D.B. Spalding. A calculation procedure for heat, mass and momentum transfer in three-dimensional parabolic flows. *International journal of heat and mass transfer*, 15:1787–1805, 1972.
- [86] R.I. Issa. Solution of the implicitly discretised fluid flow equations by operator-splitting. *Journal of Computational Physics*, pàgines 66–82, 1986.
- [87] A.A. Amsden i F.H. Harlow. The smac method: A numerical technique for calculating incompressible fluid flows. Report tècnic LA-4370, Los Alamos Scientific Laboratory of the University of California, 1970.
- [88] M. Braza. *Simulation numérique du décollement instationnaire externe par une formulation vitesse-pression. Application à l'écoulement autour d'un cylindre*. Tesi Doctoral, Institut National Polytechnique de Toulouse, 1981.
- [89] M. Braza, P. Chassaing i H. Ha Minh. Numerical study and physical analysis of the pressure and velocity fields in the near wake of a circular cylinder. *Journal of Fluid Mechanics*, 165:79–130, 1986.

- [90] J.B. Cazalbou. *Développement d'un code de calcul d'écoulements tridimensionnels instationnaires. Application à l'analyse physique de phénomènes de convection et d'instabilité*. Tesi Doctoral, Institut National Polytechnique de Toulouse, 1983.
- [91] B.P. Leonard. A stable and accurate convective modelling procedure based on quadratic upstream interpolation. *Computers methods in applied mechanics and engineering*, 19:59–98, 1979.
- [92] B.P. Leonard. The ultimate conservative difference scheme applied to unsteady one-dimensional advection. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 88:17–74, 1991.
- [93] G. Jin i M. Braza. A nonreflecting outlet boundary condition for incompressible unsteady Navier-Stokes calculations. *Journal of computational physics*, 107:239–253, 1993.
- [94] B. Engquist i A. Majda. Absorbing boundary conditions for the numerical simulation of waves. *Mathematics of Computation*, 31(139):629–651, 1977.
- [95] M. Braza, H. Ha Minh i J.B. Cazalbou. Analyse of laminar flow over a backward facing step. Dins *Notes on Numerical Fluid Mechanics*, volum 9. 1984.
- [96] U. Guia, K.N. Ghia i C.T. Shin. High-re solutions for incompressible flow using the Navier-Stokes equations and a multigrid method. *J. Comput. Phys.*, 48:387–411, 1982.
- [97] T. Hayase, J.A.C. Humphrey i R. Greif. A consistently formulated quick scheme for fast and stable convergence using finite-volume iterative calculation procedures. *J. Comput. Phys.*, 98:108–118, 1992.
- [98] R. Iwatsu, J.M. Hyun i K. Kuwahara. Analyses of three-dimensional flow calculations in a driven cavity. *Fluid dynamics research*, 6(2):91–102, 1990.
- [99] L.W.B. Browne, R.A. Antonia, S. Rajagopalan i A.J. Chambers. *Structure of complex turbulent shear flow, IUTAM*, capítol Interaction region of a two-dimensional turbulent plane jet in still air, pàgines 411–419. 1983.

- [100] F.O. Thomas i K.M.K. Prakash. An experimental investigation of the natural transition of a untuned planar jet. *Physics of fluids A*, 3(1):90–105, 1991.
- [101] H. Tennekes i J.L. Lumley. *A first course in turbulence*. Fourteenth printing edició, 1992.