



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
PROGRAMA DE MAESTRÍA Y DOCTORADO EN INGENIERÍA
MECÁNICA – TERMOFLUIDOS

**SIMULACIÓN NUMÉRICA DE GRANDES ESCALAS DE UN
PROCESO DE INYECCIÓN TRANSCRÍTICA**

TESIS
QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:
DOCTOR EN INGENIERÍA

PRESENTA:
M. en I. Christian Lagarza Cortes

TUTOR PRINCIPAL
Martín Salinas Vázquez. Instituto de Ingeniería, UNAM
COMITÉ TUTOR
Catalina E. Stern Forgoch, Facultad de Ciencias, UNAM
Jaime Cervantes de Gortari, Facultad de Ingeniería, UNAM

CIUDAD UNIVERSITARIA, CD. MX. ABRIL 2019



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

JURADO ASIGNADO:

Presidente: Dr. Cervantes De Gortari Jaime G.

Secretario: Dra. Stern Forgach Catalina E.

1^{er}. Suplente: Dr. Salinas Vázquez Martín

2^{do}. Suplente: Dr. Ascanio Gasca Gabriel

3^{er}. Suplente: Dr. Vicente y Rodríguez William

Lugar o lugares donde se realizó la tesis: Instituto de Ingeniería, UNAM.

TUTOR DE TESIS

Dr. Martín Salinas Vázquez

FIRMA

Resumen

El estudio y comprensión del flujo en chorros transcríticos y supercríticos es primordial en equipos como cohetes de propulsión, turbinas de gas y motores diésel. En las cámaras de mezclado, las altas presiones promueven cambios drásticos en la morfología de los chorros inyectados. En el caso de un chorro transcrítico, aparecen nuevas estructuras alargadas llamadas estructuras de dedo, que caracterizan el fenómeno de flujo. En este trabajo de tesis se estudia tales estructuras por medio de la simulación numérica de dos casos base, basados en los experimentos de Mayer. La turbulencia se describe mediante la técnica LES, con un modelo de escala sub-malla conocido como Función Espectral-Selectiva. El comportamiento del gas real se evalúa mediante la ecuación de Soave-Redlich-Kwong, y las propiedades de transporte se estiman mediante los Métodos de Chung. A partir de los resultados del caso transcrítico, se observa una modulación longitudinal, la cual causa una modulación azimutal. Eventualmente, se forman protuberancias en la superficie del chorro. Las vistas en secciones transversal del chorro revelan pares de vórtices longitudinales con direcciones de rotación invertidas que se ubican a cada lado de las protuberancias (en el borde exterior del núcleo denso). Estos movimientos transversales y turbulentos parecen afectar directamente el alargamiento de las protuberancias para la posterior formación de las estructuras de dedo. La existencia de los vórtices contra-rotantes está relacionada con la vorticidad baroclínica. Entonces, dado que uno puede referirse a la inestabilidad de Rayleigh-Taylor cuando se genera de forma baroclínica, ésta inestabilidad podría dar una explicación al origen de las estructuras de dedo. Al final del núcleo, se emiten intermitentemente paquetes o parcelas de fluido de alta densidad que están delimitados por el escudo térmico. En el caso supercrítico no se observan las estructuras de dedo. Las parcelas emitidas por el chorro supercrítico no presentan el escudo térmico.

Abstract

The study and understanding of transcritical and supercritical jet flow are critical in the liquid rocket, gas turbines, and diesel engines, as high-pressure atmospheres in these devices' mixing chambers drastically modify the morphology of their jets. In the transcritical jet, new elongated entities called finger-like appear and characterize the fluid flow phenomenon. This study examines these entities by simulating two classical cases based on Mayer's experiments. The turbulence is described by the LES technique with a sub-grid scale model known as the Selective Structures-Function model. Real-gas behavior is evaluated by the Soave-Redlich-Kwong equation, and the transport properties are estimated by Chung's Methods. From the results, a longitudinal modulation which triggers an azimuthal modulation is observed. Then, bulges are formed on the jet surface. Cross-sectional views reveal pairs of streamwise vortices with inverted rotational directions, which are located on either side of the bulges (on the outer edge of the dense core). These transversal, turbulent movements seem to be engaged with the elongation of the bulges and the subsequent formation of finger-like structures. The existence of the counter-rotating vortices is related with the baroclinic vorticity. Then, since one may refer to the Rayleigh-Taylor instability when it is baroclinically generated, this instability could give an explanation of the origin of the finger-like structures. Transcritical parcels emitted at the end of the dense core are bounded by a *thermal-shield*. Finger-like structures are not observed in the supercritical case. The *thermal-shield* is absent from the supercritical parcels.

Agradecimientos

Para Estefanía, Lucas,
Jerónimo y Matteo.

Agradezco el apoyo dado a esta investigación por Instituto de Ingeniería de la UNAM, particularmente al Dr. Martín Salinas Vázquez y al Dr. William Vicente y Rodríguez. El cómputo numérico fue llevado en el Clúster Tonatiuh (Instituto de Ingeniería, UNAM). El autor agradece también a Fernando Maldonado Salgado, Jefe de área y director del equipo ASUL.

Capítulo 1. Introducción.....	Pág. 1
1.1 Chorro de densidad constante (baja presión).....	Pág. 2
1.2 Chorro de densidad variable (baja presión).....	Pág. 4
1.3 Confinamiento y coflujo.....	Pág. 6
1.4 Chorro líquido (baja presión).....	Pág. 6
1.5 Fluido supercrítico.....	Pág. 8
1.5.1 Chorros y fluido supercrítico.....	Pág. 9
1.6 Chorro en estado supercrítico.....	Pág. 10
1.7 Estructuras tipo dedo o peine.....	Pág. 11
1.8 Plan de estudio.....	Pág. 15
1.8.1 Etapas del proyecto.....	Pág. 15
Capítulo 2. Ecuaciones de gobierno y metodología.....	Pág. 17
2.1 Ecuaciones.....	Pág. 17
2.2 Alternativas de simulación.....	Pág. 18
2.3 Simulación numérica de grandes escalas.....	Pág. 18
2.3.1 Modelo de Función-Espectral Selectiva.....	Pág. 19
2.4 Métodos numéricos.....	Pág. 19
2.4.1 Ecuaciones en coordenadas generalizadas.....	Pág. 20
2.4.2 Esquemas compactos (esquemas de alto orden)....	Pág. 20
2.4.3 Filtro matemático.....	Pág. 21
Capítulo 3. Propiedades térmicas y de transporte.....	Pág. 22
3.1 Propiedades térmicas de gas real.....	Pág. 22
3.1.1 Ecuación de estado.....	Pág. 22

3.1.2 Otras propiedades térmicas.....	Pág. 24
3.1.3 De propiedades conservativas a primitivas.....	Pág. 26
3.2 Propiedades de transporte de gas real.....	Pág. 27
3.2.1 Viscosidad dinámica.....	Pág. 27
3.2.2 Conductividad térmica.....	Pág. 27
Capítulo 4. Configuración, condiciones iniciales y de frontera.....	Pág. 29
4.1 Banco de pruebas y experimentos de Mayer.....	Pág. 29
4.2 Configuración numérica.....	Pág. 30
4.2.1 Estudio de independencia de malla.....	Pág. 31
4.3 Perfil de velocidad y temperatura.....	Pág. 32
4.4 Condiciones de frontera características (CFC).....	Pág. 34
4.4.1 CFC de gas real.....	Pág. 35
4.4.1A Frontera de entra subsónica.....	Pág. 38
4.4.1B Frontera de salida subsónica.....	Pág. 38
4.4.1C Pared deslizante.....	Pág. 39
4.5 Capa esponja (Disipador artificial)	Pág. 39
Capítulo 5. Resultados.....	Pág. 40
5.1 Validación.....	Pág. 40
5.2 Morfología del chorro transcrito y supercrítico.....	Pág. 42
5.3 Pseudo-similaridad.....	Pág. 44
5.4 Temperatura y escudo térmico.....	Pág. 45
5.5 Estructuras turbulentas.....	Pág. 48
5.6 Estructuras tipo dedo.....	Pág. 49

5.6 Parcelas transcíticas y supercríticas.....	Pág. 53
Capítulo 6. Conclusiones.....	Pág. 55
Apéndice A. Forma cubica de la EOS y método de Cardano.....	Pág. 57
Apéndice B. Propiedades térmicas y de transporte.....	Pág. 60
Apéndice D. Chorro de densidad constante.....	Pág. 68
Apéndice E. Chorro de densidad variable.....	Pág. 72
Referencias.....	Pág. 77

Introducción

En la mecánica de fluidos, un chorro redondo se define como una corriente libre de fluido sumergida en un ambiente circundante, el cual, puede estar o no en movimiento. Considerando el estado de agregación del fluido inyectado, un chorro se considera como líquido o gaseoso. Un chorro líquido se caracteriza por una inestabilidad superficial en la interface (mecanismo de rompimiento)¹ y físicamente representa una discontinuidad axisimétrica. El chorro gaseoso se caracteriza por una inestabilidad de capa de corte axisimétrica,² la cual puede presentar leves, moderados o pronunciados gradientes de densidad. En este caso, una discontinuidad no existe. Es decir, los chorros líquidos y gaseosos se conducen por diferentes fenómenos. Sin embargo, existe un estado de agregación intermedio, donde un chorro presenta propiedades y características similares a las de chorro líquido y las de chorro gaseoso.³ Dicho estado es el estado supercrítico y se alcanza cuando las condiciones de presión (p) y la temperatura (T) del fluido inyectado exceden sus valores críticos termodinámicos (p_{cr} y T_{cr}), como se muestra en la Fig. 1a. La distinción entre la fase líquida y la gaseosa desaparece y la sustancia se describe ahora como un fluido, un fluido supercrítico. A estas condiciones, el fluido presenta singularidades cerca de su punto crítico termodinámico; las propiedades térmicas y de transporte presentan un comportamiento altamente no lineal.⁴ La capacidad térmica específica a presión constante crece rápidamente (Fig. 1b), y propiedades como la tensión superficial y la entalpía de vaporización desaparecen por completo. De manera conjunta, estas características promueven cambios drásticos en la morfología y fluidodinámica del chorro.^{5,6}

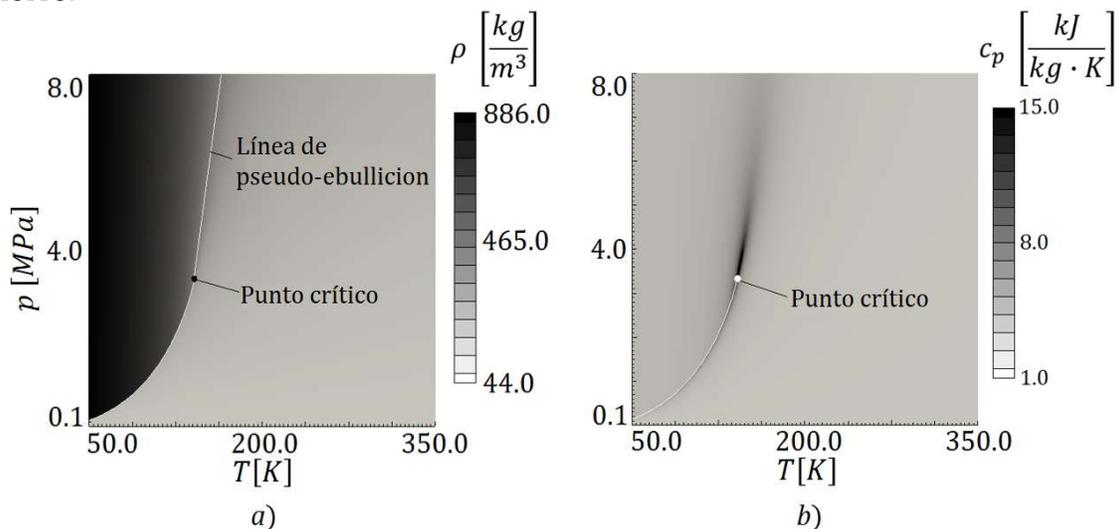


Figura 1. Diagrama de presión vs. temperatura para nitrógeno. La línea de pseudo-ebullicion es una extensión de la línea de coexistencia. Cerca del punto crítico termodinámico la capacidad térmica específica a presión constante se incrementa rápidamente.

Actualmente, diversos equipos como transbordadores espaciales, cohetes de propulsión, turbinas de gas o motores diésel, operan a condiciones supercríticas en sus cámaras de mezclado, lo que ha generado importantes esfuerzos orientados entendimiento y descripción del fenómeno de fluido supercrítico.

1.1 Chorro densidad constante (baja presión)

Un chorro de densidad constante se genera a partir del plano de salida de una boquilla y hasta antes de convertirse en un entorno inactivo, el chorro arrastra fluido receptor y se propaga gradualmente en la dirección radial. En la Fig. 2, el borde exterior ondulado del chorro representa la capa cortante entre el flujo vorticoso inyectado y el fluido ambiente estático. Aguas abajo, la cantidad de movimiento inicial se dispersa hasta disipar toda la energía del chorro por la acción viscosa y se concluye con la desaparición del mismo.

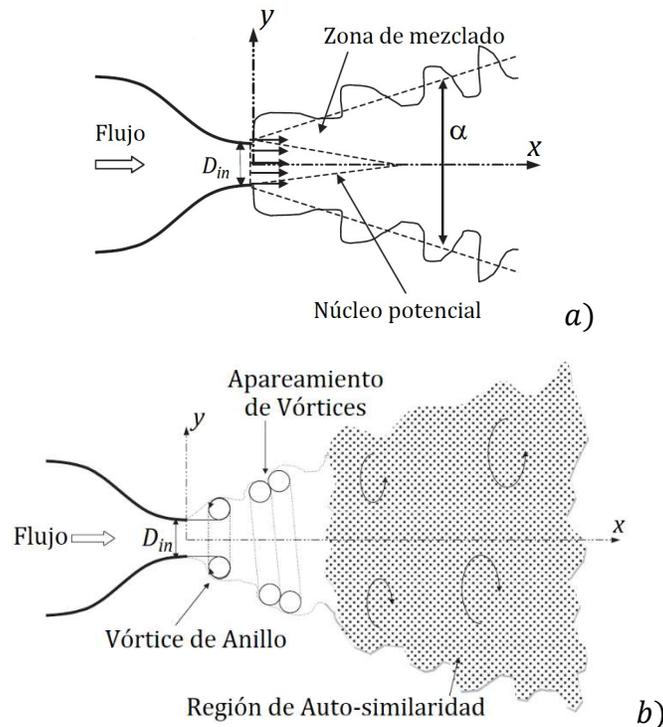


Figura 2. Esquemas de un chorro redondo extraídos de Ball et al.² Región inicial y transición (a) y estructuras turbulentas del chorro (b).

En un chorro de densidad constante se reconocen básicamente tres regiones:

- Inicial (núcleo potencial)
- Transición (zona de mezclado)
- Auto-similaridad (turbulencia isotrópica)

La región inicial se define a partir de su núcleo potencial y es una región en la que el flujo se establece. El perfil de velocidad axial en la dirección radial asemeja su forma a

un sombrero de copa, de ahí el uso del término “*top-hat profile*”. Tal curva refleja la diferencia de velocidades entre el fluido inyectado y el medio ambiente circundante, así como la capa cortante existente en la región inicial. Usualmente, la región inicial abarca los primeros diámetros, $0 \leq x/D_{in} \leq 7$, donde D_{in} , es el diámetro de inyección. En el núcleo potencial, las condiciones iniciales de inyección como densidad (ρ_{in}), velocidad (U_{in}), concentración (C) y temperatura (T_{in}), se mantienen constantes. El núcleo potencial coincide con la zona de mezclado (Fig. 2a), que es donde se promueve el inicio y desarrollo de la turbulencia. A partir de una inestabilidad longitudinal, generada en la capa cortante del chorro (inestabilidad de *Kelvin-Helmholtz*), se forman estructuras turbulentas como vórtices de anillo y el apareamiento de vórtices, Fig. 2b. En valores promedio, el chorro se desarrolla predominantemente en la dirección axial. No obstante, las componentes radiales se vuelen cada vez más notables aguas abajo. A partir de la consideración de las ecuaciones de capa limite, se puede determinar una tasa de crecimiento o ángulo de dispersión del chorro casi lineal, lo cual implica un decaimiento lineal de velocidad una vez que el núcleo potencial desaparece. La región de transición, se encuentra entre los $7 < x/D_{in} < 70$. En esta región, las estructuras turbulentas altamente anisotrópicas, evolucionan e interactúan en el flujo. Estas estructuras, formadas dentro de los primeros diámetros, son altamente dependiente del número de Reynolds, $Re = \rho U D / \mu$. Aunque la región de transición es una de las regiones más importantes en el chorro, dado que representa la región donde se desarrolla la mayor parte del proceso de mezclado, es la menos estudiada de las tres. El campo lejano del chorro se localiza a $x/D_{in} > 70$ y también se le conoce como de región de auto-similaridad, Fig. 2b. Lo anterior, se debe a que los perfiles de velocidad axial promedio, en la dirección radial, son independientes de la posición axial, como se observa en la Fig. 3. Cuando los perfiles de velocidad axial se normalizan con respecto a la velocidad del chorro en la línea (U_c), las curvas se traslapan en una sola. Las fluctuaciones turbulentas de las tres componentes de velocidad, en un marco cartesiano, presentan intensidades similares, lo cual, se refleja como una región en la que la turbulencia comienza a ser isotrópica.

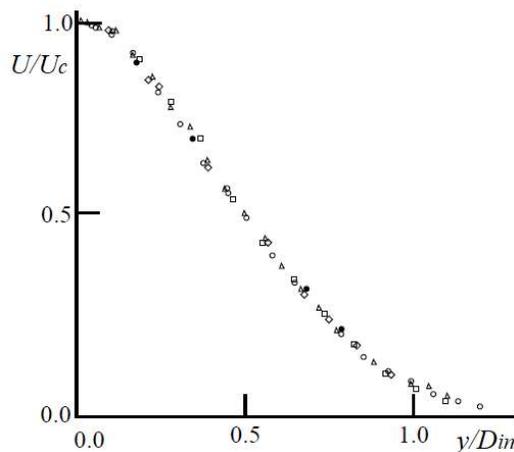


Figura 3. Perfil de velocidad promedio vs posición radial de un chorro redondo turbulento, $Re \approx 10^5$. Las mediciones son extraídas de Wygnanski and Fiedler.⁷ Posiciones axiales: \circ , $x / D_{in} = 40.0$, \triangle , $x / D_{in} = 50.0$, \square , $x / D_{in} = 60.0$, \diamond , $x / D_{in} = 70.0$ y \bullet , $x / D_{in} = 97.5$.

1.2 Chorro de densidad variable (baja presión)

Los chorros de densidad variable se generan básicamente bajo la consideración de dos parámetros:

- Temperatura (T)
- Especie química

En el primero, una corriente de gas de baja o alta temperatura (es decir, baja o alta densidad en comparación con el medio ambiente receptor) entra en una cámara de mezclado o en un ambiente circundante de la misma especie química. Para el segundo caso, se consideran gases de diferente especie química. Así, el gas inyectado y el gas ambiente receptor presentan diferentes densidades. En comparación con los chorros de densidad constante, los chorros de densidad variable son menos estudiados (experimental y teóricamente) y pocos casos son reportados la literatura.^{8,9,10} Actualmente, los chorros de densidad variable se estudian en su mayoría para casos de diferente especie química, por lo que la descripción de tales chorros se realizara considerando este principio.

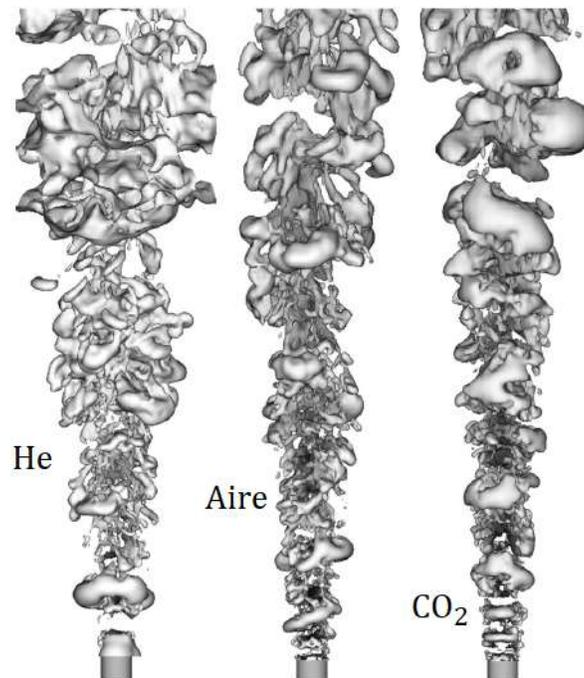


Figura 4. Isosuperficies de fluctuaciones de presión de los experimentos de Wang et al.¹¹ Chorros de diferentes especies químicas (helio, aire y dióxido de carbono) son inyectados en un coflujo de aire.

Así como se describe en la [Sección 1.1](#), en el chorro de densidad variable se presentan tres regiones de flujo y estructuras coherentes turbulentas (ver [Fig. 4](#)). Sin embargo, la longitud o extensión de dichas zonas cambia en función de la de la relación de densidad entre el gas inyectado (ρ_{in}) y el gas ambiente (ρ_{amb}). Para relaciones de densidad

(ρ_{in}/ρ_{amb}) mayores a la unidad, se tiene un núcleo potencial más largo en comparación con los casos de relaciones de densidad menor a la unidad ($\rho_{in}/\rho_{amb} < 1$). Para $\rho_{in}/\rho_{amb} > 1$, el chorro de alta densidad es estabilizado inicialmente por un fenómeno de estratificación, lo cual permite la subsistencia del núcleo potencial hasta varios diámetros aguas abajo. Para $\rho_{in}/\rho_{amb} < 1$, el fluido inyectado de baja densidad se desestabiliza rápidamente y el núcleo potencial desaparece a pocos diámetros del punto de inyección. Ambos casos presentan vórtices longitudinales, los cuales producen vorticidad axial, principalmente en la región exterior de la capa cortante. Aguas abajo, una vez que el núcleo potencial desaparece, inicia la región de transición. Los vórtices de anillo y el fenómeno de apareamiento, ya no son observados. Al mismo tiempo, la turbulencia se vuelve más intensa y el proceso de mezclado es altamente difusivo. De nuevo, en esta región se lleva a cabo la mayor parte del proceso de mezclado. A diferencia del caso de densidad constante el decaimiento de la velocidad no es lineal. Chen y Rodi¹² proponen una función del tipo x^{-1} para modelar el decaimiento de la velocidad, la cual también es dependiente de la raíz cuadrada de la relación de densidad, la cual coincide de forma exacta con datos experimentales. Para la última región, no se alude a una región de auto-similaridad sino de una región de pseudo-similaridad y esto se debe al hecho de no ser un caso de densidad constante. Desde luego, la región de pseudo-similaridad representa la contraparte del caso constante. Aquí, los perfiles de velocidad axial promedio también caen en una sola curva al ser normalizados con los valores de velocidad axial en la línea central. Aunque la longitud de las regiones del chorro de densidad variable no se define de forma tan precisa, como en el caso de los chorros de $\rho = \text{cte.}$, si es posible determinar la longitud de otras tres regiones o campos, donde predominan diferentes fuerzas en el flujo. Los campos son:

- Campo cercano (fuerzas de inercia)
- Campo intermedio (fuerzas de inercia-flotación)
- Campo lejano (fuerzas de flotación)

La importancia del efecto de las fuerzas en los campos se evalúa a partir del número de Froude en el punto de inyección, el cual se define por

$$Fr = \rho_{in} U_{in}^2 / g |\rho_{in} - \rho_{amb}| D_{in} \quad (1)$$

En el primer campo predominan las fuerzas de inercia y el chorro se comporta como un chorro puro en el que se deprecian las fuerzas gravitacionales. Este campo se extiende hasta X_1 (a partir del punto de inyección), y se define por la Ecu. 2

$$X_1 = 0.5 D_{in} Fr^{0.5} (\rho_{in}/\rho_{amb})^{0.25} \quad (2)$$

En el campo lejano, $X_2 = 10X_1$, el flujo se conduce a través de las fuerzas de flotación y el chorro se comporta como una pluma pura. Dentro de estas regiones se encuentra el campo intermedio, $X_1 \leq x/D_{in} \leq X_2$. Aquí, ambas fuerzas son relevantes (inercia y flotación).

1.3 Confinamiento y coflujo

Independientemente de si un chorro es de densidad constante (Sección 1.1) o variable (Sección 1.2), estos fenómenos de flujo pueden presentar dos condiciones que afectan de forma importante su desarrollo. Tales condiciones son el confinamiento (efecto de pared o paredes) y el coflujo (efecto de un flujo circundante). El confinamiento se refiere a un muro o muros laterales que delimitan radialmente el flujo del chorro, comúnmente de sección transversal circular o cuadrada. Esta condición se considera como débil o fuerte, y depende únicamente de la relación de diámetros, D_e/D_{in} (véase Fig. 5). El parámetro, D_e , representa el diámetro exterior de la sección transversal del muro que confina el chorro. Para relaciones de diámetro $D_e/D_{in} < 11.0$,⁹ se considera un confinamiento fuerte y para relaciones mayores se considera un efecto débil. El coflujo, se refiere a la existencia de un flujo circundante y su orientación puede ser igual, contraria o cruzada, con respecto a la dirección principal del chorro. Con respecto a la velocidad chorro, la velocidad del coflujo puede ser mayor, igual o menor. Existen una amplia variedad casos aplicados donde se presentan combinaciones de condiciones confinamiento y coflujo. En la Fig. 5, se muestran cuatro combinaciones básicas de un chorro con las condiciones mencionadas.

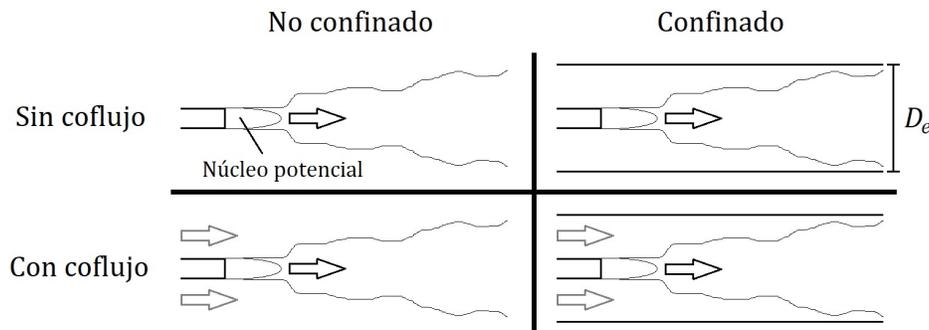


Figura 5. Configuración de un chorro a partir de considerar el confinamiento y el coflujo.

1.4 Chorro líquido (baja presión)

Un chorro líquido se define como una columna continua de líquido que se inyecta por medio de una boquilla en un ambiente de gas. A partir de una competencia entre las fuerzas cohesivas y disruptivas se generan oscilaciones y perturbaciones en la superficie del chorro, dando lugar a diferentes modos de rompimiento en gotas. A través del uso de propiedades como la densidad, tensión superficial (σ), viscosidad (μ), velocidad y el diámetro de la boquilla (D), se determinan los modos de rompimiento. Reitz et al.¹³ y Lin y Reitz,¹⁴ definen cinco modos

- Goteo (Dripping)
- Rayleigh
- 1^{er} rompimiento inducido (First wind-induced)
- 2^{do} rompimiento inducido (Second wind-induced)
- Atomización (Atomization)

Estos modos, reflejan el comportamiento de las propiedades físicas de fluido en el flujo y el efecto de las fuerzas dominantes en él. En la Fig. 6, se presentan los diferentes regímenes de rompimiento, en función de su longitud de ruptura. En el primer modo, se considera una velocidad de salida baja, la cual, promueve la acumulación de líquido en la boquilla hasta que gotea. Cuando se incrementa la velocidad, se presenta el modo de Rayleigh. Aquí, la tensión superficial produce ondulaciones longitudinales axisimétricas en la superficie del chorro. Eventualmente, estas ondulaciones crecen y forman gotas aproximadamente de dos veces el tamaño del diámetro de inyección. A mayor velocidad, relativa entre el chorro y el ambiente, se incrementan los efectos de tensión superficial y de fricción, produciendo así una distribución de presión estática en la superficie del chorro y una aceleración en el rompimiento del mismo. Este modo, es el 1^{er} momento inducido, y junto con el rompimiento de Rayleigh, son de los modos más estudiados. El modo del 2^{do} momento inducido, se presenta a mayores velocidades de inyección. En él, el incremento en los efectos de fricción y el crecimiento inestable de una modulación superficial de longitud de onda corta en la superficie del chorro favorecen su rápida ruptura. La tensión superficial se opone al crecimiento de las modulaciones superficiales. Sin embargo, las magnitudes de las oscilaciones se ven incrementadas con la velocidad del flujo, por lo que ligamentos y gotas individuales se desprenden del chorro líquido hasta completar su rompimiento. Para el proceso de atomización, el rompimiento del chorro se da prácticamente a la salida de la boquilla, dando lugar a gotas de diferentes diámetros. Las escalas de longitud de dichas gotas son varios ordenes de magnitud menor a la del diámetro de inyección.

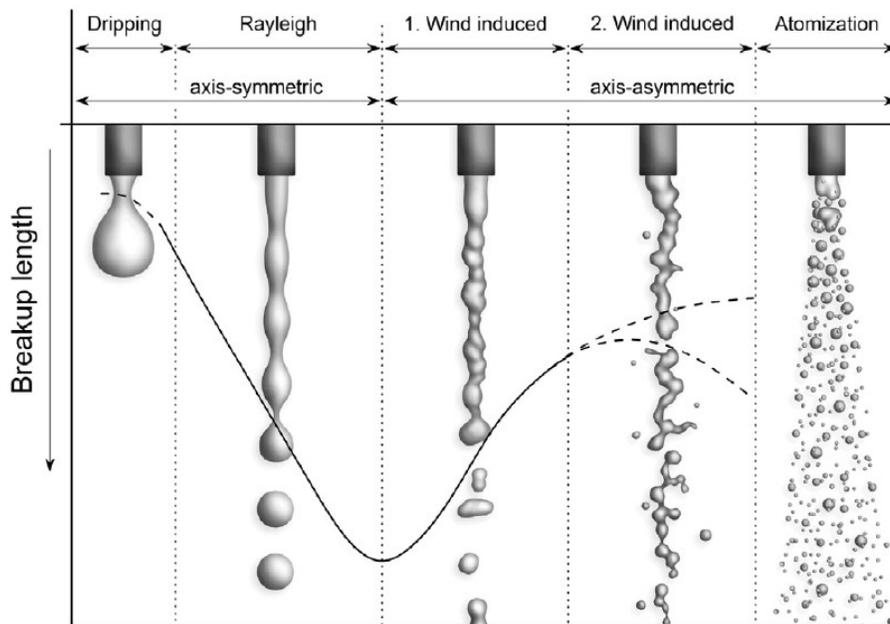


Figura 6. Efecto de la velocidad de salida en la longitud de ruptura para los diferentes modos de rompimiento de un chorro líquido circular (Bonhoeffer et al.¹⁵).

1.5 Fluido supercrítico

La existencia de un fluido en estado supercrítico se reconoce hace más de cien años. Sin embargo, su uso en diversos sectores y principalmente su investigación, no es mayor de cuatro décadas. En el siglo XIX, el Barón Charles Cagniard de la Tour fue el primero en revelar el estado supercrítico, a través de la experimentación. Utilizando mezclas vapor-líquido de diferentes sustancias en un cilindro sellado, incrementaba su temperatura y lo hacía girar hasta eliminar el sonido producido por el rompimiento de la fase líquida al interior del recipiente. Esto evidenció la existencia de una temperatura crítica por encima de la cual solo es posible tratar con una fase. En la termodinámica clásica, una sustancia se considera en estado supercrítico si su presión y temperatura exceden los valores críticos de presión y temperatura, caracterizándose cualitativamente, por la inexistencia de la interface líquido-gas (véase Fig. 7). Es una fase, la cual presenta propiedades tanto de líquidos (densidad, solubilidad), como de gas (viscosidad, difusividad).

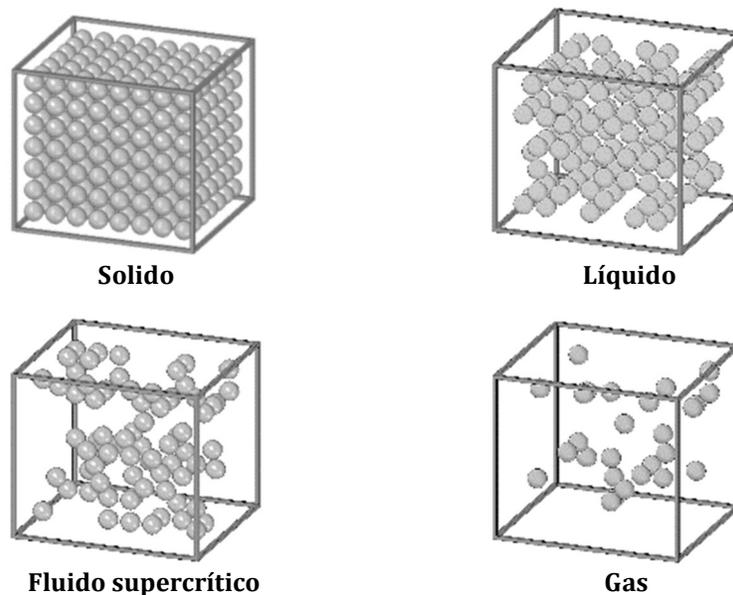


Figura 7. En comparación con los tres estados de agregación de la materia, la densidad molecular de un fluido supercrítico en un cierto volumen oscila entre la de un líquido y un gas.

El uso de los diagramas $p-v-T$ es recurrente en la descripción gráfica de las singularidades del fenómeno supercrítico. En la Fig. 8a se observa la curva de coexistencia entre líquido y gas. Un incremento en la presión vuelve más denso al gas y un incremento en la temperatura vuelve más ligero al líquido debido a una reducción en las fuerzas de cohesión. Al acercarse al punto crítico la diferencia entre las fases se reduce, volviéndose iguales en dicho punto. Además de considerar al punto crítico como el inicio de la región supercrítica, propiedades como la capacidad térmica, la solubilidad y la difusividad aumentan. Al mismo tiempo, la tensión superficial y la entalpia de vaporización son completamente inhibidas, Fig. 8b. La ausencia de estas características de interface resulta en cambios no lineales de las propiedades termodinámicas y de

transporte, con gradientes pronunciados en regiones espaciales reducidas. Esto genera retos importantes tanto en estudios experimentales, como en trabajos numéricos. La alta no linealidad en el estado supercrítico es la piedra angular del fenómeno.

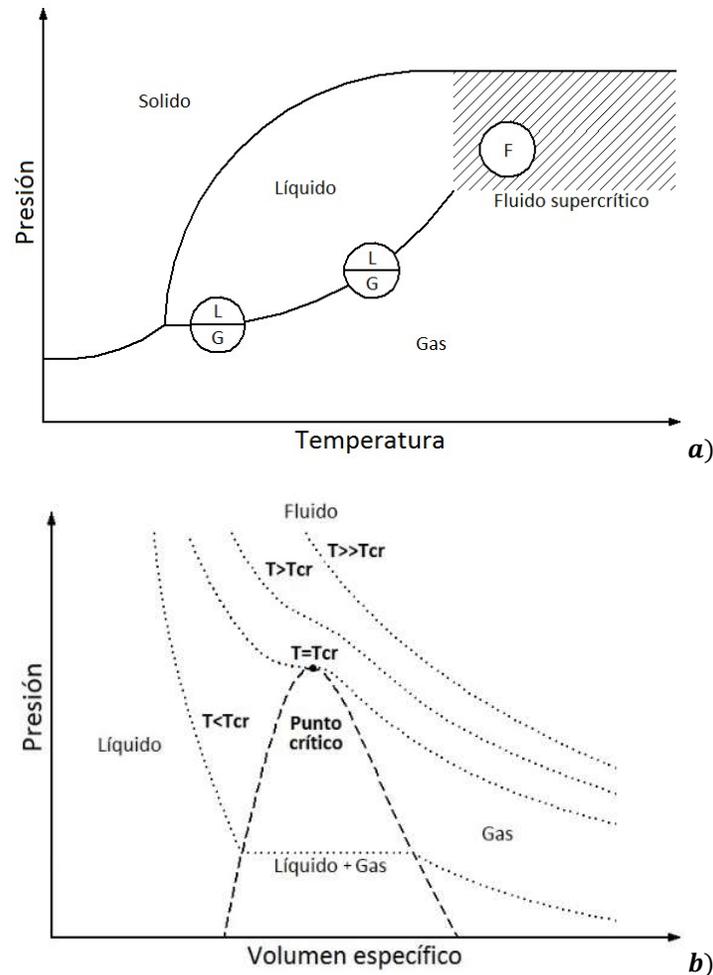


Figura 8. En la región supercrítica la sustancia se define como fluido (F). Existe únicamente una fase líquida que es capaz de diluir como un líquido (L) y difundirse como un gas (G).

1.5.1 Chorros y fluido supercrítico

Una vez conocidas las características de los chorros de baja presión (chorro de densidad constante, densidad variable y líquido) y la capacidad del fluido supercrítico para presentar propiedades (térmicas y de transporte) semejantes a las de un líquido y un gas, incluyendo las singularidades propias, resulta altamente improbable una simple predicción intuitiva a cerca de la fluidodinámica de un chorro que exhibe condiciones termo-físicas supercríticas. No obstante, todo lo anterior representan un buen punto de partida, ya que algunos de los términos, conceptos y estructuras descritas, se asemejan o son similares a las observadas en un chorro en estado supercrítico.

1.6 Chorro en estado supercrítico (alta presión)

Un chorro inyectado a condiciones supercríticas ($p > p_{cr}$ y $T > T_{cr}$) puede considerarse como chorro de fluido pseudo-líquido o pseudo-gas. Tales conceptos, se definen a partir del diagrama p - T y la línea de pseudo-ebullición.^{16,17} La línea de pseudo-ebullición una extensión de la línea de coexistencia de baja presión, la cual divide el estado supercrítico en dos regiones, como se muestra en la Fig. 1a. A cada lado de la línea, se describen fluidos que asemejan sus propiedades a las de los estados de agregación de baja presión. En la región izquierda de la línea, las propiedades del fluido se asemejan a las de un líquido (pseudo-líquido), y en la región derecha, se asemejan a las de un gas (pseudo-gas). Entonces, se definen dos tipos de chorros en el estado supercrítico: el chorro transcrito y el supercrítico. El primer chorro se caracteriza por la inyección de un fluido pseudo-líquido inyectado en un ambiente pseudo-gas. Eventualmente, las condiciones térmicas del fluido inyectado cambian y la línea de pseudo-ebullición es cruzada (ya sea, por p o T o ambas). De ahí el prefijo *trans*. En el segundo chorro, tanto el fluido inyectado, como el medio ambiente se consideran como pseudo-gases. En dicho caso, la línea de pseudo-ebullición nunca se cruza. Como procesos de inyección, los chorros en estado supercrítico también se han descrito considerando los estados de agregación subcríticos, tanto para el fluido inyectado, como para el medio ambiente circundante.¹⁸ La clasificación más utilizada actualmente es la que considera la línea de pseudo-ebullición.

Desde los estudios experimentales hasta los numéricos realizados por Newman y Brzustowski,¹⁹ Mayer et al.,^{20,21} Chehroudi et al.,^{22,23} Oswald y Schik,²⁴ Oefelein y Yang,²⁵ Harstad y Bellan,²⁶ Zong et al.²⁷ y Schmitt et al.²⁸ (entre otros), se han logrado avances importantes en el tema de los chorros en estado supercrítico. A partir de estos, se ha reconocido una estrecha relación entre el estado termodinámico local y las propiedades del fluido, lo que implica que ligeras variaciones en la temperatura y/o la presión, producen cambios significativos en las propiedades del fluido, principalmente en la proximidad del punto crítico. Los chorros transcritos se caracterizan por un efecto de estratificación por densidad. En este tipo de chorros las inestabilidades superficiales se atenúan; las fluctuaciones radiales se amortiguan y su energía se transfiere a las fluctuaciones axiales.²⁷ Por otro lado, cuando la presión y temperatura en la superficie del chorro cruzan la línea de pseudo-ebullición, el chorro presenta una capa superficial con una alta capacidad térmica a presión constante. Esta capa actúa como un escudo térmico,²⁸ y junto con la estratificación por densidad promueve el efecto de estabilidad en el chorro transcrito. A partir de este chorro, se forman entidades estiradas que eventualmente se disuelven en el ambiente circundante de mayor temperatura.^{20,22} Estas estructuras reemplazan los ligamentos y las gotas observadas en un chorro líquido y se denominan estructuras de tipo dedo o peine. El chorro del tipo supercrítico tiene un aspecto gaseoso, similar a un chorro de densidad variable. Por otra parte, diversos modelos y resultados experimentales acerca de su tasa de crecimiento son consistentes con diversas teorías de baja presión.^{29,30} Este trabajo está orientado al estudio de las estructuras de tipo dedo o peine.

1.7 Estructuras de tipo dedo o peine

Aunque los jets supercríticos y transcíticos se realizan en la región supercrítica presentan diferentes características. Una de estas es la aparición de las estructuras de tipo dedo o peine (en el caso transcítico). Inicialmente, esas estructuras se observaron en los experimentos realizados por Mayer et al.^{20,21} Aquí, la capa de cortante de un chorro redondo de nitrógeno se describió como una interfaz rayada, en la que entidades alargadas se estiraron y disuelven en el ambiente circundante. Las estructuras asemejaban estructuras parecidas a hilos o cuerdas, como se observa en la Fig. 9. Chehroudi et al.²² observaron las mismas estructuras y sugirieron su origen a partir de la descripción del proceso transcítico. Así, los investigadores usaron dos tiempos característicos, el de ruptura aerodinámica de un ligamento³¹ y el de vaporización de una gota (“Ley D^2 ”).³² Cuando ambos tiempos son casi iguales, las protuberancias en la superficie de un chorro líquido no pueden formar entidades bien definidas (ligamentos) y estas se gasifican casi tan rápido como se forman. Entonces, tales protuberancias dan lugar a entidades regulares tipo dedo, en lugar de ligamentos. Muchos autores hicieron observaciones similares en sus experimentos, incluso en investigaciones reactivas²⁰ (lo que introducen distorsiones ópticas). Estas descripciones se basaron en identificaciones visuales y se apoyaron en mediciones ópticas. Como lo muestran Harstad y Bellan,²⁶ entidades del fluido de alta densidad se pueden identificar ópticamente por un cambio en el índice de refracción, siempre y cuando el cambio de densidad sea lo suficientemente rápido. Comparado con un chorro de líquido, el chorro transcítico presenta una relación de densidad más baja, pero aún quedan importantes gradientes de densidad que permiten identificar cambios en el índice de refracción. En las Figs. 10 y 11, se muestran los experimentos de Chehroudi et al. con nitrógeno. La Fig. 10 muestra la evolución de la morfología de un chorro al incrementar paulatinamente la presión de subcrítica a supercrítica. En la Fig. 11, se muestran imágenes ampliadas de los chorros cerca de la zona de inyección. Roy y Segal³³ mencionan estructuras similares como agrupaciones de fluido desprendido del cuerpo del chorro (dentro de los primeros 20 diámetros de su campo de visión). En sus experimentos realizados cerca del punto crítico, las agrupaciones de fluido formaron gotas (ver Fig. 12). Tani et al.³⁴ experimentaron con chorros redondos y observaron en su caso transcítico estructuras similares a nubes, en lugar de estructuras alargadas (ver Fig. 13). Este grupo, concluyen que las longitudes de onda y el ancho del núcleo denso eran similares al caso subcrítico (chorro de líquido). Aguas abajo, la mezcla turbulenta se parece al proceso de mezclado presente en un chorro de densidad variable monofásico. Otros autores, como Schmitt et al.,²⁷ reconocieron las estructuras tipo dedos como estructuras características del fenómeno transcítico (ver Fig. 14). Ribert et al.³⁵ realizaron simulaciones en 2D con resolución DNS. Su caso supercrítico presentaba vórtices separados del chorro a lo largo de la capa de cizallamiento, que estaban asociados con estructuras similares a dedos (ver Fig. 15). El tamaño de los vórtices no excedió tres veces el diámetro del inyector, sin embargo, estas estructuras no fueron confirmadas visualmente por Petit et al.³⁶ en sus simulaciones 3D (cabe destacar que Ribert et al.³⁵ consideraron una velocidad de inyección 10 veces mayor

que en el trabajo original; 10 todos los demás parámetros termo-físicos se mantuvieron sin cambios).

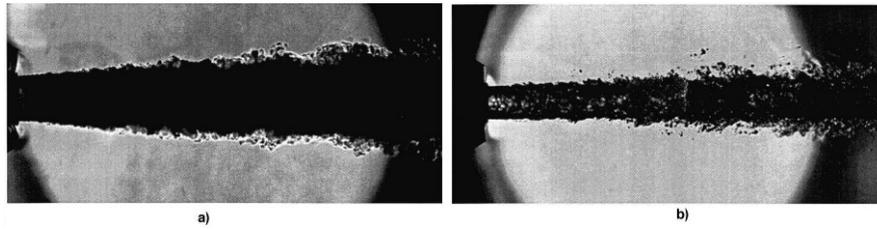


Figura 9. Experimentos de Mayer.²⁰ Nitrógeno líquido a 100 K es inyectado en nitrógeno a 300 K. La presión atmosférica cambia de supercrítica (a) a subcrítica (b).

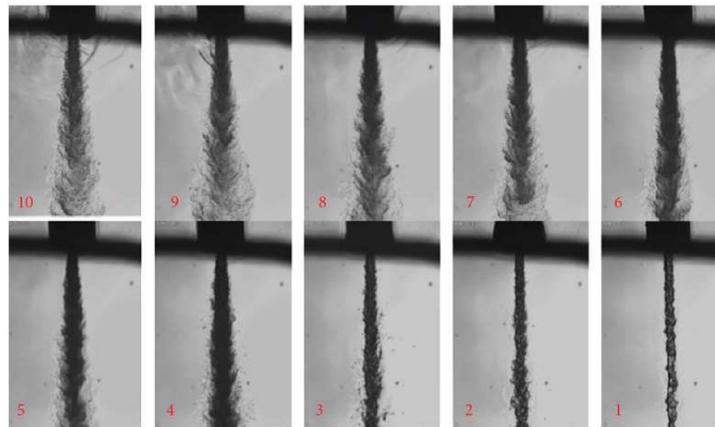


Figura 10. Imágenes retro-iluminadas de un chorro de nitrógeno. N_2 : presión crítica, $p_c=3.4 \text{ MPa}$, y temperatura crítica, $T_c=126.9 \text{ K}$. Desde la parte inferior derecha a la superior izquierda: p_{camara}/p_c (número de cuadro) = 0.23 (1), 0.43 (2), 0.62 (3), 0.83 (4), 1.03 (5), 1.22 (6), 1.62 (7), 2.03 (8) 2.44 (9), 2.74 (10).⁶

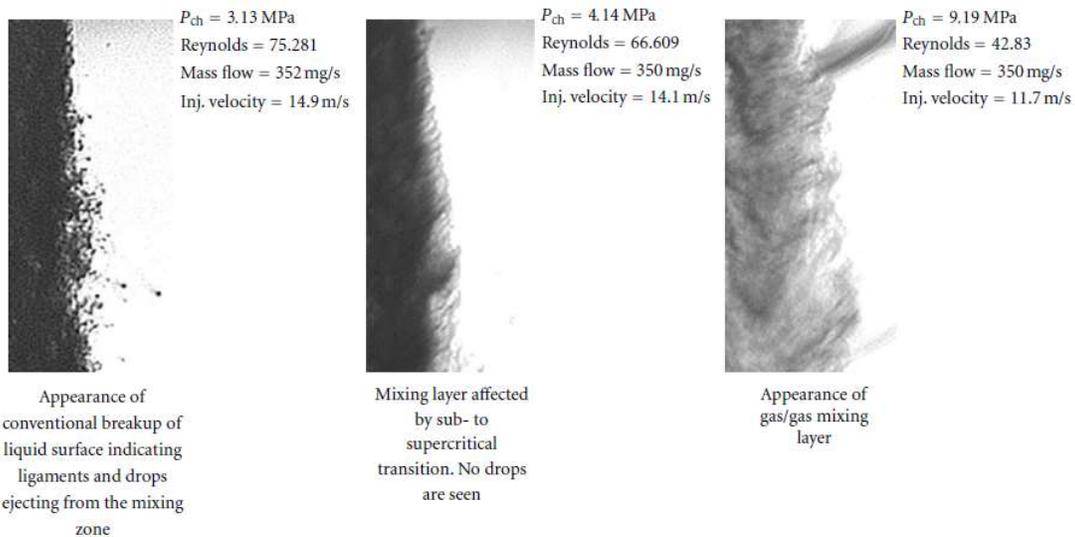


Figura 11. Imágenes ampliadas de los chorros 4, 6 y 10 de la figura anterior. En la región del cortante del chorro 6, se muestra una transición similar a la de un chorro de gas que comienza justo debajo de la presión crítica del nitrógeno.⁶

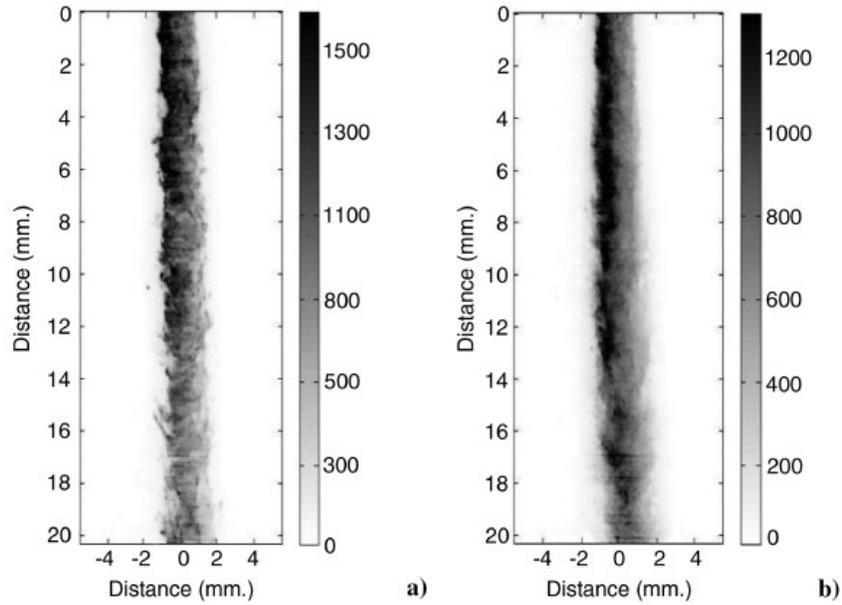


Figura 12. Imágenes a escala de un chorro subcrítico inyectado en condiciones de cámara supercrítica: *a)* chorro inicialmente a $T_r=T/T_c=0.66$, $p_r=p/p_c=1.85$ inyectado en la cámara a $T_r=1.19$, $p_r=1.68$ a una velocidad de 5.3 m/s y *b)* chorro inicialmente a $T_r=0.91$, $p_r=1.72$ inyectado en la cámara a $T_r=1.02$, $p_r=1.40$ a una velocidad de 10.1 m/s .

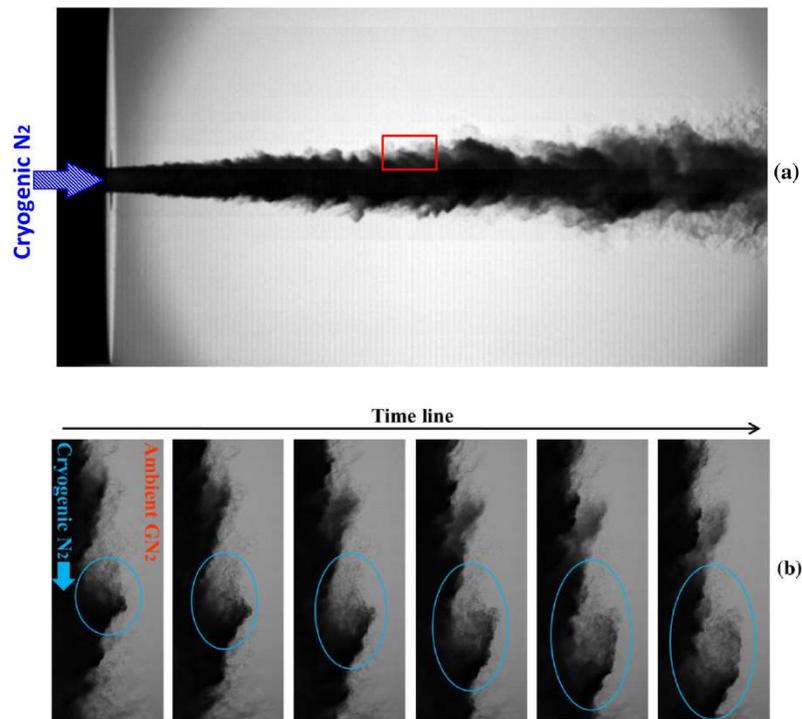


Figura 13. Imágenes retro-iluminadas instantáneas del chorro redondo simple en el caso transcrito: *(a)* imagen general, *(b)* secuencia temporales de la capa de mezcla.

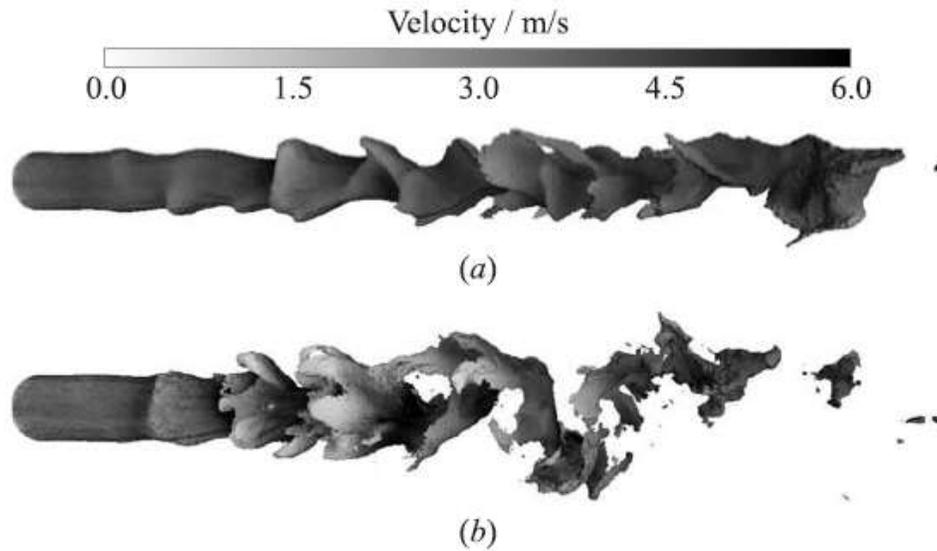


Figura 14. Iso-superficie de densidad con contornos de velocidad para el chorros transcrito (a) y supercrítico (b).

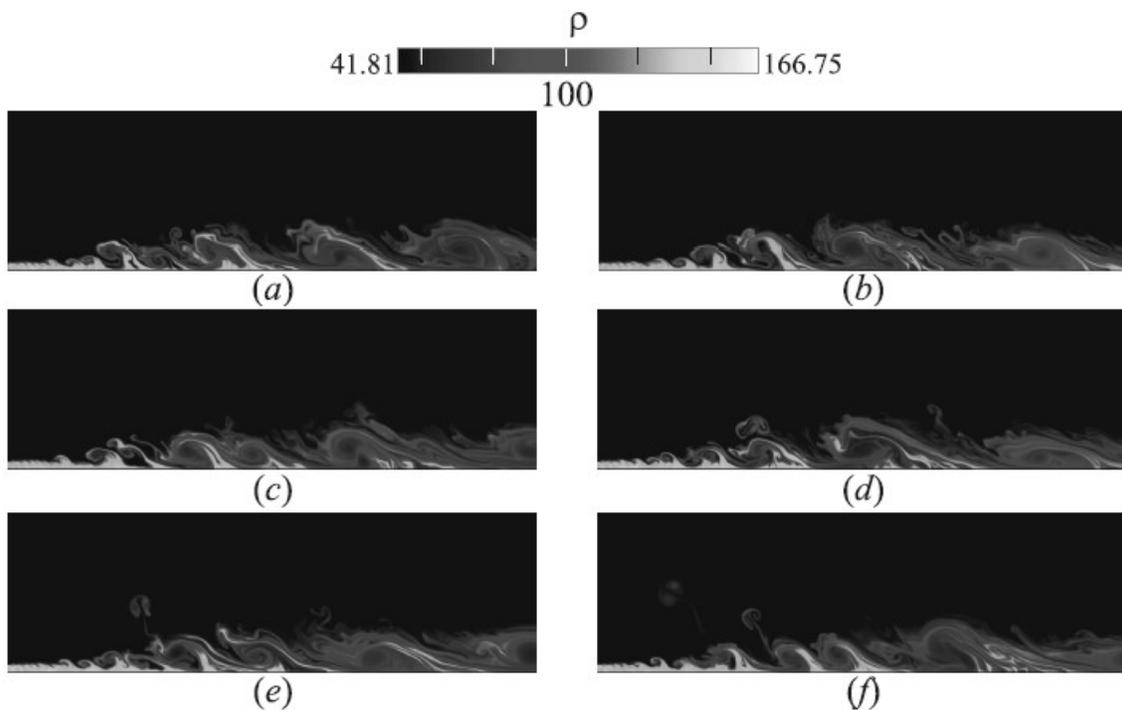


Figura 15. Evolución temporal de contornos de densidad en kg/m^3 . El fluido inyectado y el ambiente, son nitrógeno. Tiempos: $t=5.4\ ms$ (a), $6.08\ ms$ (b), $6.75\ ms$ (c), $7.43\ ms$ (d), $8.1\ ms$ (e) y $9.45\ ms$ (f).

Los escenarios mencionados anteriormente indican la existencia de condiciones favorables para el establecimiento de estructuras de tipo dedo. Este trabajo está orientado a describir estas singulares estructuras, así como dar una explicación acerca de su origen y desarrollo. Dado que las estructuras de tipo dedo reemplazan a las gotas y ligamentos formados en un chorro líquido, éstas deberían ser un tema de vital

importancia y no servir solo como características cualitativas necesarias para la validación de un trabajo numérico.

1.8 Plan de estudio

El objetivo de este proyecto de tesis es estudiar numéricamente las estructuras de tipo dedo, las cuales caracterizan al chorro transcrito. En los capítulos siguientes se abordarán los siguientes temas:

- Ecuaciones de gobierno y metodología, [Capítulo 2](#)
- Propiedades térmicas y de transporte, [Capítulo 3](#)
- Configuración y detalles numéricos, [Capítulo 4](#)
- Resultados, [Capítulo 5](#)
- Conclusiones, [Capítulo 6](#)

Aunado a esto se presentan cinco apéndices, donde se desarrollan los siguientes temas

- Forma cubica de la ecuación de estado y el método de Cardano, [Apéndice A](#)
- Obtención de propiedades térmicas de gas real (e , e_{DP} , c_v , c_p), [Apéndice B](#)
- Chorro de densidad constante, [Apéndice C](#)
- Chorro de densidad variable, [Apéndice D](#)

El contenido de los dos últimos apéndices se discute en la siguiente sección.

1.8.1 Etapas del proyecto

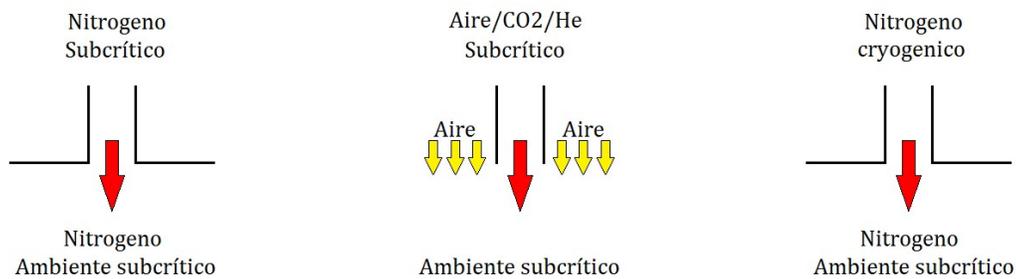
El código de alta presión se construyó a partir de un código baja presión. Por tanto, el presente trabajo se desarrolló en tres etapas. La Etapa 1 ([E1](#)) se refiere a la validación del código de baja presión. Aquí, se considera la simulación de un chorro de densidad constante. Los modelos térmicos y de transporte utilizados son de baja presión. Los datos experimentales se extraen del trabajo de Hussein et al.³⁷ La intención de esta etapa es probar el adecuado funcionamiento del código en cuanto a la solución las ecuaciones de movimiento. Derivado de esta validación se desprenden dos publicaciones:

- Lagarza et al. "Large-eddy Simulation of Confined Turbulent Round Jet with Annular Jets". Proceedings of the 3rd International Conference on Fluid Flow, Heat and Mass Transfer (FFHMT'16) Ottawa, Canada – May 2 – 3, 2016.
- Lagarza et al. "Large-eddy Simulation of Confined Port-array in a Mixing Process". Advances and Applications in Fluid Mechanics. Volume 19, Number 4, 2016, p. p. 917-931.

Este último trabajo escrito fue seleccionado para presentarse con formato de exposición, siendo una de las tres exposiciones más interesantes. Para la Etapa 2 ([E2](#)), se consideran chorros de densidad variable. Como se menciona en Sección 2, los

chorros en estado supercrítico presentan cierta semejanza con los chorros de densidad variable. En esta etapa se prueba la viabilidad del código para modelar flujos en presencia de gradientes (chorro-ambiente). Tales simulaciones aun consideran propiedades térmicas y de transporte de gas ideal. De nuevo, se realiza una validación con datos experimentales extraídos de Amielh et al.¹⁰ En la Etapa 3 (E3), se considera un código de gas real, es decir, con las modificaciones necesaria para el simular y analizar del flujo en estado supercrítico. Para la validación, los datos experimentales se extraen de Mayer et al.²¹

Con la intención de darle continuidad a los capítulos, las primeras dos etapas se muestran en los Apéndices C (E1) y D (E2). Así, el Capítulo 5, solo involucra los resultados de las simulaciones numéricas de los chorros en estado supercrítico. En la Fig. 16, se muestran las etapas de este proyecto de tesis.



1) Chorro de densidad constante 2) Chorro de densidad variable 3) Chorro en estado supercrítico

Figura 16. Las primeras dos etapas consideran propiedades térmicas y transporte de gas ideal. La tercera etapa se desarrolla con todas las correcciones y modelos para gas real.

Ecuaciones de gobierno y metodología

El comportamiento no ideal de los fluidos supercríticos ha promovido un progreso significativo en conceptos, modelos y métodos para su tratamiento numérico. Por lo tanto, para predecir adecuadamente la hidrodinámica de flujo en condiciones supercríticas (principalmente el caso transcrito) es importante considerar modelos apropiados para la turbulencia,^{36,38,39} las propiedades térmicas y de transporte,^{3,4,40} las condiciones iniciales^{27,34,39,41,42} y de frontera.^{42,43,44} No obstante, las ecuaciones de gobierno siguen siendo válidas independientemente de la densidad del fluido. En esta capítulo se muestran las ecuaciones de gobierno, así como la metodología para dar solución a las mismas.

2.1 Ecuaciones

En un marco cartesiano tridimensional, se resuelven las ecuaciones compresibles de continuidad, Navier-Stokes y energía. Este conjunto de ecuaciones expresadas en la llamada forma rápida y conservativa^{46,47} se definen como sigue

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}_1}{\partial x_1} + \frac{\partial \mathbf{F}_2}{\partial x_2} + \frac{\partial \mathbf{F}_3}{\partial x_3} = \mathbf{S} \quad (2)$$

Donde, t es el tiempo y x_i se refiere a las tres componentes espaciales de la velocidad. Las variables \mathbf{U} y \mathbf{S} representan vectores de cinco componentes definidos como

$$\mathbf{U} = (\rho, \rho u_1, \rho u_2, \rho u_3, \rho e_t)^T \quad (3)$$

$$\mathbf{S} = (0, 0, 0, 0, 0)^T \quad (4)$$

El termino fuente \mathbf{S} es un vector nulo, ya que no se considera ninguna fuerza de cuerpo. La energía total (ρe_t) se divide en dos términos

$$\rho e_t = \rho[e_0 + \Delta e_{DP}] + \frac{1}{2}\rho(u_1^2 + u_2^2 + u_3^2) \quad (5)$$

donde, e_0 es la energía interna de gas ideal, y Δe_{DP} , es la función de desvío⁴⁸ a partir del estado de gas ideal. La suma de los dos términos cuantifica la energía interna de gas real del fluido. El segundo término, ρu_i^2 , es la energía cinética. \mathbf{F}_i representa los flujos, donde $\forall i \in \{1, 2, 3\}$ y para un fluido newtoniano están definidos por

$$F_i = \begin{bmatrix} \rho u_i \\ \rho u_i u_1 + p \delta_{i1} - \mu S_{i1} \\ \rho u_i u_2 + p \delta_{i2} - \mu S_{i2} \\ \rho u_i u_3 + p \delta_{i3} - \mu S_{i3} \\ (\rho e_t + p) u_i - \mu S_{ij} u_j - \lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} \end{bmatrix} \quad (6)$$

donde, μ and λ , representan la viscosidad dinámica y la conductividad térmica, respectivamente. S_{ij} es la componente deviatorica del tensor de deformación y es escrito como sigue

$$S_{ij} = \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) \quad (7)$$

2.2 Alternativas de simulación

Los flujos analizados en este trabajo, así como en la mayoría de las aplicaciones de ingeniería, son turbulentos. Por lo tanto, se requiere el uso de herramientas numéricas (con diferentes niveles de aproximación) para describir esta compleja interacción dinámica en el flujo, y así, dar solución a las ecuaciones de gobierno. Las alternativas se dividen básicamente en tres categorías:⁴⁹

- Promediada en el tiempo, Reynolds Average Navier-Stokes (RANS)
- Grandes escalas, Large-eddy Simulation (LES)
- Directa, Direct Numerical Simulation (DNS)

Cada alternativa presenta diferentes ventajas, pero dependiendo de necesidades del trabajo o la información que se pretenda recabar alguna de estas resultara la más apropiada. En este proyecto, se utiliza la simulación numérica de grandes escalas y se bebe a las características espacio-temporales de las estructuras. Primero, las estructuras bajo estudio tienen un tiempo de vida por lo que un promedio en el tiempo hace de la alternativa RANS algo inviable. La alternativa DNS también resulta inadecuada dados los altos números de Reynolds asociados a los experimentos (10^5), además de que las escalas espaciales asociadas a las estructuras de interés se encuentran muy por encima de las Kolomogorov. Así, la alternativa numérica de las grandes escalas resulta la herramienta más apropiada para el análisis de las estructuras de interés.

2.3 Simulación numérica de grandes escalas (LES)

En la simulación numérica de grandes escalas, las pequeñas y grandes escalas de la turbulencia son separadas. Numéricamente, las grande las escalas son resueltas de forma determinística. Para tal efecto se utiliza la función de filtrado espacial $G_\Delta(x)$ de

tamaño Δ . A partir de la aplicación del filtrado espacial a las ecuaciones de gobierno, aparece nuevos términos asociados a las escalas sub-malla (filtro espacial). Tales escalas son asociadas al tensor de escala sub-malla τ_{ij} . El tensor aparece en los flujos (\bar{F}_i). Entonces, la Ecu. 6 se reescribe como sigue

$$\bar{F}_i = \begin{bmatrix} \bar{\rho}\tilde{u}_i \\ \bar{\rho}\tilde{u}_i\tilde{u}_1 + \bar{p}\delta_{i1} - \tau_{ij} - (\bar{\mu} + \bar{\rho}v_t)\tilde{S}_{i1} \\ \bar{\rho}\tilde{u}_i\tilde{u}_2 + \bar{p}\delta_{i2} - \tau_{ij} - (\bar{\mu} + \bar{\rho}v_t)\tilde{S}_{i2} \\ \bar{\rho}\tilde{u}_i\tilde{u}_3 + \bar{p}\delta_{i3} - \tau_{ij} - (\bar{\mu} + \bar{\rho}v_t)\tilde{S}_{i3} \\ (\bar{\rho}e_t + \bar{p})\tilde{u}_i - \tilde{u}_j\tilde{S}_{ij} - \bar{\lambda}\frac{\partial\bar{T}}{\partial\tilde{x}_i} \end{bmatrix} \quad (8)$$

2.3.1 Modelo de Función-Espectral Selectiva (Selective Spectral-Function, SSF)

El tensor de escala sub-malla está definido por

$$\tau_{ij} = \bar{\rho}v_t\tilde{S}_{ij} \quad (9)$$

Donde, v_t es la viscosidad turbulenta y es modelada mediante el modelo submalla de función espectral-selectiva presentada por E. David.⁵⁰ La función se basa en el modelo original de función espectral de Métais y Lesieur,⁵¹ y Comte y Lesieur.⁵² La viscosidad turbulenta está dada por

$$v_t(\vec{x}, \Delta, t) = C_{sf}\Delta\sqrt{\tilde{F}_2(\vec{x}, \Delta, t)} \quad (10)$$

donde, C_{sf} es un coeficiente asociado a la constante de Kolmogorov (C_K) by $C_{sf} = 0.105C_K^{-2/3}$. En este trabajo $C_{sf}=0.104$. El termino $\tilde{F}_2(\vec{x}, \Delta, t)$ representa la función velocidad de 2° orden obtenida a partir del campo instantáneo de velocidad filtrado y este depende de promedio de los seis puntos o nodos adyacentes. Si el flujo no es la suficientemente turbulento o tridimensional el modelo de viscosidad turbulenta se apaga, manteniendo únicamente la viscosidad molecular. Diversos flujos turbulentos compresibles e incompresibles han sido modelados con este modelo sub-malla y han arrojado buenos resultados en comparación con datos experimentales.^{46,47,53,54} El número de Prandtl turbulento Prandtl es $Pr_T = 0.6$. Sin embargo, se pueden esperar valor local variables debido a las variaciones de las propiedades térmicas y de transporte del fluido.^{55,56} Aquí no se consideran los efectos de Soret y Dufour.

2.4 Métodos numéricos

Las ecuaciones de gobierno son resueltas en su forma curvilínea generalizadas (Sección 2.4.1). Estas son discretizadas espacialmente utilizando esquemas compactos de 6° orden (Sección 2.4.2), como se muestra en S. K. Lele.⁵⁷ La integración temporal es realizada de forma explícita mediante un método Runge-Kutta de 3° orden.⁵⁸ Como se

menciona en Visual and Gaitonde,⁵⁸ los esquemas compactos de alto orden son no disipativos y pueden presentar inestabilidad numérica. En ese sentido, un filtro⁵⁸ de 10° orden (Sección 2.4.3) es aplicado a las variables conservativas des pues de la etapa final en la integración de la solución numérica.

2.4.1 Ecuaciones en coordenadas generalizadas

En el código numérico utilizado las ecuaciones de gobierno son discretizadas y resueltas en coordenadas generalizadas. La adaptación se realiza por medio de una matriz jacobiana J . Con esto, se transforma una geometría compleja a una geometría ortogonal simple, pasando de un sistema coordenado cartesiano (x_1, x_2, x_3) a un sistema de coordenadas generalizadas (ξ_1, ξ_2, ξ_3) . Cada término de la matriz inversa (J^{-1}) de la matriz original (J) se expresa como una función analítica de la métrica $\partial x_i / \partial \xi_j$, la cual es calculada por medio de un esquema interno de primer orden. Así, la matriz J es calculada directamente de J^{-1} . Tal adaptación es necesaria dado el uso de una malla no uniforme en un espacio en un sistema de coordenadas cartesianas. Considerando lo anterior, la ecuación (2.1) se reescribir como la sigue

$$\frac{\partial \hat{U}}{\partial t} + \frac{\partial \hat{F}_1}{\partial \xi_1} + \frac{\partial \hat{F}_2}{\partial \xi_2} + \frac{\partial \hat{F}_3}{\partial \xi_3} = 0 \quad (11)$$

Además de que

$$\hat{U} = \frac{U}{\det(J)} \quad (12)$$

$$\hat{F}_1 = \frac{1}{\det(J)} \left[\left(\frac{\partial \xi_1}{\partial x_1} F_1 \right) + \left(\frac{\partial \xi_1}{\partial x_2} F_2 \right) + \left(\frac{\partial \xi_1}{\partial x_3} F_3 \right) \right] \quad (13)$$

$$\hat{F}_2 = \frac{1}{\det(J)} \left[\left(\frac{\partial \xi_2}{\partial x_1} F_1 \right) + \left(\frac{\partial \xi_2}{\partial x_2} F_2 \right) + \left(\frac{\partial \xi_2}{\partial x_3} F_3 \right) \right] \quad (14)$$

$$\hat{F}_3 = \frac{1}{\det(J)} \left[\left(\frac{\partial \xi_3}{\partial x_1} F_1 \right) + \left(\frac{\partial \xi_3}{\partial x_2} F_2 \right) + \left(\frac{\partial \xi_3}{\partial x_3} F_3 \right) \right] \quad (15)$$

donde U , es el vector de cinco componentes asociado al termino temporal.

2.4.2 Esquemas compactos (esquemas de alto orden)

La discretización espacial es realizada por medio del empleo de la aproximación de diferencias finitas. A partir del modelo de Visbal y Gaitonde,⁵⁸ la discretización con esquemas compactos se define como sigue

$$\alpha \phi'_{i-1} + \phi'_{i-1} + \alpha \phi'_{i-1} = b \frac{\phi_{i+2} - \phi_{i-2}}{4h} + a \frac{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}}{2h} \quad (16)$$

Aquí, $h = x_{i+1} - x_i$, $\alpha = 0.333$, $a = 1.555$ y $b = 1.666$. Tales coeficientes están asociados a un esquema de discretización espacial de sexto orden. Es importante

mencionar que sin importar el orden solo se utiliza la Ecu. 16. Un orden de exactitud mayor o menor, se verá reflejado como un cambio en los coeficientes de dicha ecuación. Los parámetros ϕ y ϕ' , representa cualquier cantidad escalar discreta puntual y su derivada espacial, respectivamente. En la frontera, no es posible utilizar métodos de diferencias centradas, por lo que se utilizan diferentes funciones para los nodos de esa región (nodo 1, 2, $i-1$ e i). Para el nodo 1 y 2 se tiene

$$\phi'_1 + \alpha_1 \phi'_2 = \frac{1}{h} (a_1 \phi_1 + b_1 \phi_2 + c_1 \phi_3 + d_1 \phi_4 + e_1 \phi_5) \quad (17)$$

$$\alpha_2 \phi'_2 + \phi'_2 + \alpha_2 \phi'_3 = \frac{1}{h} (a_2 \phi_1 + b_2 \phi_2 + c_2 \phi_3 + d_2 \phi_4 + e_2 \phi_5) \quad (18)$$

Los coeficientes de cada ecuación se presentan en Gaitonde y Visbal.⁵⁸

2.4.3 Filtro matemático

La discretización espacial con esquemas compactos, así como otros esquemas centrados, es dispersiva o no disipativo por lo que es susceptible a inestabilidades numéricas. En ese sentido, es necesario el uso de un disipador artificial o filtro matemático. A través de la adición de un término a las ecuaciones de gobierno es posible suprimir las inestabilidades numéricas. Para el uso de esta técnica se utiliza el modelo presentado por Lele,⁵⁷ y Visbal y Gaitonde⁵⁸

$$\alpha_f \hat{\phi}_{i-1} + \hat{\phi}_i + \alpha_f \hat{\phi}_{i+1} = \sum_{n=0}^N \frac{a_n}{2} (\phi_{i+1} - \phi_{i-1}) \quad (19)$$

donde ϕ denota la componente del vector solución y $\hat{\phi}$ denota la componente filtrada. La Ecu. 19 da como resultado una ecuación de $2N$ orden sobre una plantilla (stencil) de $2N+1$ puntos. Los coeficientes a_0, a_1, \dots, a_{n-1} y a_n , se obtienen en términos de α_f con el análisis de las series de Fourier y Taylor. El parámetro variable α_f satisface la desigualdad $-0.5 < \alpha_f \leq 0.5$. Altos valores de α_f refieren a un filtro menos disipativo. En este trabajo se utiliza un valor de 0.4. El orden de precisión es degradado en los puntos cercanos a la frontera. Sobre las fronteras (primer y último nodo o punto) del dominio, no se aplica el filtro. El filtro se elige normalmente para que sea al menos dos órdenes de precisión más alto que el esquema de diferencias. El código de simulación de alta presión utiliza esquemas compactos de sexto orden combinado con un filtro matemático de décimo orden. La integración temporal es realizada por medio de un método de Runge-Kutta explícito de tercer orden.⁵⁸

Propiedades térmicas y de transporte

La precisión de los trabajos numéricos depende en gran medida de los modelos utilizados para predecir las propiedades térmicas y de transporte. Por lo tanto, la selección de dichos modelos, resulta un paso importante para la adecuada descripción del flujo.

3.1 Propiedades térmicas de gas real

A bajas presiones, el efecto de la presión sobre la variación de las propiedades de un fluido es casi nulo y este se desprecia, quedando únicamente en función de la temperatura. A presiones moderadas o elevadas (en comparación con el punto crítico termodinámico), la presión ya tiene efectos importantes sobre las propiedades térmicas de un fluido. En esta sección se define la ecuación de estado para modelar el comportamiento p - ρ - T para un gas real. En la Fig. 17, se muestran superficies de densidad y capacidad térmica a presión constante del nitrógeno.

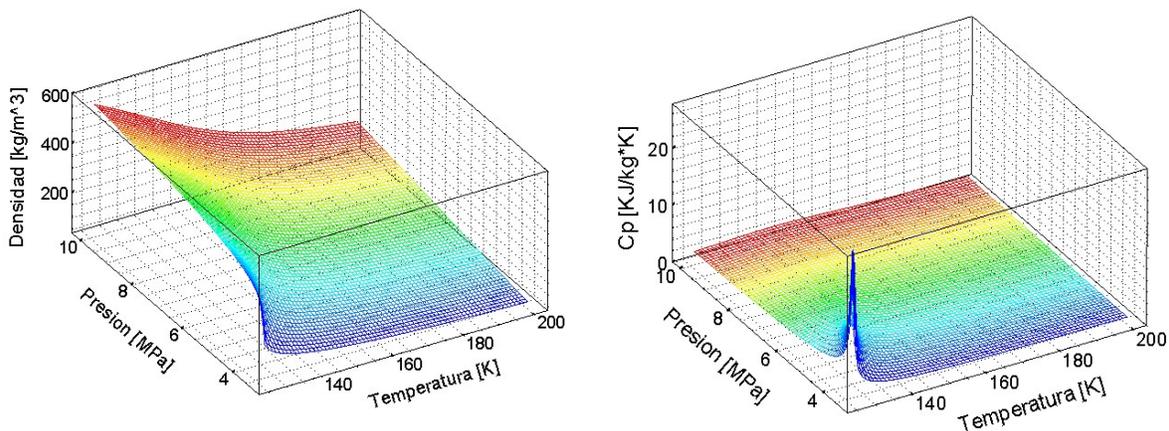


Figura 17. En el estado supercrítico, las propiedades térmicas presentan cambios significativos principalmente cerca de su punto crítico (N_2 , $T_{cr} = 126.2 \text{ K}$ y $P_{cr} = 3.39 \text{ MPa}$).

3.1.1 Ecuación de estado

Las condiciones supercríticas implican interacciones moleculares que divergen de las capacidades del comportamiento del gas ideal, por lo que es necesario considerar otras opciones para modelar el comportamiento p - ρ - T . Actualmente, se dispone de varias ecuaciones polinómicas, analíticas y no analíticas.^{3,4,40} En este trabajo, se utiliza la ecuación de estado de Soave-Redlich-Kwong⁵⁹ (*SRK*), Ecu. 20. No obstante, el código numérico cuenta también con la ecuación de estado de Peng-Robinson^{3,4} (*PR*). Aunque ambas ecuaciones tienen un buen desempeño (con errores de exactitud menores al 10%) las simulaciones numéricas se realizan únicamente con la ecuación de *SRK*. Esto se deba a que dicha ecuación funciona mejor abajas temperaturas.

$$p = \frac{\rho R_g T}{1 - b\rho} - \frac{a\rho^2}{(1 - \delta_1 b\rho)(1 - \delta_2 b\rho)} \quad (20)$$

$$a = 0.42748 \frac{R_g^2 T_{cr}^2}{p_{cr}} \alpha(T) \quad (21)$$

$$b = 0.08664 \left(\frac{R_g^2 T_{cr}}{p_{cr}} \right) \quad (22)$$

$$\alpha(T) = [1.0 + f(\omega)(1.0 - T_r^{0.5})]^2 \quad (23)$$

$$f(\omega) = (0.48 + 1.574\omega - 0.176\omega^2) \quad (24)$$

donde, los parámetros a y b representan los efectos moleculares de las fuerzas de repulsión (co-volumen) y atracción, respectivamente. Al considerar nulos estos parámetros (a y b igualándolos a cero) se obtiene la ecuación de estado de gas ideal ($p = \rho R_g T$). El término T_r , es la temperatura reducida que relaciona la temperatura local y la crítica ($T_r = T/T_{cr}$), $\alpha(T)$ es un factor que depende de la temperatura reducida y ω , es el factor acéntrico, el cual cuantifica la no esfericidad de una molécula ($\omega_{nitrogen} = 0.037$). La constante aparente del gas es R_g . Esta forma general de la ecuación presenta dos constantes, δ_1 and δ_2 , las cuales son iguales a 1 y 0, respectivamente.⁶⁰ Para calcular la densidad de un fluido, la ecuación de estado se utiliza en su forma cúbica. En este trabajo la ecuación de tercer grado para la densidad se resuelve mediante el método de Cardano (Apéndice A).⁶¹

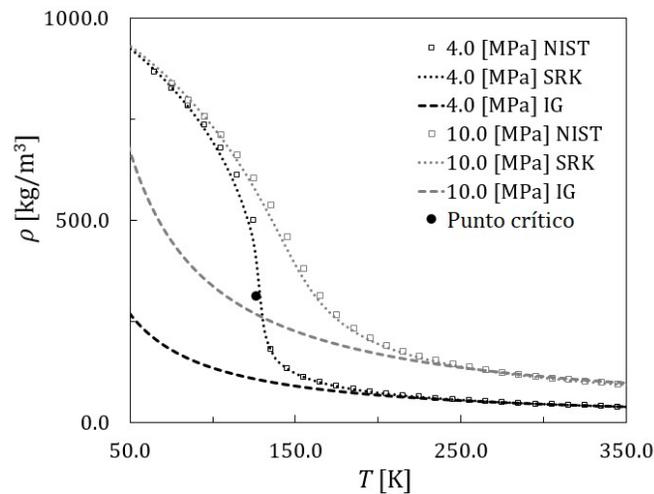


Figura 18. Contornos de densidad de nitrógeno en función de la temperatura a 4.0 y 10.0 MPa. Se incluyen las predicciones de gas ideal (IG). A 4.0 MPa, cerca del punto crítico, una variación de 5 K aumenta la densidad de 180.0 a 500.0 kg/m³.

Los experimentos de chorros transcrito y supercríticos involucran fluidos como helio, nitrógeno, oxígeno, hidrógeno, dióxido de carbono o mezclas de estos en diferentes proporciones. En este trabajo, las simulaciones se realizan considerando el nitrógeno como fluido de trabajo. Las predicciones de densidad a través de las ecuaciones de estado de gas real y gas ideal, se muestran en la Fig. 18. Los datos experimentales se extraen de la base de datos del Instituto Nacional de Estándares y Tecnología (*NIST*,⁶² por sus siglas en inglés). La ecuación de *Soave-Redlich-Kwong* presenta buenos resultados en comparación con los datos del *NIST*. Las curvas obtenidas a partir de los modelos de gas real e ideal son muy similares a temperaturas por encima de los 250 K. A temperaturas más bajas las predicciones son muy diferentes, principalmente cerca del punto crítico.

3.1.2 Otras propiedades térmicas

Así como en la ecuación de estado, es necesario obtener expresiones corregidas o modificadas para modelar el comportamiento p - ρ - T , también se deben corregir los modelos con los que se predicen las propiedades térmicas. Estas correcciones se realizan a partir de la función de desvío y la ecuación de estado. Así, la energía interna (e) de gas real se define como

$$e = e_0 + \Delta e_{DP} \quad (25)$$

$$\Delta e_{DP} = \int \left(\frac{p}{\rho^2} - \frac{T}{\rho^2} \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_\rho \right) d\rho \quad (26)$$

donde e_0 es la energía interna de gas ideal y Δe_{DP} es la función de desvío. Utilizando la Ecu. 20, la energía interna y la capacidad térmica a volumen constante, se definen como sigue

$$e = e_0 + \left(T \frac{d\alpha}{dT} - \alpha \right) \left[\frac{1}{(\delta_1 - \delta_2)b} \left(\ln \left(\frac{1 + \delta_1 b \rho}{1 + \delta_2 b \rho} \right) \right) \right] \quad (27)$$

$$c_v = c_{v,0} + \left[\frac{T}{(\delta_1 - \delta_2)b} \left(\frac{d^2 \alpha}{dT^2} \right) \left(\ln \left(\frac{1 + \delta_1 b \rho}{1 + \delta_2 b \rho} \right) \right) \right] \quad (28)$$

Aquí, el término $c_{v,0}$ representa la capacidad térmica específica a volumen constante de gas ideal y se calcula con la ecuación polinómica del Centro de Investigaciones en Termodinámica (*TRC*, Thermodynamics Research Center³). La capacidad térmica específica isobárica (c_p) es definida a partir de la c_v y la ecuación de estado. Entonces, la c_p y la velocidad del sonido (c), se definen como

$$c_p = c_v + \frac{T}{\rho^2} \left[\left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_\rho^2 / \left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_T \right] \quad (29)$$

$$c^2 = \frac{c_p}{c_v} \left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_T \quad (30)$$

Estas ecuaciones, junto con la ecuación de estado y las propiedades críticas, describen la termodinámica de gas real en un fluido supercrítico. El procedimiento completo para la obtención de estas propiedades térmicas de gas real se muestra en el [Apéndice B](#).

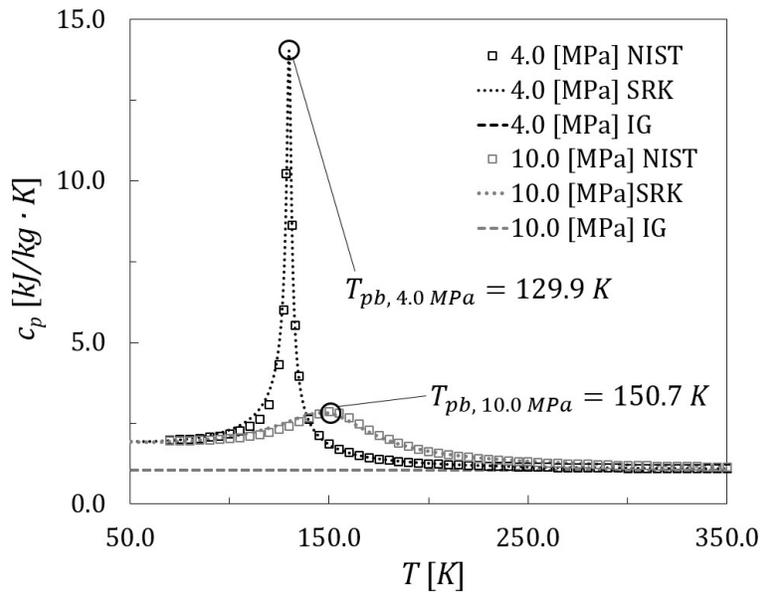


Figure 19. Curvas de capacidad térmica isobárica a 4.0 y 10.0 MPa. Las predicciones de gas ideal (IG) se incluyen. La magnitud y rapidez de crecimiento de c_p es más notorio cuando la presión se acerca a la condiciones críticas (N_2 , $T_{cr} = 126.2 \text{ K}$ y $P_{cr} = 3.39 \text{ MPa}$).

La capacidad térmica isobárica del nitrógeno, se muestran en la [Fig. 19](#). Los resultados numéricos y los experimentales del NIST, muestran una buena semejanza. De nuevo, a partir de una temperatura mínima de 250 K, las curvas de gas ideal y real colapsan en la misma curva. A temperaturas inferiores, el valor de c_p difiere del comportamiento de gas ideal.^{3,4} Cerca de las condiciones críticas, la c_p se incrementa de forma significativa y se debe a que grados de libertad de la molécula del gas son activados. Lo anterior, le permite al fluido almacenar energía en forma diferente a la traslacional, es decir, rotacional o vibracional. En la [Fig. 19](#), se muestra que los máximos valores en las curvas de c_p , se alcanzan al cruzar la temperatura de pseudo-ebullición (T_{pb}). Banuti y Hannemann,⁶³ definen este término como sigue

$$T_{pb} = T_{cr} (1 + \ln(p_{pb}/p_{cr})/5.55) \quad (31)$$

Aquí, p_{pb} representa la presión de pseudo-ebullición, y la constante 5.55, es una constante de integración obtenida por Span et al.⁶⁴ para el nitrógeno. En la Fig. 19, se observa que los valores máximos de decrecen conforme la presión aumenta. Las temperaturas de pseudo-ebullición también se muestran en la Fig. 19.

3.1.3 De propiedades conservativas a primitivas (p, T)⁶⁵

Las ecuaciones de conservación se tratan y resuelven de forma conservativa, por tanto, es necesario definir como pasar de unas a otras al momento de presentar los resultados. Así, se trabaja con variables más sencillas como son, la presión y temperatura. A diferencia de la presión, la propiedad de temperatura no cuenta con una ecuación explícita $T = T(p, \rho)$. Por lo tanto, es necesario utilizar un método numérico para su obtención.

En este trabajo se utiliza el método iterativo de Newton para obtener con un cierto nivel de precisión el valor de la temperatura. Ahora, si estimamos el error como

$$f(T_a) = e(T_a, \rho) - e(T, \rho) \quad (32)$$

Donde, T_a es la aproximación de la temperatura exacta (T). La energía interna que pertenece a la solución de $e(T, \rho)$, se llamada e_{ob} (energía interna objetivo), de tal forma que

$$f(T_a) = e(T_a, \rho) - e_{ob} \quad (33)$$

La derivada de f con respecto a la temperatura está directamente relacionada con la capacidad térmica isocórica (c_v), como sigue

$$\left. \frac{\partial e}{\partial T} \right|_{\rho} = c_v \quad (34)$$

El algoritmo iterativo de Newton se aplica de la siguiente forma

$$T_a^{m+1} = T_a^m - \frac{f(T_a^m)}{c_{v,a}^m} \quad (35)$$

donde, $c_{v,a}^m$ y T_a^m , son la capacidad térmica isocórica y la temperatura aproximadas obtenidas después de m pasos del procedimiento iterativo respectivamente. El proceso iterativo se detienen después de n pasos, un vez que el siguiente criterio se satisface

$$\frac{|f(T_a^m)|}{|e_{ob}| + 1} = \frac{|e(T_a^n, \rho) - e_{ob}|}{|e_{ob}| + 1} \leq \epsilon_T \quad (36)$$

donde, ϵ_T se fija a 10^{-12} y n es comúnmente menor a 5. Ya que $|e_{ob}|$ puede llegar a valer 0, se le agrega una unidad al denominador al error relativo para prevenir una división entre cero. Para la mayor parte de las temperaturas calculadas, e_{ob} es un numero grande y $|e_{ob}|$ es mucho mayor la unidad. Por tanto, $|e_{ob}| + 1 \approx |e_{ob}|$. Un valor inicial de 300 K funciona bien. Sin embargo, se recomienda usar el valor de la temperatura en el en la iteración previa. Una vez que se calcula la temperatura, se calcula la presión con la ecuación de estado. Cabe mencionar que la obtención de las variables conservativas se definió en el [Capítulo 2](#). Lo anterior, a partir de las propiedades primitivas de presión temperatura y la velocidad.

3.2 Propiedades de transporte

De la misma forma en que se modifican los modelos de gas ideal para las propiedades térmicas, también es necesario utilizar modelos corregidos para el tratamiento de las propiedades de transporte de gas real. En este trabajo, la viscosidad dinámica (μ) y la conductividad térmica (λ), se calculan mediante los métodos empíricos de Chung et al.⁶⁶

3.2.1 Viscosidad dinámica

La viscosidad (μ) se diferencia de otras propiedades al ser medida a través de experimentos en no equilibrio. Sin embargo, al igual que la densidad, reflejan macroscópicamente el efecto de las interacciones moleculares. En otras palabras, ambas propiedades están definidas a partir del estado termodinámico del fluido y puede usarse para definir el estado del material. En ese sentido, Chung et al.⁶⁶ utiliza las propiedades térmicas del fluido, además de factores empíricos para corregir sus modelos iniciales de baja presión.² El modelo de Chung para la viscosidad se define como

$$\mu = \mu^* \frac{36.344(MT_{cr})^{1/2}}{v_{cr}^{2/3}} \quad (37)$$

Donde, μ^* es un factor empírico de corrección, M es la masa molecular y v_{cr} es el volumen molar crítico. A través del modelo de Chung se obtienen errores de exactitud menores al 4%, tanto en sustancias polares, como no polares.

3.2.2 Conductividad térmica

En el estado supercrítico, la densidad del fluido presenta cambios drásticos en la cercanía del punto crítico. Por lo tanto, el uso la densidad en los modelos de predicción de conductividad térmica (λ) de gas real resulta importante. Esto mismo sucede con el método de Chung, pero a diferencia de otros métodos, este se divide en dos términos. Las propiedades de transporte como la viscosidad y difusividad másica, están asociadas a la translaciones moleculares (*tras*). Sin embargo, la λ también almacena energía de forma rotacional y vibracional (*inter*). Tal condición, se considera en el modelo de Chung, a través de un término translacional y otro intermolecular. Así, el modelo se define como

$$\lambda = \lambda_{trans} + \lambda_{inter} \quad (38)$$

$$\lambda = \frac{31.2\mu_0\Psi}{M} (G_2^{-1} + B_6y) + (qB_7y^2T_r^{1/2}G_2) \quad (39)$$

donde, μ_0 es la viscosidad dinámica a baja presiones. Los términos empíricos G_i y B_i ($i=1-7$), y , Ψ y q están en función de la ρ , T , p_{cr} , T_{cr} , ω y el momento dipolar del fluido.

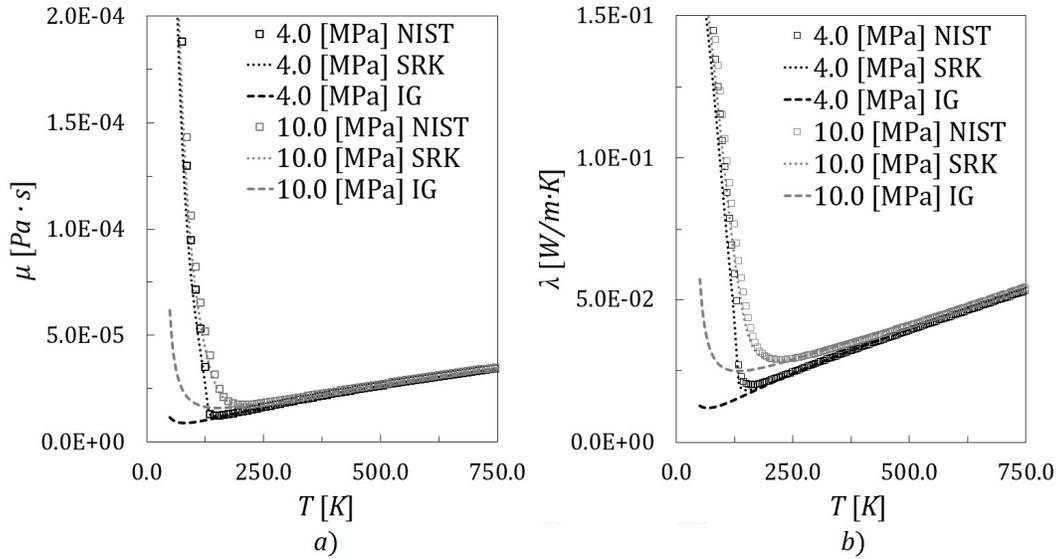


Figura 20. Viscosidad dinámica (a) y conductividad térmica (b) del nitrógeno a 4.0 y 10.0 MPa. Se incluyen las predicciones del gas ideal (IG).

En la Fig. 20, se muestran las predicciones de los modelos utilizados y se observan buenos resultados en comparación con datos experimentales del *NIST*. A bajas temperaturas (altas densidades) las propiedades cambian súbitamente y se decremento se debe a la reducción de la cohesividad molecular. Para altas temperaturas, el cambio es más suave y el incremento se debe a las colisiones intermoleculares. Una vez que las propiedades térmicas y de transporte se validaron de forma independiente al código, estas se implementaron en él, junto con las condiciones iniciales y de frontera, para así realizar las simulaciones de los chorros en el estado supercrítico.

Configuración, condiciones iniciales y de frontera

El estudio de los chorros en el estado supercrítico cuenta con algunos trabajos experimentales de referencia. Uno estos es el trabajo de Mayer et al., el cual es frecuentemente reproducido de forma experimental y numérica. Particularmente, se retoman dos casos clásicos de este autor, uno transcrítico y otro supercrítico. Tales casos se utilizan aquí para estudiar las estructuras de tipo dedo. En este capítulo, además de mostrar las condiciones experimentales de Mayer et al.²¹ y su extrapolación a nuestro dominio computacional. Al final, se dan más detalles acerca del dominio, siendo complementados con el estudio de independencia de la malla.

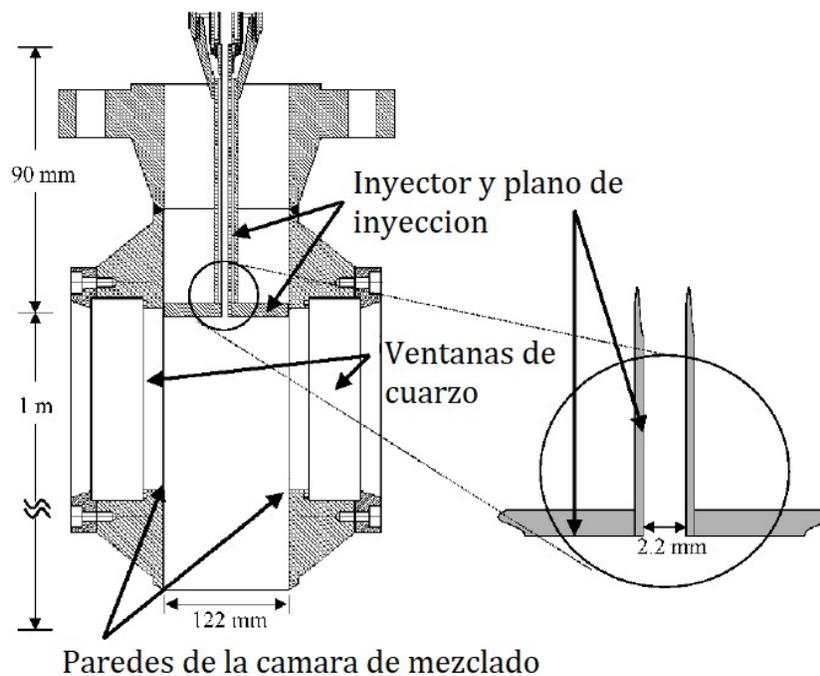


Figura 21. Cámara pruebas o de mezclado utilizada en el experimento de Mayer. La longitud del inyector asegura un flujo desarrollado en la inyección. No obstante, se especula acerca de fallas en el sistema de aislamiento de mismo.³⁹

4.1 Banco de pruebas y experimento de Mayer

La configuración numérica dispuesta en este trabajo, corresponde a los experimentos desarrollados por Mayer et al. Aunque originalmente son once casos, solo se consideran dos: los casos 3 y 4, siendo transcrítico y supercrítico, respectivamente. El arreglo consiste en una cámara de mezclado de acero inoxidable, véase Fig. 21. En la parte superior de la cámara, y en posición vertical, se localizaba un inyector con 2.2 mm de

diámetro (D_{in}) y una longitud de 90 mm. Del inyector, emergían chorros redondos de nitrógeno a diferentes presiones y temperaturas. En la Fig. 22, se muestra un diagrama con las condiciones de inyección para ambos casos. El fluido ambiente (estático), también era nitrógeno. La temperatura y presión ambiente, fueron las mismas para todos los experimentos, $T_{amb} = 298 K$ y $p_{amb} = 3.9 MPa$, respectivamente. En la Tabla I, se muestran algunos parámetros dimensionales y adimensionales de los experimentos considerados.

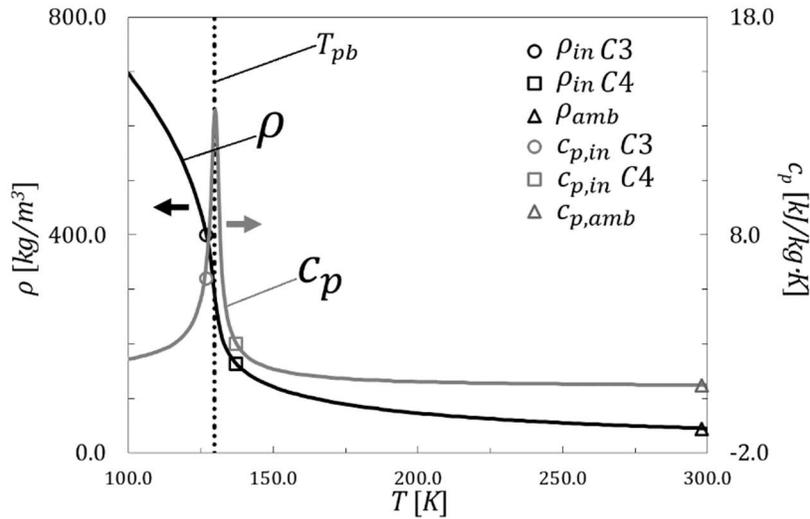


Figura 22. Condiciones de inyección de Mayer et al.²¹, para el chorro transcrito y supercrítico. La temperatura de pseudo-ebullición a 3.9 MPa es 129.7 K. El valor máximo local de la capacidad térmica isobárica se superpone máximo del gradiente de densidad.

Tabla I. Experimentos de Mayer

Caso	$U_{in}, m/s$	T_{in}, K	ρ_{in}/ρ_{amb}	$Re = \rho_{in}U_{in}D_{in}/\mu_{in}$	$Fr^* = \rho_{in}U_{in}^2/(gD_{in} \rho_{in} - \rho_{amb})$
TC	4.9	126.9	9.6	1.7×10^5	1.2×10^3
SC	5.4	137.0	3.6	1.6×10^5	1.8×10^3

* Extraído de Chen y Rodi¹²

A partir de aquí, las componentes espaciales cambian de (x_1, x_2, x_3) a (x, y, z) y las componentes de velocidad cambian de (u_1, u_2, u_3) a (u, v, w) .

4.2. Configuración numérica

Las simulaciones numéricas se realizaron en un dominio computacional tridimensional, en un marco de referencia ortogonal cartesiano. La dirección principal del flujo es paralelo a la dirección x en el dominio. El dominio computacional se realiza a partir de una malla estructurada, con longitudes definidas por $L_x \times L_y \times L_z$, como se muestra en la Fig. 23a. Las longitudes adimensionales son $24D_{in} \times 8D_{in} \times 8D_{in}$. Por simplicidad y ahorro de recurso computacionales solo se modela la región cercana al

punto de inyección. Para asegurar la independencia de los resultados del mado empleado en las simulaciones, se consideran tres mallas: burda (3.3×10^6 nodos), intermedia (4.5×10^6 nodos) y fina (5.6×10^6 nodos).

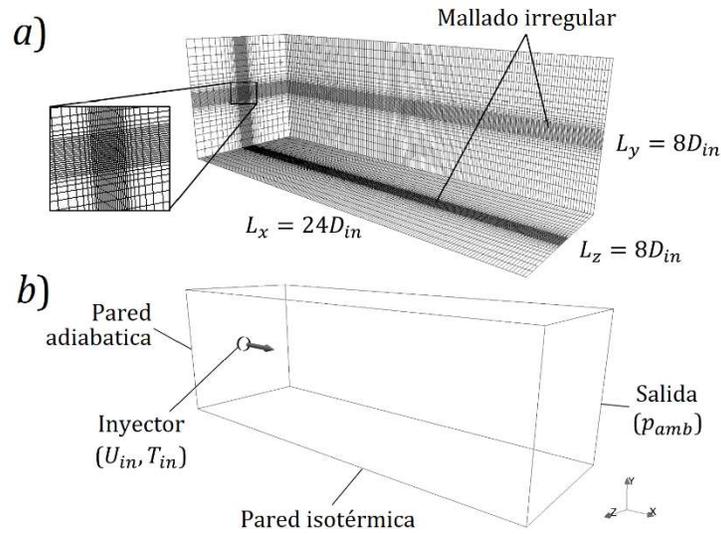


Figura 23. En el dominio computacional, se implementa una malla irregular en la región de la capa de corte (a). Los perfiles de velocidad (U_{in}) y temperatura (T_{in}) se definen en el plano de entrada mediante un perfil Gaussiano (b).

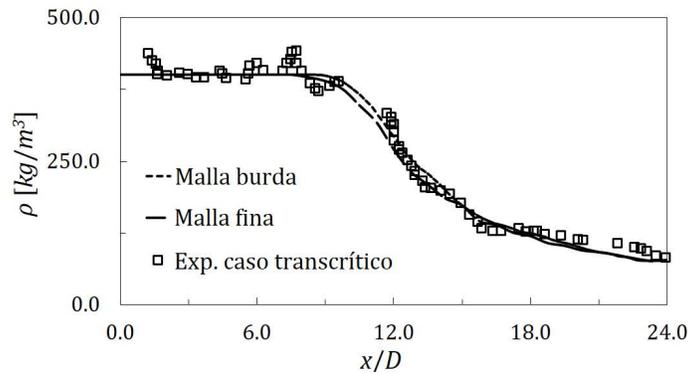


Figura 24. Perfiles de densidad promedio a lo largo de la línea central del chorro transcritoico. Únicamente se muestran las mallas fina y burda, ya que la intermedia y la fina son muy similares.

4.2.1 Estudio de independencia de malla

El caso transcritoico es utilizado en el estudio de independencia de malla, dado que presenta la mayor relación de densidad (Tabla I). En la Fig. 24, se observa que las mallas dispuestas para el estudio de independencia, presentaron un buen desempeño en comparación con los datos experimentales. Las variaciones máximas obtenidas fueron de $\pm 15.0\%$ para el caso de la malla burda. Tanto el chorro transcritoico, como el chorro supercritoico, se simularon con la malla más fina, esto con la intención de capturar los procesos clave asociados a la formación de las estructuras de interés. Cabe mencionar que, para los nodos dispuestos en la dirección normal al flujo, la malla se implementó

con una distribución irregular o no uniforme. Así, la mayor densidad de nodos se localiza en la región del cortante. En la dirección axial. La distribución de nodos es uniforme. En la dirección axial, las distribución uniforme presento una longitud constante de $0.075D_{in}$ ($165 \mu m$). Para la distribución no es uniforme en la dirección normal al flujo, la longitud mínima obtenida entre los nodos localizados en la capa cortante fue de $0.019D_{in}$ ($42 \mu m$) y la longitud máxima obtenida entre los nodos localizados cerca de las paredes del dominio fue de $0.15D_{in}$ ($320 \mu m$). Aunque, la malla presenta distribuciones diferentes para los nodos dispuestos en la dirección axial y para las direcciones normales al flujo, las longitudes mínimas de espaciamiento obtenidas entre los nodos se encuentran un orden de magnitud por debajo de las longitudes de escala promedio⁶⁷ presentes en el caso transcrito (ver Fig. 25). Lo anterior permite obtener información relevante en la región del cortante, así como de los fenómenos que se presenten en dicha zona y también valida el uso del mallado implementado en la simulación.

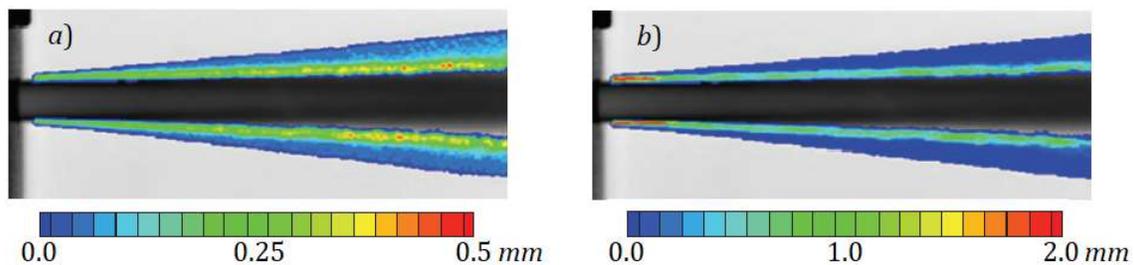


Figura 25. Longitudes de escala promedio en la dirección radial (a) y axial (b) para el caso del chorro transcrito.⁶⁷

El dominio computacional cuenta con condiciones de frontera apropiadas para ecuaciones compresibles de gas real (Sección 4.4), las cuales se basan en los trabajos desarrollados por Poinot and Lele,⁴³ y O’kongo y Bellan.⁴⁴ Los límites del dominio se definen como paredes deslizantes e isotérmicas, como se muestra en la Fig. 23b. El plano donde se inyecta el fluid, se considera como una pared adiabática y no deslizante. Al final del dominio, se considera un flujo de salida semi-reflectante con una presión de salida impuesta, en esta caso $3.9 MPa$.

4.3 Perfil velocidad y temperatura

Un perfil de entrada de tipo sombrero de copa (top-hat) es utilizado para definir los perfiles de velocidad subsónica y de temperatura mediante una Función Error Gaussiana. En la Fig. 26 se presentan los perfiles de velocidad y temperatura empleados en la simulación del caso transcrito. Ahí, al perfil de velocidad presenta una forma convexa dado que la velocidad en el centro del dominio es mayor que la del ambiente mientras que el perfil de temperatura es cóncavo dado que la temperatura de inyección ($T_{in,C3}=126.9 K$) es menor a la del ambiente ($298.0 K$). Las curvas para el caso supercrítico presentan el mismo comportamiento, pero a diferentes condiciones de inyección para la velocidad y temperatura. Es importante mencionar que el perfil de densidad es más pronunciado que el perfil de temperatura. Lo anterior, se debe a la

cercanía con el punto crítico termodinámico. A condiciones de presión de 3.9 MPa, cruzando la temperatura de pseudo ebullición, la densidad se eleva $\approx 64 \text{ kg/m}^3$ por cada incremento de un 1K. En las Figs. 27 y 28, se muestran las vistas isométricas de los perfiles de velocidad y temperatura.

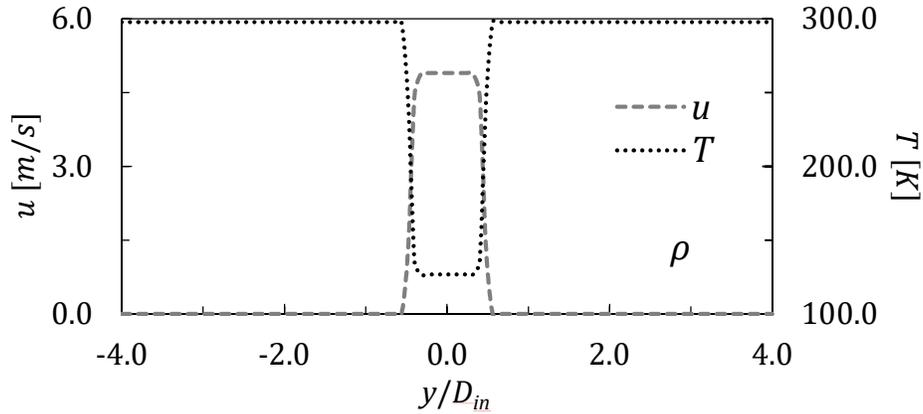


Figura 26. Perfil de velocidad y temperatura empleados en el chorro transcrito.

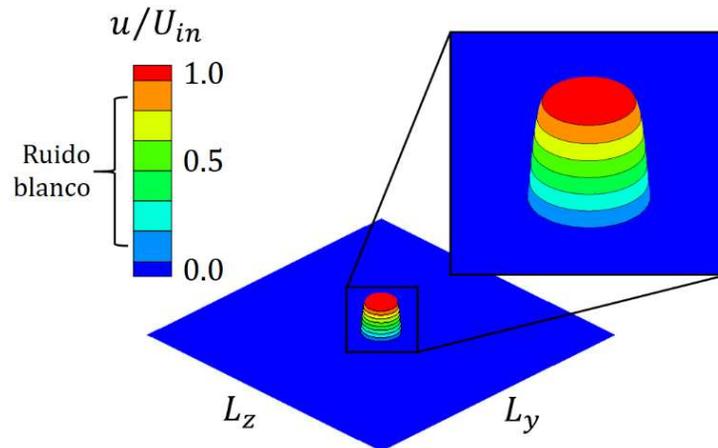


Figura 27. Isométrico del perfil de velocidad cerca del plano de inyección (vista parcial superior).

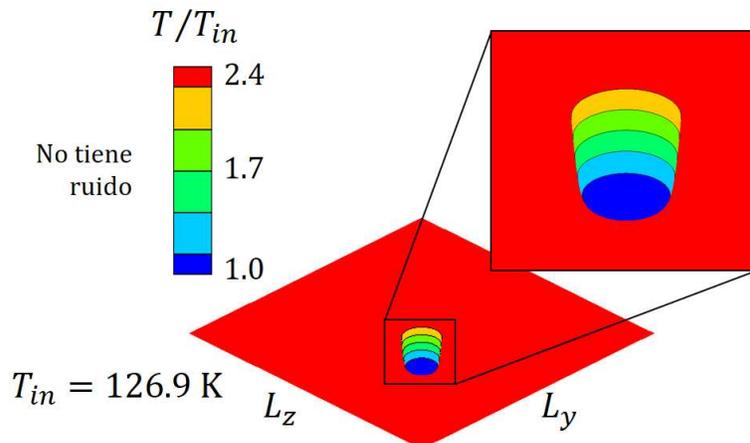


Figura 28. Isométrico del perfil de temperatura en el plano de inyección (vista parcial inferior).

Para lograr la transición a la turbulencia se añade una señal de ruido blanco sobre el perfil de velocidad.^{27,53} Como se muestra en la Fig. 29, el ruido blanco solo se aplica en la región del cortante del chorro. El rango de aplicación del ruido considerando a partir de un perfil adimensional de velocidad es entre $0.1 \leq u/U_{in} \leq 0.9$. En esta región se agregan valores aleatorios a las tres componentes de velocidad. Con esto, se promueven variaciones de velocidad máximas de $\pm 10.0\%$ de U_{in} . En la Fig. 29, se muestran dos perfiles de velocidad con y sin ruido (el ruido se genera en la región mencionada). A través del ruido blanco se genera inestabilidades en las pequeñas escalas sin alguna frecuencia en particular la cual promueve que la frecuencia fundamental emerja de forma natural. La adición de números aleatorios, solo se realiza para el perfil de velocidad ya que no hay fluctuaciones en la temperatura hasta antes de salir del inyector.

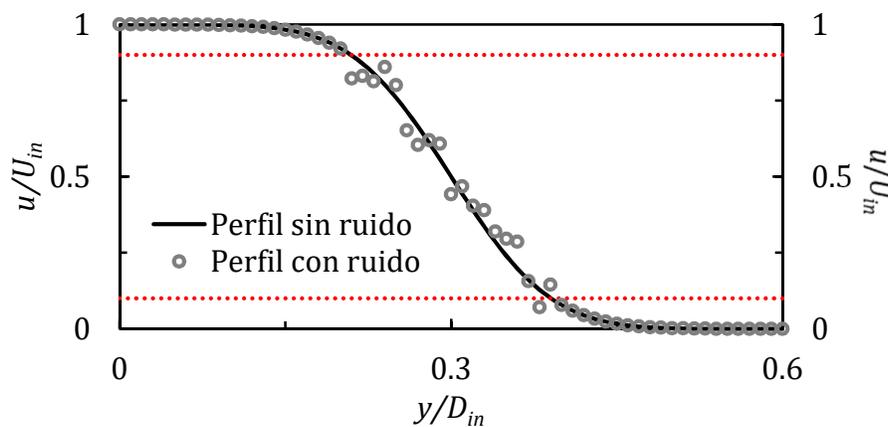


Figura 29. Perfil radial de velocidad promedio adimensional con y sin ruido.

4.4 Condiciones de frontera características (CFC)

Las condiciones de frontera juegan un rol crucial para la adecuada obtención de la solución de las ecuaciones de gobierno. Dado que la mayoría de los problemas de interés implican flujos complejos, la solución de las ecuaciones y sus fronteras suele ser numérica y no analítica. De los diversos métodos de las condiciones de frontera que se mencionan en la literatura, nos centramos en uno utilizado eficazmente en simulaciones numéricas compresibles de Navier-Stokes, el cual métodos de diferencias finitas de alto orden y no comprometa la estabilidad numérica. Esto último es de principal interés dada la sobre carga numérica que implica en las fronteras, ya que el tratamiento numérico de propiedades térmicas de gas real es más complejo que el de gas ideal. Basados en estas consideraciones, las condiciones de frontera características Poinot y Lele⁴³ son el candidato ideal para su aplicación a flujos de gas real. El método se basa en un conjunto de ecuaciones inviscidas unidimensionales locales (*LODI*, por sus siglas en inglés), descritas en la frontera en forma característica. La variación de la amplitud de la onda en la formulación de la onda característica se calcula de manera consistente para satisfacer las condiciones de contorno deseadas. Las ecuaciones *LODI* representan la mayor parte del comportamiento en las fronteras, de modo que las condiciones viscosas se pueden aplicar por separado. Estas condiciones de frontera características se basan en el trabajo de Okong'o y Bellan.⁴⁴

4.4.1 CFC de gas real⁴⁴

Las ecuaciones de conservación son las mismas que para gas ideal

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j}{\partial x_j} = 0 \quad (40)$$

$$\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j + p \delta_{ij})}{\partial x_j} = \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} \quad (41)$$

$$\frac{\partial(\rho e_t)}{\partial t} + \frac{\partial((\rho e_t + p)u_j)}{\partial x_j} = \frac{\partial(\tau_{ij}u_i)}{\partial x_j} - \frac{\partial q_j}{\partial x_j} \quad (42)$$

Adicionalmente, τ_{ij} es el tensor de esfuerzos viscosos

$$\tau_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) \quad (43)$$

Ahora se definen algunas propiedades de gas real. La presión se presenta en función del volumen específico (o densidad) y la temperatura, $p(v, T)$ o $p(\rho, T)$. Las relaciones termodinámicas que se analizan a continuación pueden calcularse utilizando una ecuación de estado (ver [Apéndice B](#)). La velocidad del sonido es

$$c_s = \sqrt{\frac{1}{\rho \beta_s}} \quad (44)$$

donde β_s es la compresibilidad isotrópica, la cual está relacionada con la compresibilidad isotérmica β_T

$$\beta_T = \frac{1}{\rho \left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_T} \quad (45)$$

mediante la siguiente ecuación

$$\beta_s = \beta_T - \frac{T \alpha_\rho^2}{\rho c_p} \quad (46)$$

y

$$\alpha_\rho = \frac{\left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_\rho}{\rho \left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_T} \quad (47)$$

La capacidad térmica específica volumen constante se define como

$$c_v = c_p - \frac{T \left(-\frac{(\partial p / \partial T)_v}{v(\partial p / \partial v)_T} \right)^2}{\rho \beta_T} \quad (48)$$

Para obtener las condiciones de frontera características se analizan las ecuaciones de Euler como en Poinsoy y Lele.⁴³ La forma conservativa de las ecuaciones de Euler se obtiene al igual el lado derecho de las Ecu. 38-40 a cero. Para realizar la descomposición de las ondas se utiliza la forma primitiva de las ecuaciones de Euler y el conjunto de variables primitivas (ρ, u_1, u_2, u_3, p) . La variable e se cambia por p

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + u_j \frac{\partial \rho}{\partial x_j} + \rho \frac{\partial y}{\partial x_j} = 0 \quad (49)$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \rho \frac{\partial p}{\partial x_i} = 0 \quad (50)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + u_j \frac{\partial p}{\partial x_j} + \rho c^2 \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = 0 \quad (51)$$

donde c es la velocidad del sonido definida por c_s . EL conjunto de ecuaciones es el mismo que para el de gas ideal. Por tanto los eigenvalores o velocidades de onda (λ_i) son las mismas, como son las amplitudes de onda correspondientes a cada valor propio (L_i). Únicamente, considere ahora la dirección x_1

$$L_1 = (u_1 - c) \left(\frac{\partial p}{\partial x_1} - \rho c \frac{\partial u_1}{\partial x_1} \right) \text{ para } \lambda_1 = (u_1 - c) \quad (52)$$

$$L_2 = u_1 \left(\frac{\partial p}{\partial x_1} - c^2 \frac{\partial \rho}{\partial x_1} \right) \text{ para } \lambda_2 = u_1 \quad (53)$$

$$L_3 = u_1 \frac{\partial u_2}{\partial x_1} \text{ para } \lambda_3 = u_1 \quad (54)$$

$$L_4 = u_1 \frac{\partial u_2}{\partial x_1} \text{ para } \lambda_4 = u_1 \quad (55)$$

$$L_5 = (u_1 + c) \left(\frac{\partial p}{\partial x_1} + \rho c \frac{\partial u_1}{\partial x_1} \right) \text{ para } \lambda_5 = (u_1 + c) \quad (56)$$

Después de emitir las derivadas espaciales en términos de L_i , el sistema de ecuaciones LODI para las variables primitivas que contienen términos derivados del tiempo y x_1

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{c^2} \left[\frac{(L_5 + L_1)}{2} - L_2 \right] = 0 \quad (57)$$

$$\frac{\partial u_1}{\partial t} + \frac{(L_5 - L_1)}{2\rho c} = 0 \quad (58)$$

$$\frac{\partial u_2}{\partial t} + L_3 = 0 \quad (59)$$

$$\frac{\partial u_3}{\partial t} + L_4 = 0 \quad (60)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} + \frac{(L_5 + L_1)}{2} = 0 \quad (61)$$

La especificación de las amplitudes de onda (L_i) en términos de la temperatura y la densidad, se consiguen convenientemente mediante el uso de la ecuación de estado y formular así el gradiente de presión

$$\frac{\partial p}{\partial x_1} = \frac{1}{\rho\beta_T} \frac{\partial \rho}{\partial x_1} + \frac{\alpha_\rho}{\beta_T} \frac{\partial T}{\partial x_1} \quad (62)$$

La ecuación *LODI* para la temperatura es

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{T\alpha_\rho(L_5 + L_1)}{2\rho c_p} + \frac{L_2}{\rho\alpha_\rho c_s^2} = 0 \quad (63)$$

De las ecuaciones anteriores se puede encontrar la tasa de cambio de las variables conservativas

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + d_1 = 0 \quad (64)$$

$$\frac{\partial(\rho u_1)}{\partial t} + u_1 d_1 + \rho d_2 = 0 \quad (65)$$

$$\frac{\partial(\rho u_2)}{\partial t} + u_2 d_1 + \rho d_3 = 0 \quad (66)$$

$$\frac{\partial(\rho u_3)}{\partial t} + u_3 d_1 + \rho d_4 = 0 \quad (67)$$

$$\frac{\partial(\rho e_t)}{\partial t} + (\rho e_t + p)d_1 + \rho u_1 d_2 + \rho u_2 d_3 + \rho u_3 d_4 + \frac{c_p}{\alpha_\rho} = 0 \quad (68)$$

Con d_i definido como

$$d_1 = \frac{1}{c^2} \left[\frac{(L_5 + L_1)}{2} - L_2 \right] = \rho \frac{\partial u_1}{\partial x_1} + u_1 \frac{\partial \rho}{\partial x_1} \quad (69)$$

$$d_2 = \left[\frac{(L_5 - L_1)}{2\rho c} \right] = u_1 \frac{\partial u_1}{\partial x_1} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_1} \quad (70)$$

$$d_3 = L_3 = u_1 \frac{\partial u_2}{\partial x_1} \quad (71)$$

$$d_4 = L_4 = u_1 \frac{\partial u_3}{\partial x_1} \quad (72)$$

$$d_5 = \frac{L_5}{c^2} = \frac{u_1}{c^2} \left[\frac{\partial p}{\partial x_1} - c^2 \frac{\partial \rho}{\partial x_1} \right] \quad (73)$$

Así, la descomposición de las ondas se usa para reescribir las derivadas temporales y espaciales en términos de variaciones de amplitud de onda. Las ondas pueden salir o entrar del dominio computacional. Las ondas salientes transportan información desde el interior y se basan en la solución de las ecuaciones de conservación. Para las ondas entrantes la información se transporta desde el exterior a una región donde se busca la solución.

- Las variaciones de amplitud de onda salientes se calculan a partir de las derivadas en la frontera (puntos interiores)
- Las variaciones de amplitud de onda entrante se determinan a partir de las condiciones de contorno

En la siguiente discusión se supone que las ondas que viajan en la dirección positiva salen del dominio computacional. La definición de ondas entrantes y salientes se pueden invertir si las ondas entrantes tienen una $\lambda_1 < 0$. Con esta convención, en un límite donde $0 < u_1 < c$ (subsónico), las amplitudes de las ondas salientes se calculan desde los puntos interiores, mientras que la amplitud de onda entrante (L_1 en relación con $\lambda_1 = u_1 - c$) se obtiene de las condiciones de límite especificadas. Por otro lado, en un límite donde $-c < u_1 < 0$ (subsónico), las variaciones de amplitud de onda entrante se establecen en cero (lo que significa que no hay ondas), excepto aquellas que puedan obtenerse a partir de las condiciones de frontera especificadas, mientras que la variación de la amplitud de la onda saliente (L_5 correspondiente a $\lambda_5 = u_1 + c$) se calcula a partir de los puntos interiores.

A continuación, se muestra la aplicación de las condiciones de frontera para una entrada y salida subsónica, así como de muros deslizantes.

4.4.1A Frontera de entrada subsónica

Una posibilidad es fijando u_i y la temperatura en la entrada. En este caso, las amplitudes de las ondas de entrada son cero y la energía interna (ρe_T) es actualizada de acuerdo a la variación de longitud de onda (L_1 o L_5) determinada por los puntos interiores.

4.4.1B Frontera de salida subsónica

Una condición de frontera no reflexiva se puede aplicar estableciendo la amplitud de las ondas entrantes en cero, es decir, $L_1 = 0$. Alternativamente, se puede usar la presión en "infinito", por ejemplo, a través de $L_1 \propto (p - p_\infty)$. Las variaciones de amplitud de onda restantes se determinan a partir de los puntos interiores utilizando las [Ecus. 53-56](#).

4.4.1C Pared deslizante

En las paredes de deslizamiento, la velocidad normal es cero, es decir, $u_1 = 0$. Después, de la Ecu. 58, $L_1 = L_5$ y las variaciones de amplitud de onda restantes se determinan a partir de los puntos interiores utilizando las Ecus. 53-56.

4.5 Capa de esponja (Disipador artificial)

Al modelar un dominio computacional es necesario aplicar un tipo de condición límite abierta que permita que las ondas acústicas o las fluctuaciones turbulentas, se propaguen o salgan fácilmente del dominio, y esto se debe a que las condiciones de frontera a la salida no son del todo estables cuando se trata de condiciones realistas. Para esto, se recurre a una relajación numérica artificial llamada capa de esponja. Aquí, los campos instantáneos del flujo son llevados a un estado más homogéneo en la última etapa del dominio. Dicha región de amortiguamiento funciona algunos nodos antes de la condición de frontera de salida. Es importante mencionar que no se tiene una contraparte física, por debe permitir el paso y penetración del flujo, sin producir perturbaciones artificiales que comprometan la solución numérica. Es importante mencionar que la capa de esponja está dentro del dominio computacional, no es una extensión del dominio, no es una condición de frontera, pero si una condición límite abierta en contacto con la frontera de salida.

En el caso del chorro, el flujo presenta una turbulencia totalmente desarrollada y las fluctuaciones asociadas a esta condición en el flujo pueden generar las reflexiones artificiales (a la salida). El amortiguador utilizado en las simulaciones es del tipo exponencial, desde el valor cero hasta el 80% del valor de un campo homogéneo.

$$f_{esponja} = 0.8e^{-7x^4} \tag{74}$$

Las variables en la capa de esponja se llevan a valores promedio en una capa anterior. En la Fig. 30, se muestra la posición espacial de la capa de esponja y su capa anterior.

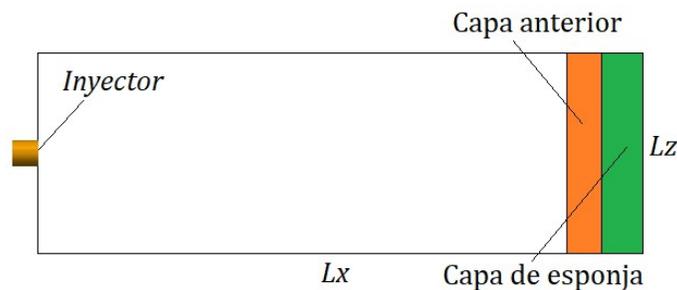


Figura 30. Localización de las capas utilizadas para la relajación o amortiguamiento artificial.

Resultados

En comparación con los datos experimentales y numéricos obtenidos de chorro líquidos y gaseosos a baja presión, la información disponible acerca de los chorros en estado supercrítico no es tan detallada, ni tan extensa. Muchas de las técnicas empleadas aún se desarrollan y solo algunas cuantas técnicas empleadas a condiciones atmosféricas estándar son viables en los ambientes supercríticos. Técnicas de imagen como bidimensionales Raman, Shadowgraph, Schlieren y retro-iluminadas son de las más usadas, las cuales permite la obtención de perfiles o valores promedio de densidad. Cantidades promedio instantáneas o promedio de propiedades turbulentas obtenidas de manera experimental, son aun inexistentes.

La primera parte de esta sección (Sección 5.1) se enfoca en el conocimiento previo corroborado. Las secciones siguientes (Secciones 5.2-7) se abordan las nuevas perspectivas del tema.

5.1 Validación

Los resultados experimentales se extraen de los casos 3 y 4 de Mayer et al.²¹ y se comparan con nuestros resultados. En la Fig. 31, se muestran perfiles de densidad promedio para ambos casos. En el caso transcrítico se observa la región de núcleo denso con una penetración profunda medio ambiente, el cual se observa hasta la primera mitad del dominio. La longitud del núcleo denso es $9.5D_{in}$. Así, una vez que las inestabilidades mecánicas alcanzan la línea central, el núcleo denso desaparece. En este punto, el perfil densidad comienza a disminuir hasta una densidad aproximada de 100 kg/m^3 . Aproximadamente a los $16D_{in}$, se observa un ligero cambio en la pendiente del perfil.³⁹ El cambio se debe a que los efectos promovidos por el efecto transcrítico concluyen, la diferencia de densidad entre el chorro y el medio ambiente ahora es menor y el chorro empieza a tomar un aspecto gaseoso. En el perfil, se obtuvo una subestimación menor al 10%. En el caso supercrítico, una región de núcleo denso es observada. Sin embargo, esto no existe experimentalmente. Banuti y Hannemann⁶³ explican este comportamiento a través de un rompimiento térmico. Aunque el mecanismo del rompimiento térmico esta fuera del alcance de este proyecto, se observa que el perfil de densidad promedio muestra una tendencia similar a la de los datos experimentales. La longitud del núcleo denso del chorro supercrítico es de $6.5D_{in}$. Además de los perfiles de densidad promedio, también se obtiene el ángulo de dispersión de chorro (α). Para este parámetro, se hace uso de la amplitud a media altura de perfil de densidad (full-width at half maximum, *FWHM*). Algunos autores mencionan que dos veces la amplitud a media altura es igual al ángulo de dispersión del chorro, ver Fig. 32. En ese sentido, se obtiene la pendiente de la *FWHM*. Los datos se obtienen entre $15 < x/D_{in} < 23$. La Tabla II, se compara el ángulo de dispersión obtenido con diferentes datos experimentales¹⁶ y numericos.²⁸ El ángulo de chorro transcrítico muestran una buena aproximación con datos. Sin embargo, el caso

supercrítico está sobre estimado. Esto se debe a la cercanía del chorro con los muros isotérmicos. Como se muestra en la Fig. 31b, al tener una relación de densidad más baja y no presentar el escudo térmico, la densidad del fluido inyectado decrece rápidamente.

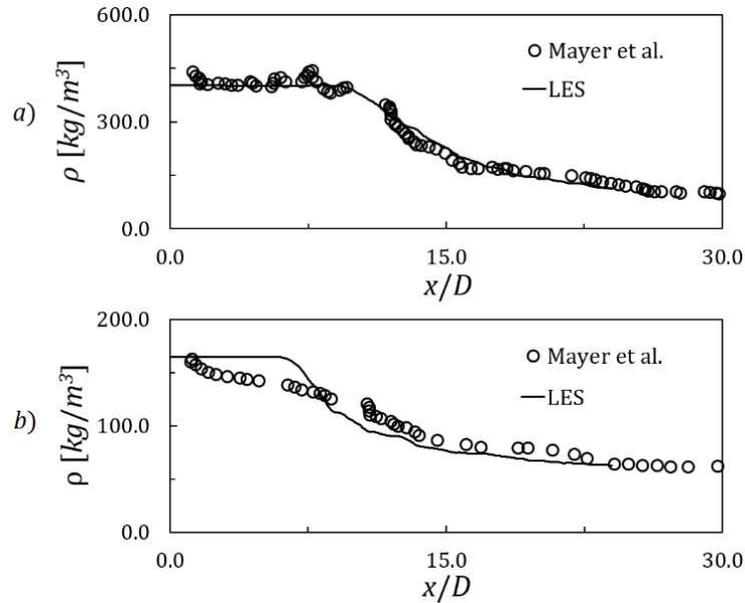


Figura 31. Perfiles de densidad promedio (numéricos, LES, y experimentales²¹) para los chorros transcrito y supercrítico.

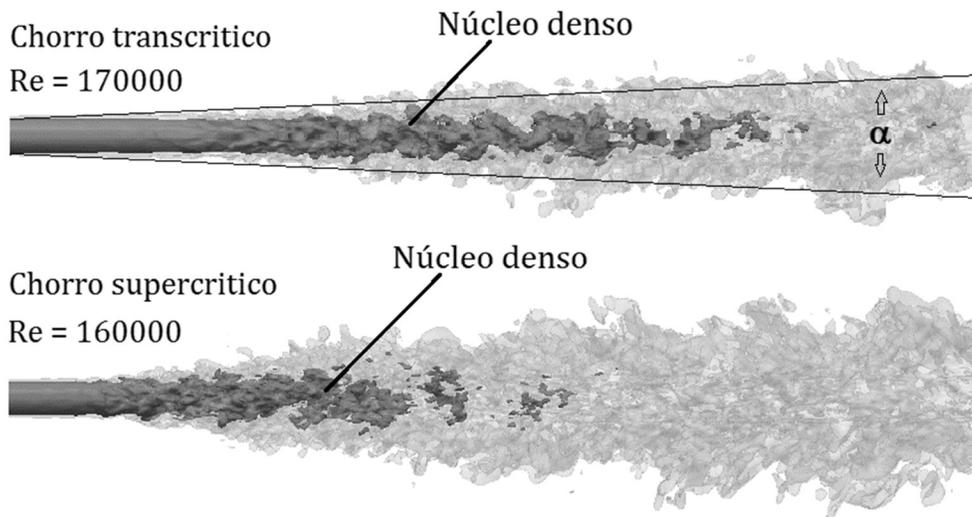


Figura 32. La dispersión del chorro transcrito es mayor, lo que implica una mayor interacción del chorro supercrítico con el medio circundante.

Tabla II. Angulo de dispersión del chorro.

Caso	LES*	Chehroudie et al. ⁶	Schmitt et al. ²⁸	Oswald and Micci ⁶⁸
TC	0.251	0.228	0.227	0.206
SC	0.362	0.282	0.241	0.312

5.2 Morfología del chorro transcrito y supercrítico

En las Figs. 33 y 34, se contornos instantáneos de densidad. En sus primeros diámetros, el chorro transcrito presenta una morfología más simple. De manera similar a un chorro líquido, el chorro presenta un aspecto de columna, el cual es promovido ampliamente por la estratificación por densidad. No obstante, se aprecia una modulación longitudinal en la superficie del chorro.^{28,39} A los 6.5 diámetros, la sección transversal del núcleo denso comienza a reducirse. En la superficie del núcleo denso, se observan ondulaciones modulares más intensas, cuales forman protuberancias. A partir de estas protuberancias, entidades fibrosas alargadas y estiradas. Dichas estructuras son las llamadas estructuras tipo dedo (finger-like structures). En la imagen superior izquierda de la Fig. 33, se observan estas entidades. Una vez formadas, entran en contacto con el fluido ambiente de menor velocidad. Aguas abajo, esta interacción promueve un movimiento axial más lento de las estructuras y las alarga aún más. Eventualmente, las estructuras se disuelven en el medio ambiente en diferentes posiciones a lo largo de la superficie del núcleo denso. Resulta interesante que las estructuras mantienen su forma alargada hasta que desaparecen. En este trabajo, la propia adecuada identificación de estas singulares estructuras se basa en los siguientes criterios

- I. La localización espacial de las estructuras de tipo dedo se han visualizado en diferentes posiciones a lo largo del chorro. No obstante, son observadas consistentemente dentro de la región de flujo dominado por las fuerzas de inercia.
- II. Las estructuras tipo dedo remplazan las estructuras características del chorro líquido, es decir, ligamentos y gotas.

Estos dos escenarios coinciden en una región del chorro: el núcleo denso. Por lo tanto, estas estructuras transcritas se forman a partir del cuerpo del chorro. Aunque, se han visto estructuras similares en la superficie del chorro esas son observadas aguas debajo de esta región y solamente son identificadas como estructuras nubosas en imágenes retro-iluminadas. Bajo esta consideración, las estructuras tipo dedo (capturadas y presentadas aquí) se localizan a lo largo de la región mostrada en la Fig. 33 (imagen superior izquierda). Una vez que el núcleo denso desaparece las estructuras tipo dedo ya no pueden ser observadas. Entonces, el chorro comienza a tener un aspecto de chorro gaseoso turbulento. Aguas abajo parcelas de fluido de alta densidad son intermitentemente emitidas.³⁹ Las parcelas son formadas a partir de los $10D_{in}$, como se observa en la Fig. 33 (imagen superior derecha). Estas geometrías de fluido frío son completamente disueltas hacia el final del dominio computacional.

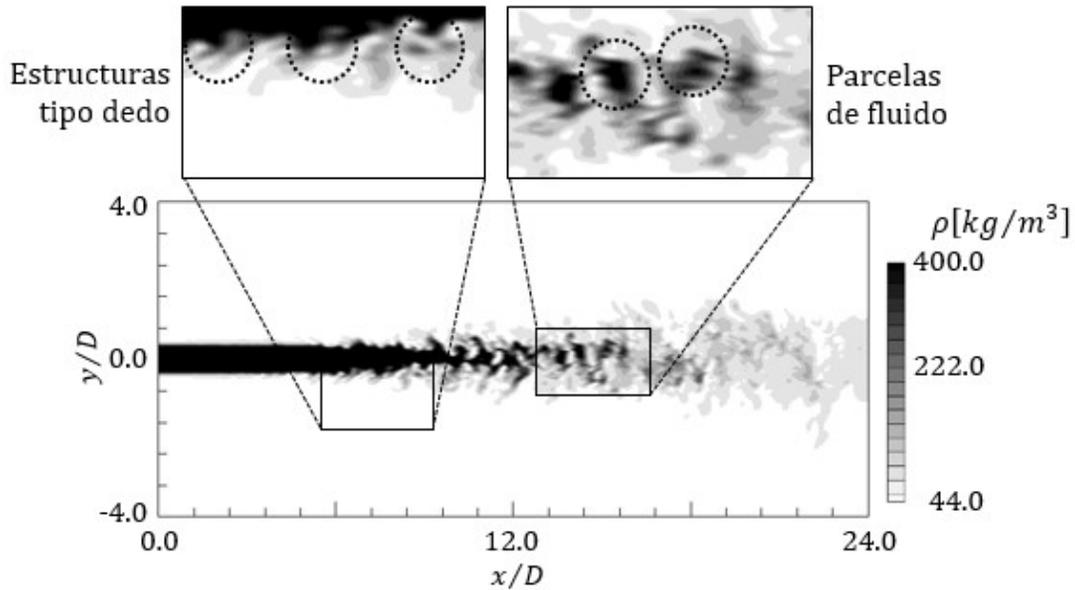


Figura 33. Contornos de densidad instantáneos del caso transcrito. Las estructuras tipo dedo son formadas a partir del núcleo denso. Aguas abajo parcelas de fluido de alta densidad son emitidas.

En el caso supercrítico, la modulación longitudinal se presenta cerca del punto de inyección. La estratificación por densidad tiene un efecto de débil en la estabilización del chorro como se muestra en la Fig. 34. En el flujo se observa el enrollamiento y el apareamiento de vórtices. Estructuras similares a las estructuras de tipo dedo no son observadas en la región del núcleo denso.²³ Dada la menor relación de densidad entre el chorro y el ambiente, el núcleo denso desaparece a una distancia menor comparada con el caso transcrito. De nuevo, parcelas de fluido frío son intermitentemente emitidas al final del núcleo denso.³⁹ La forma y tamaño de las parcelas son muy similares al de las observadas en el chorro transcrito

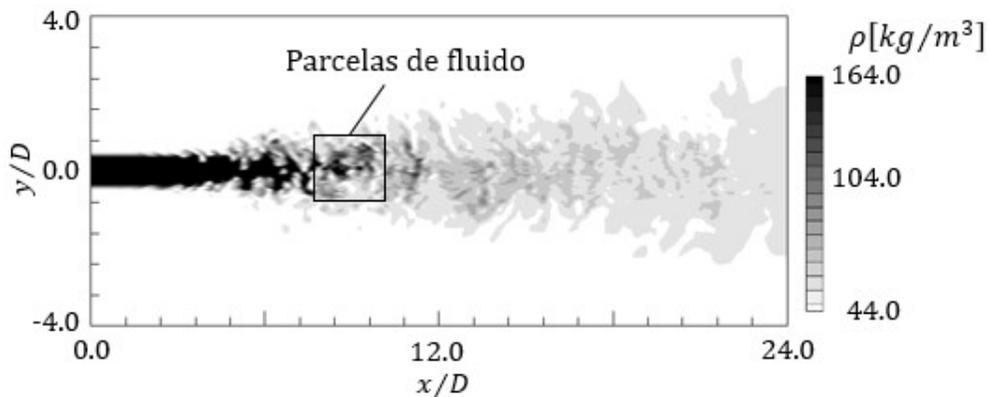


Figura 34. Contorno de densidad para el caso supercrítico. Estructuras tipo dedo no son identificadas en la superficie del núcleo denso. Aguas abajo, parcelas de alta densidad son intermitentemente emitidas.

5.3 Pseudo-similaridad

Al igual que en los chorros gaseosos, en el chorro transcrito y supercrítico, también se presentan una región donde los perfiles de diferentes propiedades coinciden en una sola curva, la región de auto-similaridad. Dado que no es propiamente un chorro de densidad constante, la región es llamada de pseudo-similaridad. A partir de los chorros de densidad variable se ha determinado que las curvas del inverso de la velocidad (y densidad) a lo largo de la línea central no son similares al normalizarlas con respecto al diámetro de entrada, ver Fig. 35. Entonces, Thiring y Newby⁶⁹ propusieron normalizar la coordenada axial (aguas abajo) a través de un diámetro efectivo (D_{ef}). El diámetro efectivo se define como sigue

$$D_{ef} = D(\rho_{amb}/\rho_{in})^{\alpha_u} \tag{75}$$

Para chorros de densidad variable los perfiles de velocidad axial se considera una parámetro α_u de -0.5 (en perfiles de densidad, $\alpha_\rho = 0.5$). Las curvas normalizadas con el diámetro efectivo se muestran en la Fig. 36. En los primeros diámetros las curvas no coinciden Después de la región inicial y de transición, todas las curvas coinciden con la curva F .

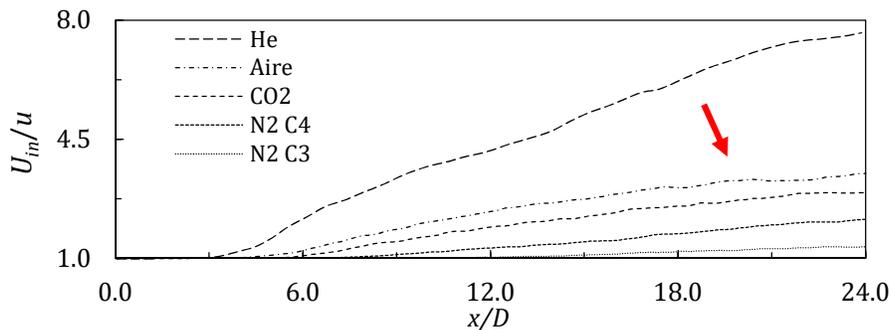


Figura 35. Inverso del decaimiento de la velocidad promedio. Las curvas más cercanas al eje horizontal están asociadas a relaciones de densidad (ρ_{in}/ρ_{amb}) mayores a 1. Relaciones de densidad: helio→0.14, aire→1.0, dióxido de carbono→1.52, nitrógeno pseudo-gas→3.7 y nitrógeno pseudo-likido→9.6.

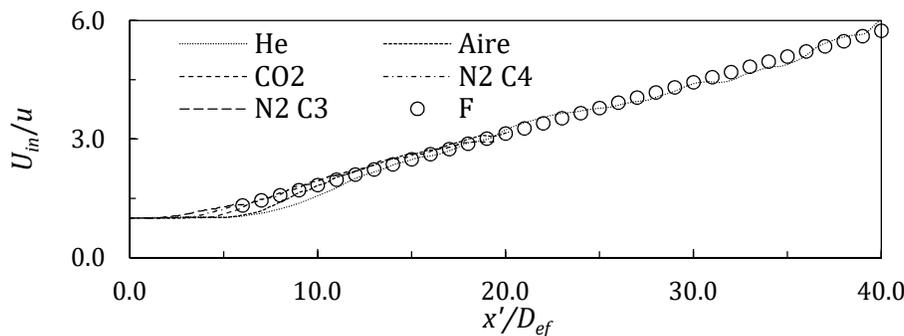


Figura 36. Inverso del decaimiento de la velocidad promedio normalizado con el diámetro efectivo. El para metro α_u es igual a 0.5.

A través de un adecuado parámetro de normalización en un perfil longitudinal se puede determinar la existencia de una región de pseudo-similaridad. Para determinar la distancia donde inicia dicha región se obtienen los perfiles radiales de velocidad axial promedio (véase Fig. 37). Para el caso supercrítico las curvas empiezan a coincidir a los $18D$, mientras que para el caso transcrítico, ninguna de las curvas coinciden. En comparación con el caso de transcrítico, el chorro supercrítico alcanza la región de pseudo-similaridad en una menor distancia. Cabe mencionar que a los $23D$, la curva radial transcrítica coincide con las curvas supercríticas, lo cual pudiera significar el inicio de la región de pseudo similaridad para el chorro transcrítico.

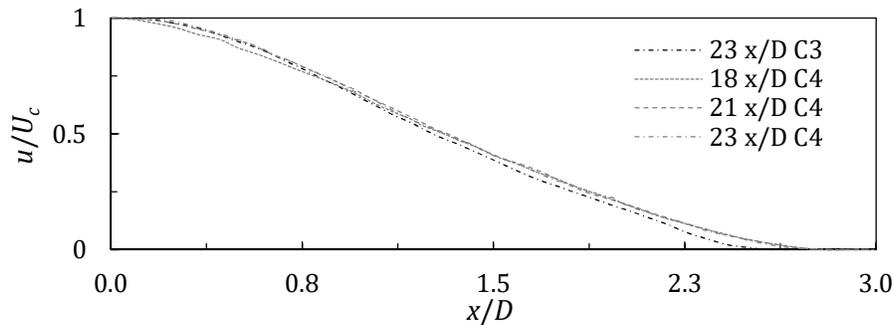


Figura 37. Perfil radial de velocidad axial promedio a diferentes posiciones axiales.

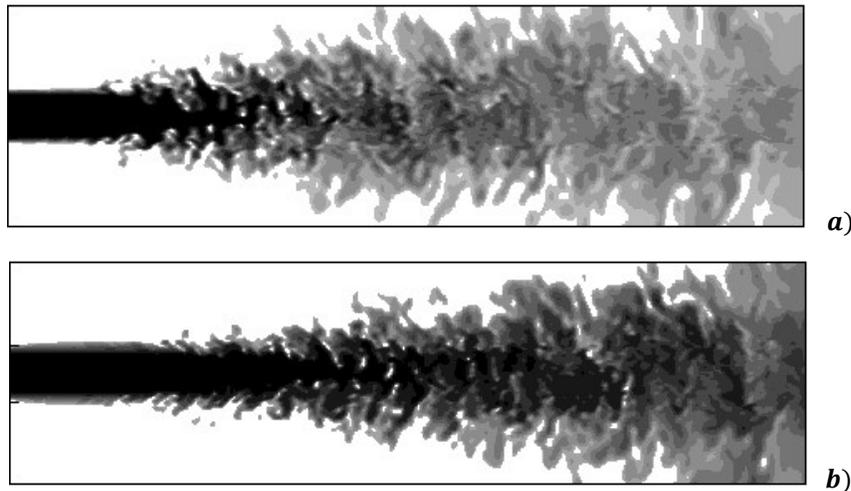


Figura 38. Contornos de temperatura para el caso supercrítico (a) y transcrítico (b). Los imágenes retro-iluminadas presentan un aspecto muy parecido a los contornos de temperatura. El reconocimiento de las estructuras de interés no es sencillo.

5.4 Temperatura y escudo térmico

En la Fig. 38, se presentan contornos instantáneos de temperatura, los cuales se asemejan considerablemente a las imágenes retro-iluminadas. A simple vista se aprecia un mayor ángulo de dispersión para el chorro supercrítico y una mayor penetración para el transcrítico. Dado su parecido, los perfiles instantáneos temperatura no son utilizados con regularidad en el reconocimiento de estructuras. Sin embargo, a través

de los perfiles de temperatura promedio (o densidad promedio, Fig. 31) se pueden reconocer regiones de interés. a diferencia del perfil de velocidad. En el perfil de temperatura se observa un comportamiento ascendente dado que la temperatura ambiente es mayor que la temperatura de inyección. A partir de las curvas de temperatura promedio a lo largo de la línea central (véase Fig. 39) se reconocen tres regiones

- I, donde $T = cte$
- II, donde $\partial T/\partial x \neq cte$
- III, donde $\partial T/\partial x \approx cte$

En la región I se consideran cambios nulos en la temperatura hasta que el núcleo denso desaparece. Los chorros presentan un rompimiento mecánico dada la amplificación de las inestabilidades longitudinales y azimutales. A partir de este punto, la mayor parte de la energía se utiliza para superar las fuerzas intermoleculares con leves, pero sensibles cambios en la temperatura. Esta región, donde el cambio de temperatura con respecto a la posición axial no es constante, define la región II en el chorro. La región III, considera una zona en la que la temperatura local del chorro se acerca cada vez más a la temperatura ambiente y se aleja de la temperatura de pseudo-ebullición. Aquí, al cambio es aproximadamente constante. A diferencia del caso supercrítico el caso transcrito no presenta la región de cambio de temperatura constante.

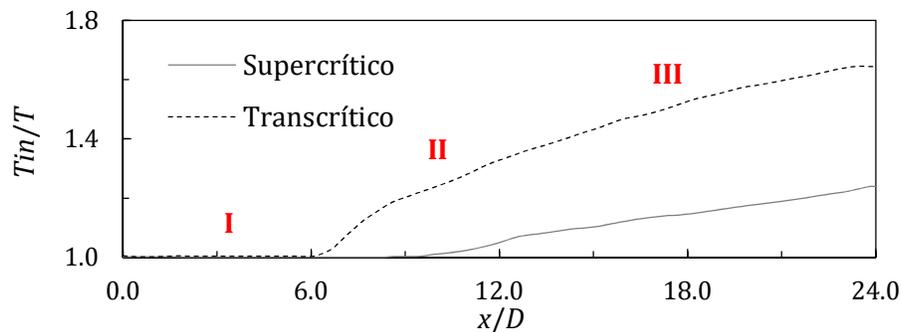


Figura 39. Perfil de temperatura a lo largo de la línea central para el caso supercrítico (a) y transcrito (b).

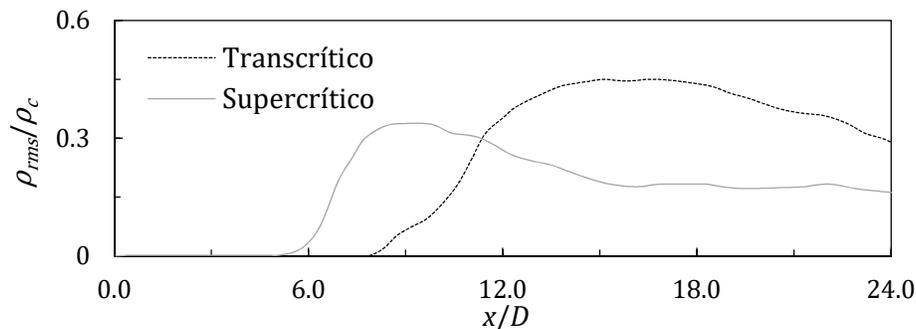


Figura 40. Fluctuaciones turbulentas de densidad a lo largo de la línea central para los chorros supercrítico y transcrito.

En la Fig. 40, se presentan los perfiles de las fluctuaciones turbulentas de densidad. Para ambos casos, poco antes de que el núcleo denso desaparezca, las fluctuaciones crecen moderadamente. Una vez que el núcleo rompe el crecimiento es súbito y pronunciado. El caso transcrítico presenta una región inicial amplia con fluctuaciones nulas, lo cual es consistente con la longitud del núcleo denso. La condición transcrítica promueve cambios de densidad menos pronunciados, pero a una mayor distancia axial. En el caso supercrítico, la relación de densidad promueve fluctuaciones menos intensas, llegando a un valor máximo a pocos diámetros del plano de inyección. La inexistencia de la condición transcrítica, y la consiguiente ausencia del escudo térmico, facilita el incremento de la temperatura local en el chorro. Una vez que ambos casos alcanzan sus valores máximos comienza una región de decrecimiento con comportamientos similares. El caso supercrítico presenta un descenso progresivo hasta tener un comportamiento asintótico. Para el caso transcrítico, el decrecimiento no alcanza a presentar un comportamiento asintótico. Sin embargo, parece acercarse al valor del caso supercrítico.

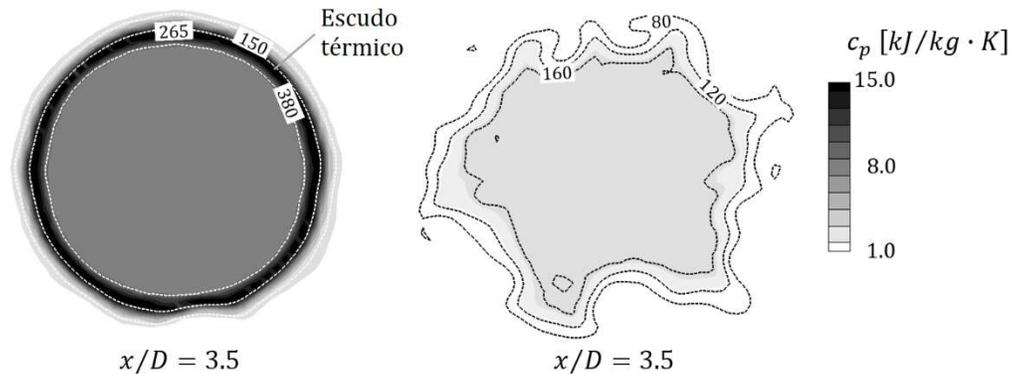


Figura 41. Sección transversal del contorno de capacidad térmica isobárica a $x/D=3.5$ para el chorro transcrítico (a) y supercrítico (b). En ambos casos, líneas discontinua de densidad en kg/m^3 , se traslapan con los contornos de capacidad térmica isobárica.

Particularmente, la condición de pseudo-ebullición es una diferencia entre el caso transcrítico y supercrítico. En el chorro transcrítico, una vez que la temperatura local alcanza la $T_{pb} = 129.7 \text{ K}$, se forma una capa de fluido con un valor máximo de c_p ($15.0 \text{ kJ}/\text{kg} \cdot \text{K}$) que envuelve el núcleo. Aquí, la mayor parte de la energía es absorbida para reducir la densidad en lugar de incrementar la temperatura como se muestra en la Fig. 5. Esta capa es el llamado muro o escudo térmico, el cual contribuye a la estratificación y densidad del chorro. En la Fig. 41a, el núcleo denso queda delimitado por el escudo térmico y presenta una región interna con una baja capacidad térmica isobárica ($6.9 \text{ kJ}/\text{kg} \cdot \text{K}$). Aguas abajo la sección transversal del chorro transcrítico inicialmente bien definida se deforma drásticamente. El mismo comportamiento térmico no es observado en el chorro supercrítico y esto se debe a que la condición de pseudo-ebullición no existe. Una vista transversal del chorro supercrítico muestra un valor uniforme de c_p en la región del núcleo denso como se muestra en la Fig. 41b. El valor de c_p en esta región es de $3.7 \text{ kJ}/\text{kg} \cdot \text{K}$ y progresivamente se reducen en la dirección axial hasta alcanzar los $1.1 \text{ kJ}/\text{kg} \cdot \text{K}$. El escudo térmico no se limita a la región del núcleo denso, esta se mantiene en el flujo, aguas abajo (ver Sección 5.6).

5.5 Estructuras turbulentas

Los chorros transcíticos y supercríticos presentan una modulación axisimétrica longitudinal, la cual está asociada a la inestabilidad de Kelvin-Helmholtz (*KH*). Sin embargo, esta inestabilidad tiene diferentes efectos en la superficie del chorro, como se describe en Schmitt et al.²⁸. En el chorro transcítico la modulación tiene un efecto débil. Zong et al.²⁷ describen que las fluctuaciones radiales transfieren su energía a las fluctuaciones longitudinales, lo cual favorece la estabilización del chorro. Eventualmente las fluctuaciones radiales se intensifican y forman bultos en la superficie del chorro. En la Fig. 42a, se muestran que los bultos no evolucionan en vórtices de anillo, el chorro supercrítico muestra una modulación longitudinal. Cerca del punto de inyección se logran observar entidades difusas en la superficie del chorro (flechas grises, Fig. 42a). Estas estructuras difusas son similares a las observadas en las imágenes retro-iluminadas de Chehroudi et al.¹¹ Dichas estructuras se localizan en las crestas de las ondas longitudinales antes de que las inestabilidades de *KH* se intensifiquen. Cabe mencionar que se encuentran fuera del escudo térmico y su densidad es un orden de magnitud menor que la densidad de inyección, $\rho \approx 0.2\rho_{in}$. adicionalmente, se observa que las estructuras forman un ángulo aproximando de 45° con respecto a la línea central del chorro, como se muestra en la Fig. 42a. En la Fig. 42b, las inestabilidades de *KH* son claramente identificadas. Las fluctuaciones radiales son más intensas que en caso transcítico y mejoran el fenómeno de arrastre en el chorro, lo cual promueve el inicio del proceso del mezclado y la dispersión del chorro. La visualización del enrollamiento y apareamiento de vórtices refuerza la idea de un comportamiento similar al de un chorro gaseoso turbulento,⁶ como se muestra en la Fig. 42b.

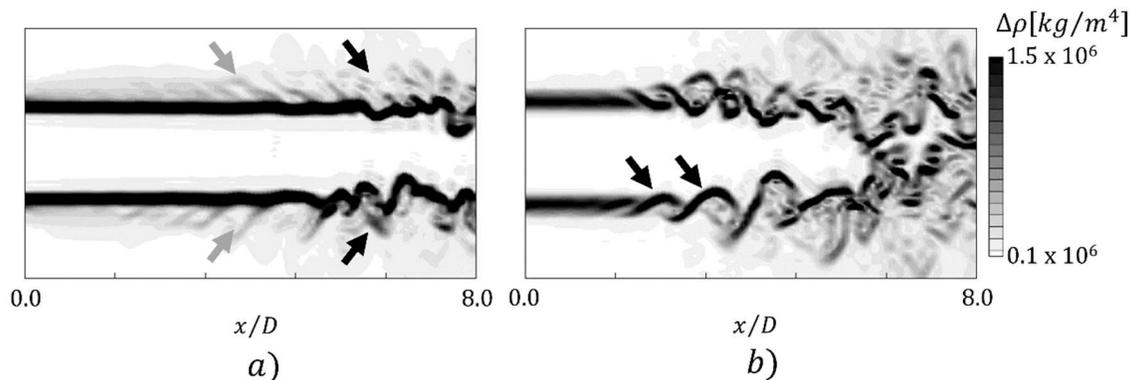


Figura 42. Contornos del gradiente de densidad para ambos casos. En el caso transcítico, se observa una morfología más simple (a). En el caso supercrítico, se observa una apariencia de chorro gaseoso turbulento (b), con zonas de aparición de vórtices de anillo bien definidas.

Para identificar estructuras turbulentas en el flujo se utilizó el *criterio-Q*, el cual se define como el segundo invariante del tensor gradiente de velocidad. Basado en este criterio, las estructuras de vórtice de anillo son identificadas en el chorro supercrítico como se muestra en la Fig. 43a. Resulta interesante que el chorro transcítico está rodeado de pequeñas estructuras turbulentas como se muestra en la Fig. 43b. Estas estructuras se forman casi al mismo tiempo que las estructuras tipo dedo. A diferencia

del caso supercrítico estas estructuras nunca forman estructuras axisimétricas cerradas (como un vórtice de anillo). La forma de estas entidades turbulentas es muy similar a las estructuras de trenza observadas en los flujos de pared.

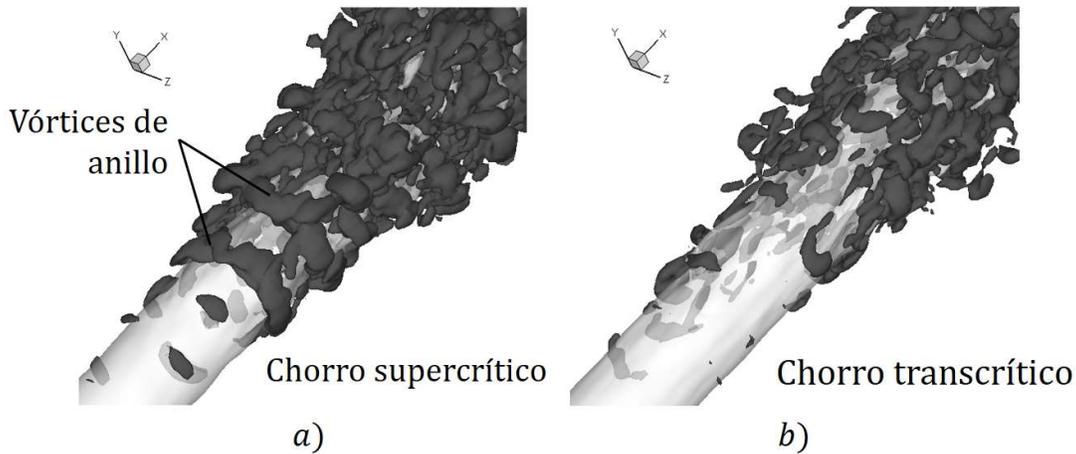


Figura 43. Iso-superficies de densidad y *criterion-Q*, a $0.5 = (\rho - \rho_{amb}) / (\rho_{in} - \rho_{amb})$ y $Q = 60.0$, respectivamente. Las vistas isométricas de los chorros supercrítico (a) y transcrítico (b) se refieren a la región entre los $2.0 \leq x/D \leq 8.0$.

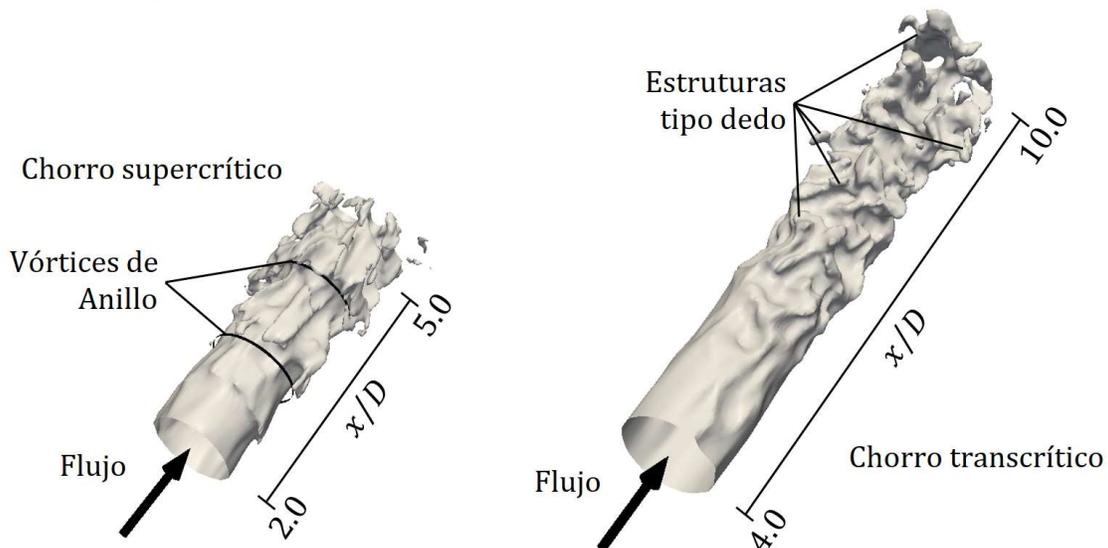


Figura 44. Vistas isométricas de la iso-superficie de densidad a $0.5 = (\rho - \rho_{amb}) / (\rho_{in} - \rho_{amb})$. Las estructuras tipo dedo comienzan a formarse a partir de los 6 diámetros.

5.6 Estructuras tipo dedo

A partir de Chehroudi et al.,⁶ las estructuras tipo dedo se definen como entidades que emergen del cuerpo del chorro y se gasifican casi tan rápido como se forman. Sobre esta base, las estructuras bajo estudio se originan y desarrollan en la superficie del núcleo denso o en parte de él. Esto es consistente con los criterios establecidos en la Sección 5.2. Las estructuras tipo dedo se forman a partir de los $6D_{in}$. Aguas abajo, se mueven con el flujo y se resisten a envolver hasta disolverse en el ambiente. Es interesante notar

que algunas de estas estructuras se unifican con otras estructuras del mismo origen. En la Fig. 44 se muestran iso-superficies de densidad de ambos chorros. Para el chorro supercrítico (Fig. 44a), la forma de la superficie del chorro es consistente con los vórtices de anillo observados en la Fig. 43a. En el chorro transcrito las estructuras tipo dedo emergen inicialmente como bultos. Las estructuras se alargan aún más conforme se mueven aguas abajo. Las estructuras tipo dedo son claramente identificadas en la Fig. 44b.

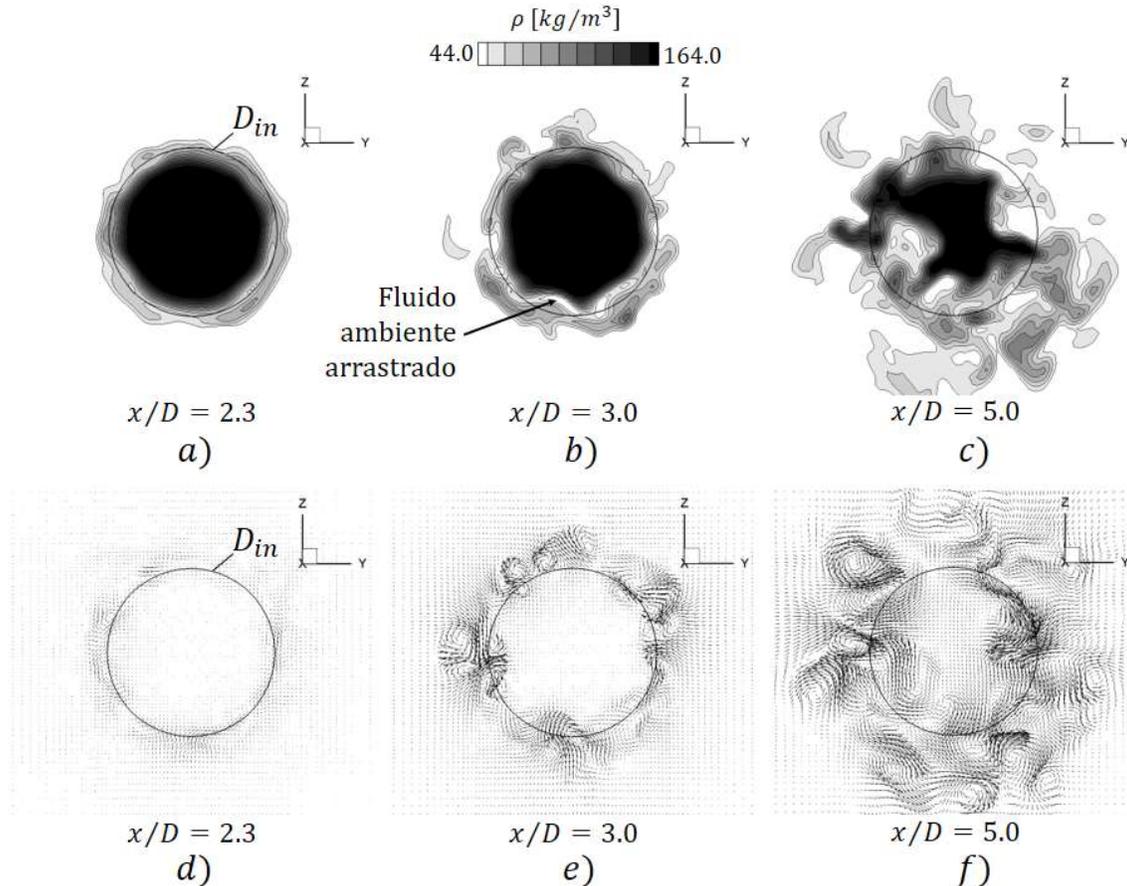


Figura 45. Contornos de densidad (a, b and c) y vectores de velocidad (d, e and f) de secciones transversales del chorro supercrítico a diferentes posiciones axiales. Las regiones claras que se observan alrededor del núcleo denso revela el fenómeno de arrastre.

De lo anterior, se puede reconocer a las estructuras tipo dedo como entidades alargadas localizadas a lo largo del núcleo denso (Sección 5.2), pero su origen y desarrollo aún no es preciso. Comúnmente, la estructura tipo dedo se ve como un fenómeno longitudinal. Sin embargo, vistas transversales del chorro revelan una modulación azimutal en su superficie, la cual tiene un rol importante en su formación. En las Figs. 45a-c y 46a-c, se muestran contornos de densidad para los chorros transcrito y supercrítico, respectivamente, mientras que en las Figs. 45d-f y Fig. 46d-f, se muestran los vectores del campo de velocidad. Cabe mencionar que la modulación azimutal se observa en el chorro transcrito y supercrítico, pero los afecta de diferente forma. En el chorro supercrítico, una vez que el vórtice de anillo es formado, se presenta el fenómeno de arrastre. El medio ambiente circundante es incorporado al cuerpo del

chorro y se observa como regiones claras que rodean al chorro, como se muestra en las Figs. 45a y b. Eventualmente los vórtices de anillo se vuelven inestables en el espacio y el tiempo. Entonces, se observa una modulación transversal junto con vórtices axiales⁷⁰ (streamwise vortices) del lado del fluido ambiente. Inicialmente, los vórtices axiales o longitudinales son atenuados por el vórtice primario de anillo (Fig. 45d), pero comienzan a ser visible poco antes que el núcleo denso desaparezca (Fig. 45e). La visualización de los vortices longitudinales es claramente evidenciada a través de los vectores del campo de velocidad. Vortices similares han sido mencionados por Lipmann and Gharid⁷¹ cuando experimentaron con chorros redondos gaseosos. Los vórtices de anillo evolucionan y rompen en pequeñas estructuras turbulentas. Así, el núcleo denso comienza a desaparecer. El chorro supercrítico es desordenado y turbulento. En las Figs. 45c y 45f, se observa que los vórtices longitudinales crecen y afectan de forma significativa del desarrollo del chorro.

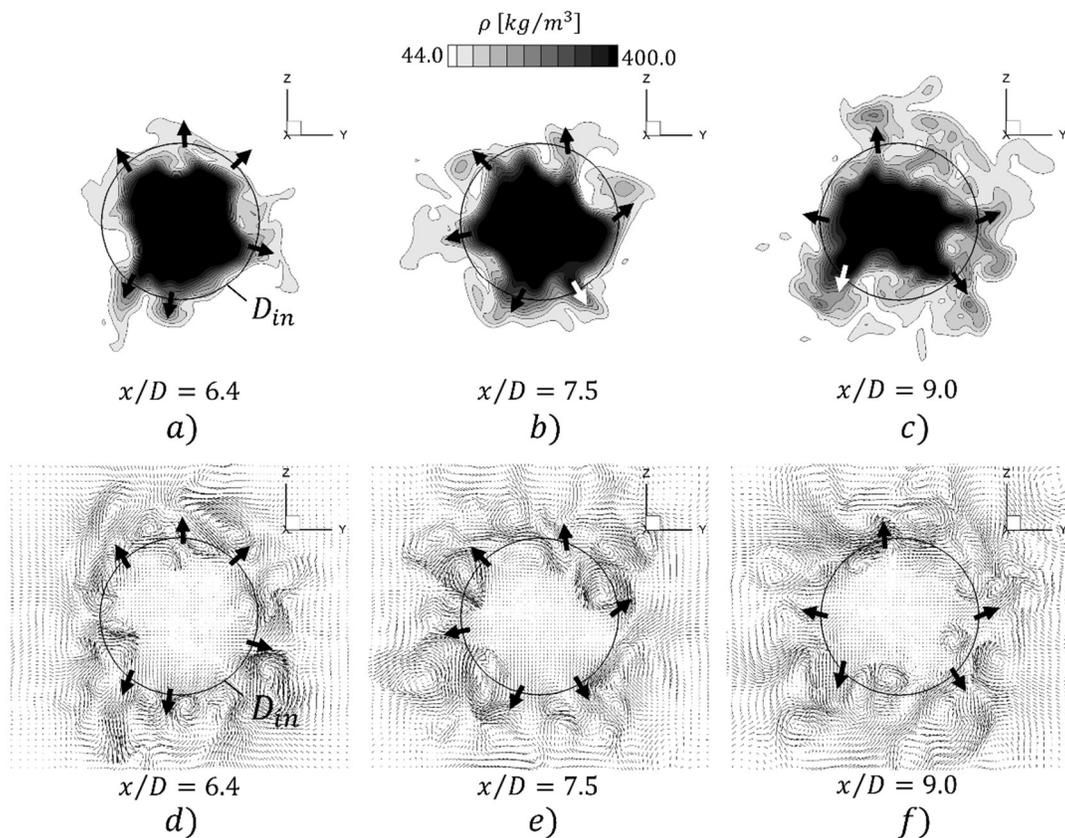


Figura 46. Contornos de densidad (a, b and c) y vectores de velocidad (d, e and f) de secciones transversales del chorro transcrito a diferentes posiciones axiales. Las flechas negras denotan las estructuras tipo dedo formadas a partir de las protuberancias en la superficie del chorro.

El chorro transcrito presenta diferencias significativas en comparación con el caso supercrítico. En este caso, la modulación longitudinal promueve una modulación azimutal, la cual se visualiza como protuberancias en la superficie del chorro. Como se muestra en la Fig. 46a, las protuberancias evolucionan en las estructuras tipo dedo. Al mismo tiempo, pares de vórtices contra rotantes se identifican en el flujo (ver las Figs.

46d-f). Es importante mencionar, que los pares de vórtices de rotación inversa se localizan a los ambos costados de las protuberancias y en el borde exterior del núcleo denso donde las variaciones de las propiedades térmicas y de transporte ocurren rápidamente. Park et al.⁷² mencionan un fuerte acoplamiento entre la vorticidad longitudinal y la variación de las propiedades térmicas. Con las propiedades del fluido cambiando drásticamente y la interacción de los vórtices contrarotantes con las protuberancias, éstas evolucionan y forma estructuras más alargadas visualizadas como estructuras tipo dedo. Entonces, dichos movimientos transversales y turbulentos parecen estar relacionados formación de las estructuras de interés. Es importante mencionar que un fluido semejante a un líquido (liquid-like fluid) tendrá fuerzas cohesivas más intensas en comparación con un fluido semejante a un gas (gas-like fluid), lo cual puede favorecer la subsistencia de las estructuras una vez que estas son formadas. En la Fig. 46b, las estructuras tipo dedo con más notorias. Una vez que las estructuras tipo dedo le alargan entran en una región de baja velocidad (fluido ambiente), retrasando su movimiento axial y alargándolas aún más. Al ser estiradas, el área de contacto con el medio ambiente cálido, lo cual puede favorecer su calentamiento. Ocasionalmente, al final de estas estructuras, se desprenden porciones de fluido de baja densidad en la dirección radial. Estas porciones de fluido son disueltas rápidamente en el ambiente a no más de $1.0D_{in}$ distancia, como se muestra en las Figs. 46b- c.

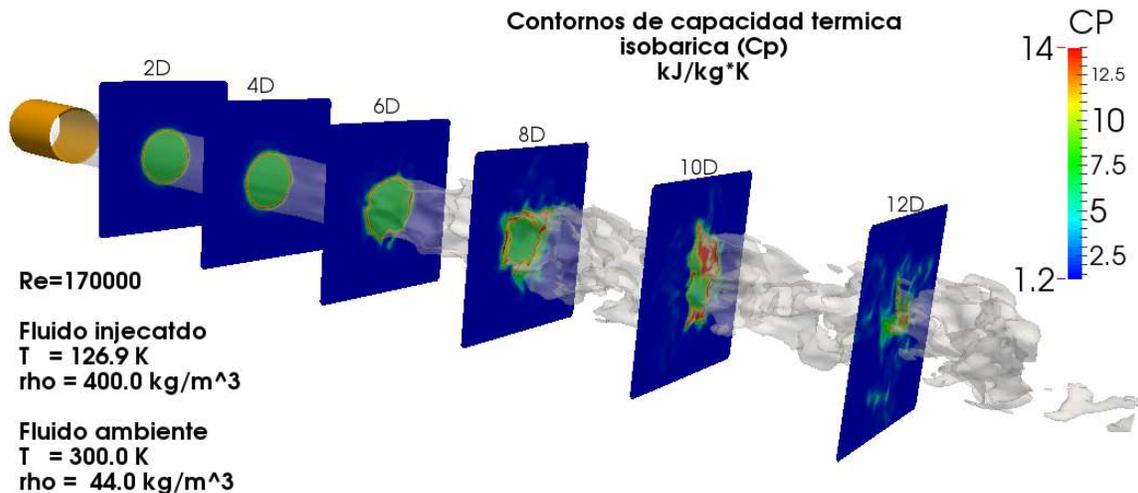


Figura 47. El chorro transcrito es estabilizado por la estratificación por densidad. Eventualmente, las estructuras tipo dedo son formadas.

Actualmente, no hay alguna explicación asociada a los mecanismos de formación de las estructuras tipo dedo. Sin embargo, los vórtices longitudinales parecen tener un rol importante. Comúnmente, los vórtices longitudinales son observados en inestabilidades generadas por el torque baroclínico.²⁸ En una interface inestable, un desalineamiento entre un gradiente de densidad y uno de presión, produce vorticidad baroclínica en una interface. Entonces, la vorticidad baroclínica de sentidos contrarios promueve la formación de valles y crestas en la interface. En el caso transcrito, la interface es estable inicialmente debido a la estratificación por densidad, pero se desestabiliza

eventualmente. Zong et al.,²⁷ Schmitt et al.,⁷² y O’kongo y Bellan⁷³ sostienen que el torque baroclínico es uno de los principales responsables del amortiguamiento y mejora de las inestabilidades hidrodinámicas en la capa cortante de los chorros en estado supercrítico. Como se muestra en la Fig. 47, una inestabilidad azimutal también promueve la formación y evolución de las protuberancias en la superficie del chorro hasta formas las estructuras tipo dedo. Uno puede referirse a la inestabilidad de Rayleigh-Taylor cuando ésta es formada baroclínicamente. Por lo tanto, la inestabilidad de Rayleigh-Taylor podría dar una explicación acerca del origen de las estructuras tipo dedo. Recientemente, la formación de ligamentos y gotas en un chorro líquido subcrítico ha sido explicada por medio de una inestabilidad azimutal asociada a la inestabilidad de Rayleigh-Taylor.^{74,75} Esta similitud, puede esperarse dada la proximidad de las condiciones de inyección con la región del punto crítico, el hecho de inyectar un fluido semejante a un líquido y la presencia de un elevado gradiente de densidad en la interface difusa (chorro-ambiente).^{76,77}

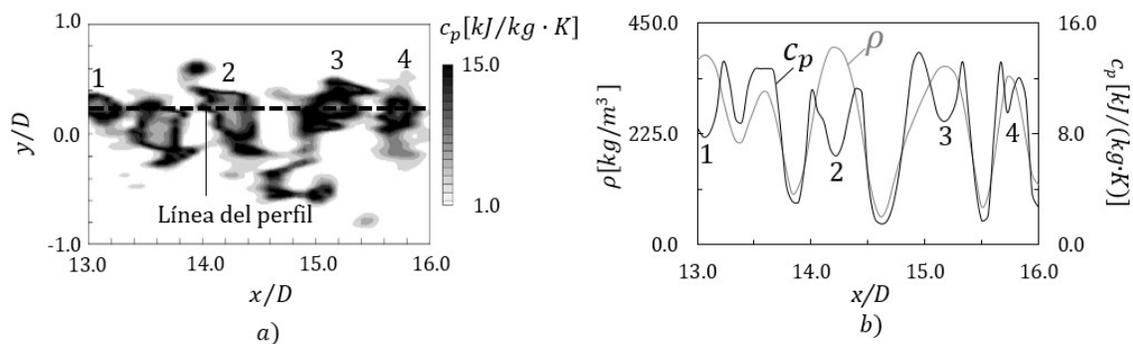


Figura 48. Contornos de capacidad térmica isobárica aguas abajo del núcleo denso, caso transcrito (a). Perfiles de ρ y c_p a lo largo de la línea discontinua (b).

5.7 Parcelas transcricas y supercriticas

A partir de contornos de densidad, se observa que en ambos chorros se emiten porciones o parcelas de fluido al final del núcleo denso (ver Figs. 48 y 49). Las parcelas transcricas y las parcelas presentan, de nuevo, diferencias importantes y se deben principalmente a la condición de pseudo-ebullición. Las parcelas transcricas presentan núcleos de alta densidad, los cuales son delimitados por una capa de alto c_p , como se muestra en la Fig. 48a. Perfiles de ρ y c_p son obtenidos cerca de la línea central del chorro con la intención de clarificar este fenómeno (ver Fig. 48b). Los altos valores de c_p , son detectados al inicio y la final de cada una de las parcelas. Ésta capa es el escudo térmico y retrasa el calentamiento de las mismas conforme se mueven aguas abajo. AL interior de la parcela, el c_p es un 40% más bajo en comparación con el escudo térmico. Las parcelas de fluido son claramente identificadas en el flujo. La formación de estos cuerpos de fluido denso revela una afinidad del fluido para formas geométricas cerradas. Estas estructuras son similares a las observadas en uno de los mecanismos de rompimiento de un chorro líquido (rompimiento de segundo momento inducido), el cual es el último mecanismo de rompimiento observado antes de alcanzar el estado supercrítico.⁴ Los movimientos turbulentos deforman las parcelas incrementando su

área superficial y el flujo de calor convectivo entre las parcelas y el medio ambiente. No obstante, las parcelas se desplazan varios diámetros. A partir de las parcelas de mayor tamaño se forman parcelas secundarias más pequeñas. Algunas veces, las nuevas parcelas pueden, o no, presentar núcleos con baja capacidad térmica. Un ejemplo de esto es la pequeña parcela ubicada en la parte superior de la parcela número 2 (Fig. 48a). Más allá de los $19D_{in}$, las parcelas son casi imperceptibles, como se muestra en la Fig. 33.

Las parcelas supercríticas también presentan núcleos de alta densidad. Sin embargo, estas no presentan el escudo térmico. En la Fig. 49a se muestran los contornos de c_p cerca de la línea central del chorro, los cuales son muy similares a los contornos de densidad. Para describir de forma precisa este comportamiento se utilizan los perfiles de ρ y de c_p (Fig. 49b) cerca de la línea central. Ahí, las curvas presentan la misma tendencia y los valores máximos de ambas propiedades revelan la localización de las parcelas. Aguas bajo, los valores de estas propiedades térmicas comienzan a disminuir, lo cual facilita su calentamiento y mezclado en el chorro. La distancia recorrida por estas parcelas es menor en comparación con las parcelas transcricas. Como se muestra en la Fig. 34, dichas estructuras están se disuelven prácticamente a los $13D_{in}$.

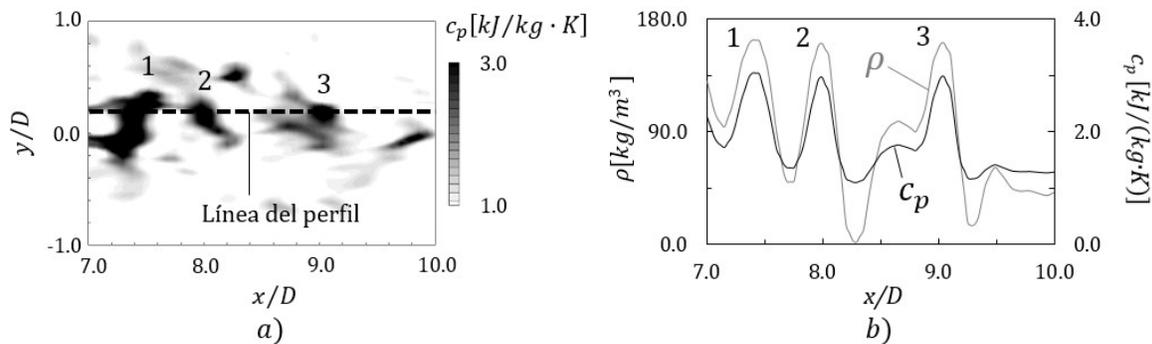


Figura 49. Contornos de capacidad térmica isobárica aguas abajo del núcleo denso, caso transcrito (a). Perfiles de c_p y ρ a lo largo de la línea discontinua (b).

Conclusiones

En este proyecto de tesis doctoral se realizaron simulaciones numéricas de grandes escalas para un chorro redondo transcrito y supercrítico, ambos inmerso en un entorno inicialmente estático. Ambos casos se basaron en el caso 3 (chorro transcrito) y 4 (chorro supercrítico) de los experimentos de Mayer. Por medio del uso del modelo de Función-espectral Selectiva, como modelo de submalla, se captura eficientemente las complejidades presentes en el proceso de inyección transcrito y supercrítico. Los campos de flujo medio e instantáneo obtenidos aquí presentan buena concordancia con los resultados experimentales.

A partir de los resultados se concluye lo siguiente para el caso transcrito

- En la superficie del chorro se forman modulaciones longitudinales.
- El fenómeno del arrastre es reducido.
- Una modulación longitudinal inicial promueve una modulación azimutal que forma protuberancias en la superficie del chorro.
- Las vistas en sección transversal del chorro revelan pares de vórtices longitudinales con direcciones de rotación invertidas.
- Cada vórtice se ubica a cada lado de las protuberancias (en el borde exterior del núcleo denso).
- La interacción de las protuberancias con los vórtices contrarotantes promueve el alargamiento de las mismas hasta formar las estructuras tipo dedo.

Los movimientos transversales y turbulentos parecen estar involucrados con el alargamiento de las protuberancias y la posterior formación de estructuras tipo dedo. La existencia de los vórtices longitudinales está asociada a la vorticidad baroclínica. Entonces, dado que uno puede referirse a la inestabilidad de Rayleigh-Taylor cuando se genera de forma baroclínica, esta inestabilidad puede dar una explicación sobre el origen de las estructuras similares a los dedos. Las estructuras en forma de dedos no son del todo un fenómeno longitudinal. Una vez que las estructuras similares a los dedos se estiran, entran en una región de baja velocidad, lo que retrasa su movimiento axial y las estira aún más. El alargamiento de estas estructuras aumenta su superficie y facilita su calentamiento. Sobre la base de este estudio, también llegamos a la conclusión

- El efecto combinado del gradiente de alta ρ (chorro/ambiente), la inestabilidad longitudinal (Kelvin-Helmholtz) y azimutal (Rayleigh-Taylor), los vórtices contrarotantes y su interacción con el entorno inactivo promueven la formación de estructuras tipo dedo.

- Las estructuras en forma de dedos solo se forman en la región del núcleo denso.
- Cuando la temperatura de inyección aumenta como en el caso supercrítico, no se observan más entidades alargadas o similares a las estructuras tipo dedo.

Por lo tanto, las estructuras en forma de dedos solo están presentes en condiciones favorables. Debido a que estas estructuras reemplazan las estructuras características del fenómeno de baja presión, son un tema interesante de importancia primordial.

En ambos chorros, las parcelas de fluido se emiten intermitentemente al final del núcleo denso.

- Las parcelas transcriticals se encuentran delimitadas, en su superficie, por un alto c_p (es decir, el escudo térmico).
- La característica anterior, indica la existencia de una afinidad en el fluido para formar geometrías cerradas de fluido.
- El escudo térmico retrasa el calentamiento de las parcelas, así como se observa en el escudo térmico del núcleo denso.
- Los núcleos de las parcelas transcriticals presentan una alta ρ y un bajo c_p .
- Las parcelas más pequeñas se forman a partir de parcelas grandes, las cuales pueden o no presentar las características térmicas de las grandes.
- Las parcelas supercriticals presentan núcleos con una alta ρ , pero no presentan el escudo térmico.
- Las parcelas de ambos casos desaparecen aproximadamente en una distancia igual o menor a dos veces su núcleo denso.

Derivado de este trabajo se desprenden tres publicaciones:

- Lagarza et al. "Large-eddy Simulation of Confined Turbulent Round Jet with Annular Jets". Proceedings of the 3rd International Conference on Fluid Flow, Heat and Mass Transfer (FFHMT'16) Ottawa, Canada. May 2-3 (2016).
- Lagarza et al. "Large-eddy Simulation of Confined Port-array in a Mixing Process". Advances and Applications in Fluid Mechanics. Volume 19, Number 4, p. p. 917-931 (2016).
- Lagarza et al. "Large-eddy Simulation of transcritical and supercritical jets immersed in a quiescent environment". Phys. Fluids. 31, 025104 (2019).

Forma cubica de la ecuación de estado y método de Cardano

Las ecuaciones de estado cúbicas implementadas en el código son, la de Peng-Robinson (PR) y la de Soave-Redlich-Kwong (SRK). Estas ecuaciones se representan a través de una ecuación generalizada

$$P = \frac{RT}{v-b} - \frac{a\alpha(T)}{v^2 + d_1bv + d_2b^2} = \frac{\rho RT}{1-b\rho} - \frac{a\alpha(T)\rho^2}{1 + d_1b\rho + d_2b^2\rho^2}$$

Para el cálculo del volumen específico o la densidad se hace uso de la ecuación anterior. Sin embargo, esta es inviable dada la forma explícita de la presión. Convirtiendo la ecuación en su forma polinómica cúbica para el parámetro de interés, se obtiene una expresión, no menos sencilla, pero si más tratable por medio de algún método numérico.

En este apéndice, se aborda la presentación de la ecuación de estado generalizada en forma de un polinomio de tercer grado y el método para la obtención de sus raíces. Con esto, se da solución a la problemática del cálculo de la densidad.

A.1 Forma cúbica de la ecuación de estado

Para obtener el polinomio de tercer grado de la ecuación de estado, se trabajará con el volumen específico

$$P = \frac{RT}{v-b} - \frac{a\alpha(T)}{v^2 + d_1bv + d_2b^2}$$

$$(v-b)(v^2 + d_1bv + d_2b^2)P = RT(v^2 + d_1bv + d_2b^2) - a\alpha(T)(v-b)$$

Trabajando con el lado izquierdo de la igualdad

$$\begin{aligned} & (v-b)(v^2 + d_1bv + d_2b^2)P \\ & v^3P + d_1bv^2P + d_2b^2vP - bv^2P - d_1b^2vP - d_2b^3P \\ & (P)v^3 + (d_1bP - bP)v^2 + (d_2b^2P - d_1b^2P)v + (-d_2b^3P) \end{aligned}$$

Para el lado derecho de la igualdad

$$\begin{aligned} & RT(v^2 + d_1bv + d_2b^2) - a\alpha(T)(v-b) \\ & RTv^2 + RTd_1bv + RTd_2b^2 - a\alpha(T)v + a\alpha(T)b \\ & (RT)v^2 + (RTd_1b - a\alpha(T))v + (RTd_2b^2 + a\alpha(T)b) \end{aligned}$$

En adelante $\alpha(T)$ solo se escribirá como α . Ahora, igualando ambos lados

$$(P)v^3 + (d_1bP - bP)v^2 + (d_2b^2P - d_1b^2P)v + (-d_2b^3P) \\ = (RT)v^2 + (RTd_1b - a\alpha)v + (RTd_2b^2 + a\alpha b)$$

Agrupando los coeficientes respecto del grado de la variable

$$(P)v^3 + (d_1bP - bP - RT)v^2 + (d_2b^2P - d_1b^2P - RTd_1b + a\alpha)v \\ + (-d_2b^3P - RTd_2b^2 - a\alpha b) = 0$$

Los coeficientes de la ecuación cúbica quedan como sigue

$$a_3 = P \\ a_2 = P(d_1b - b) - RT \\ a_1 = P(d_2b^2 - d_1b^2) - RTd_1b + a\alpha \\ a_0 = -d_2b^3P - RTd_2b^2 - a\alpha b$$

Normalizando los coeficientes de la ecuación

$$a_3 = 1 \\ a_2 = (d_1b - b) - \frac{RT}{P} \\ a_1 = (d_2b^2 - d_1b^2) - \frac{RT}{P}d_1b + \frac{a}{P}\alpha \\ a_0 = -d_2b^3 - \frac{RT}{P}d_2b^2 - \frac{ab}{P}\alpha$$

Considerando lo anterior, la ecuación de estado generalizada para gas real en su forma cubica es

$$v^3 + \left((d_1b - b) - \frac{RT}{P} \right) v^2 + \left((d_2b^2 - d_1b^2) - \frac{RT}{P}d_1b + \frac{a}{P}\alpha \right) v \\ + \left(-d_2b^3 - \frac{RT}{P}d_2b^2 - \frac{ab}{P}\alpha \right) = 0$$

Las constantes d_1 , d_2 , b , a y $\alpha(T)$ quedaron definidos como en el Apéndice A.

A.2 Método de Cardano

El método de Cardano permite resolver de forma analítica cualquier ecuación cúbica. A partir del la normalizacion de la polinomio en su forma basica y el calculo de dos parametros. Así, se obtiene un discriminante que determina el tipo de solucion

- Si $\Delta < 0$, tres raices reales diferentes
- Si $\Delta = 0$, dos raices reales
- Si $\Delta > 0$, una raiz real

Aunque se presenta el método de forma breve, el método se puede revisar en diversos textos. Considere la forma general de un polinomio de tercer grado

$$\begin{aligned} a_3 v^3 + a_2 v^2 + a_1 v + a_0 &= 0 \\ v^3 + \frac{a_2}{a_3} v^2 + \frac{a_1}{a_3} v + \frac{a_0}{a_3} &= 0 \\ v^3 + b_2 v^2 + b_1 v + b_0 &= 0 \end{aligned}$$

Ahora se obtienen los parámetros pr , qr y el discriminante, Δ .

$$\begin{aligned} pr &= b_1 - \frac{b_2^2}{3} \\ qr &= \frac{2}{27} b_2^3 - \frac{b_1 b_2}{3} + b_0 \\ \Delta &= qr^2 + 4 \left(\frac{pr^3}{27} \right) \end{aligned}$$

Si $\Delta < 0$, se tiene tres raíces reales diferentes

$$v_i = 2 \left(\sqrt{-\frac{pr}{3}} \cos \left(\frac{\phi + 2k\pi}{3} \right) \right) - \frac{b_2}{3} \quad i = 1, 2, 3 \quad \phi = \arccos \left(\frac{-\frac{qr}{2}}{\sqrt{-\frac{pr^3}{27}}} \right)$$

Si $\Delta = 0$, tres raíces reales con dos iguales

$$\begin{aligned} v_1 &= -2 \left(\frac{qr}{2} \right)^{1/3} - \frac{b_2}{3} \\ v_m &= \left(\frac{qr}{2} \right)^{1/3} - \frac{b_2}{3} \quad m = 2, 3 \end{aligned}$$

En el caso en que pr y qr son cero, las tres raíces serán iguales

$$v_i = -\frac{b_2}{3} \quad i = 1, 2, 3$$

Si $\Delta > 0$, una raíz real y dos imaginarias

$$v_1 = \left(-\frac{qr}{2} + \frac{\sqrt{\Delta}}{2} \right)^{1/3} + \left(-\frac{qr}{2} - \frac{\sqrt{\Delta}}{2} \right)^{1/3} - \frac{b_2}{3}$$

El uso de la densidad en el polinomio implica únicamente cambios en los coeficientes del mismo. Sin embargo, el procedimiento para sigue siendo el mismo.

Propiedades termodinámicas de un gas real

El comportamiento termodinámico de un gas ideal difiere del comportamiento real principalmente a altas presiones y bajas temperaturas. Por lo tanto, es de esperarse que las propiedades termodinámicas determinadas a partir de la consideración de gas ideal presenten cambios. Incluso las propiedades de transporte (viscosidad, conductividad térmica y difusividad) se desvían del comportamiento ideal dentro de las regiones de presión y temperatura mencionadas.

B1. Energía interna en función de T y v

La energía interna de un gas real es función de más de una variable, mientras que para un gas ideal ésta solo es función de la temperatura. De aquí que sea necesario obtener una ecuación que nos permita cuantificar la diferencia entre el caso real y el ideal para esta propiedad.

Del postulado de estado, se expresa la energía interna en función de dos propiedades

$$de = \left(\frac{\partial e}{\partial T}\right)_v dT + \left(\frac{\partial e}{\partial v}\right)_T dv$$

Cuando solo es función de la temperatura

$$de = c_v dT$$

Sin embargo, para en el caso real no es viable. Ahora, así como en e , considere a la entropía como función de la temperatura y del volumen específico

$$ds = \left(\frac{\partial s}{\partial T}\right)_v dT + \left(\frac{\partial s}{\partial v}\right)_T dv$$

Se sustituye esto en la primera relación de Gibbs (relaciones Tds)

$$\begin{aligned} de &= Tds - p dv \\ de &= T \left(\left(\frac{\partial s}{\partial T}\right)_v dT + \left(\frac{\partial s}{\partial v}\right)_T dv \right) - p dv \\ de &= T \left(\frac{\partial s}{\partial T}\right)_v dT + \left(T \left(\frac{\partial s}{\partial v}\right)_T - p \right) dv \end{aligned}$$

Con esto, se igualan los coeficientes

$$\left(\frac{\partial s}{\partial T}\right)_v = \frac{c_v}{T}$$

$$T\left(\frac{\partial s}{\partial v}\right)_T - p = \left(\frac{\partial e}{\partial v}\right)_T$$

Utilizando la tercera relación de Maxwell

$$\left(\frac{\partial s}{\partial v}\right)_T = \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_v$$

y sustituyéndola en la igualdad obtenida para el segundo coeficiente

$$\left(\frac{\partial e}{\partial v}\right)_T = T\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_v - p$$

$$de = c_v dT + \left(T\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_v - p\right) dv$$

$$e = e_0 + \int \left(T\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_v - p\right) dv$$

donde $e_0(T)$, representa la energía interna de gas ideal. Reordenado esta última ecuación, se obtiene una expresión para cuantificar la diferencia entre la energía interna de un fluido real y la energía obtenida bajo la consideración de gas ideal.

$$e - e_0 = \Delta e_d$$

$$\Delta e_d = \int \left(T\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_v - p\right) dv$$

En la literatura, a este término se le conoce como función de desviación y no es exclusiva de la energía interna. También existen funciones de desviación para otras propiedades como entalpia, entropía, energía libre de Gibbs, etc. A través de la relación de volumen específico y densidad, se puede obtener la última ecuación en función de la densidad

$$v = \frac{1}{\rho}$$

$$dv = -\frac{1}{\rho^2} d\rho$$

$$\Delta e_d = \int \left(\frac{p}{\rho^2} - \frac{T}{\rho^2} \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_\rho\right) d\rho$$

$$e = e_0 + \int \left(\frac{p}{\rho^2} - \frac{T}{\rho^2} \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_\rho\right) d\rho$$

B1.1 Energía interna y la ecuación de estado de gas ideal

En este apartado, se presenta la evaluación de la ecuación de estado de gas ideal en la ecuación para el cálculo de la energía interna. Primero se calcula la $\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_\rho$

$$p = \rho R_g T$$

$$\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_\rho = \rho R_g$$

Sustituyendo en la función se tiene

$$e = e_0 + \int \left(\frac{p}{\rho^2} - \frac{T}{\rho^2} \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_\rho \right) d\rho$$

$$e = e_0 + \int \left(\frac{p}{\rho^2} - \frac{T}{\rho^2} (\rho R_g) \right) d\rho$$

$$e = e_0 + \int \left(\frac{p}{\rho^2} - \frac{p}{\rho^2} \right) d\rho$$

$$e = e_0$$

B1.2. Energía interna y la ecuación de estado de un gas real

A diferencia de la ecuación de gas ideal, la ecuación de estado para un gas real es relativamente más compleja pero tratable. La ecuación de estado utilizada en este trabajo es

$$p = \frac{\rho R T}{1 - b\rho} - \frac{a\alpha(T)\rho^2}{1 + d_1 b\rho + d_2 b^2 \rho^2}$$

En adelante $\alpha(T)$ se escribirá como α .

Para obtener la e de un gas real, primero es necesario calcular la $\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_\rho$

$$\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_\rho = \frac{\rho R}{1 - b\rho} - \frac{d\alpha}{dT} \frac{\rho^2}{1 + d_1 b\rho + d_2 b^2 \rho^2}$$

A continuación y considerando a y α , como en el Capítulo 3, se obtiene $\frac{d\alpha}{dT}$

$$\frac{d\alpha}{dT} = a \frac{d\alpha}{dT} = a \left(-f_\omega \sqrt{\frac{\alpha}{T T_{cr}}} \right)$$

Ahora, si se retoma la definición de e para gas real y se le incluye la $\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_\rho$ de la ecuación de estado de gas real

$$e = e_0 + \int \left(T \frac{da\alpha}{dT} - a\alpha \right) \left(\frac{1}{1 + d_1 b\rho + d_2 b^2 \rho^2} \right) d\rho$$

Una vez definida la integral con la ecuación de estado generalizada, se realiza un procedimiento semejante al de Kim et al.⁶⁰ que facilita el proceso de integración. Esto implica dos cambios de constantes. Donde d_1 y d_2 son sustituidas por $\delta_1 + \delta_2$ y $\delta_1 \delta_2$, respectivamente.

$$e = e_0 + \int \left(T \frac{da\alpha}{dT} - a\alpha \right) \left(\frac{1}{1 + (\delta_1 + \delta_2)b\rho + (\delta_1 \delta_2)b^2 \rho^2} \right) d\rho$$

$$e = e_0 + \left(T \frac{da\alpha}{dT} - a\alpha \right) \int \left(\frac{1}{(1 + \delta_1 b\rho)(1 + \delta_2 b\rho)} \right) d\rho$$

Integrando queda

$$e = e_0 + \left(T \frac{da\alpha}{dT} - a\alpha \right) \left[\frac{1}{(\delta_1 - \delta_2)b} \left(\ln \left(\frac{1 + \delta_1 b\rho}{1 + \delta_2 b\rho} \right) \right) \right]$$

Esto representa la energía interna de un gas real, definida **únicamente** para la ecuación de estado generalizada mostrada en el [Capítulo 3](#).

B.2 Energía interna utilizando PR y SRK

Los valores de las constantes δ_1 y δ_2 , dependiendo la ecuación (Peng-Robinson o Soave-Readlich-Kwong), se presentan en la [Tabla B1](#)

Tabla B1

	Peng-Robinson	Soave-Redlich-Kwong
δ_1	$1 + \sqrt{2}$	1
δ_2	$1 - \sqrt{2}$	0

Esto permite expresar la e para la ecuación de estado PR como sigue

$$e = e_0 + \left(T \frac{da\alpha}{dT} - a\alpha \right) \left[\frac{1}{2\sqrt{2}b} \left(\ln \left(\frac{1 + (1 + \sqrt{2})b\rho}{1 + (1 - \sqrt{2})b\rho} \right) \right) \right]$$

y para la ecuación de estado de SRK

$$e = e_0 + \left(T \frac{da\alpha}{dT} - a\alpha \right) \left[\frac{\ln(1 + b\rho)}{b} \right]$$

El cambio de constantes (δ_1 y δ_2) también sirve para representar la de forma explícita y calcular la presión. La ecuación generalizada, con el cambio de constantes queda como sigue

$$p = \frac{\rho RT}{1 - b\rho} - \frac{a\alpha\rho^2}{(1 + (\delta_1 + \delta_2)b\rho + (\delta_1\delta_2)b^2\rho^2)}$$

o también como

$$p = \frac{\rho RT}{1 - b\rho} - \frac{a\alpha\rho^2}{(1 + \delta_1 b\rho)(1 + \delta_2 b\rho)}$$

B3. Otras propiedades termodinámicas

Derivado del uso de la ecuación de estado es posible obtener otras propiedades termodinámicas como la capacidad térmica a presión constante, a volumen constante y la velocidad del sonido.

Antes de comenzar a definir las ecuaciones que expresan las propiedades mencionadas, se deben obtener las derivadas parciales $\left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)_T$ y $\frac{da^2}{dT}$.

Para $\left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)_T$ se tiene

$$\left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)_T = \frac{RT}{(1 - b\rho)^2} - \frac{a\alpha\rho(2 + (\delta_1 + \delta_2)b\rho)}{(1 + (\delta_1 + \delta_2)b\rho + (\delta_1\delta_2)b^2\rho^2)^2}$$

y para $\frac{da^2}{dT}$

$$\frac{da\alpha^2}{dT} = a \frac{d\alpha^2}{dT} = a \left(\frac{f_\omega^2}{2TT_{cr}} + \frac{f_\omega}{2} \sqrt{\frac{\alpha}{T^3 T_{cr}}} \right)$$

B3.1 Capacidad térmica a volumen constante

Se inicia con la definición de c_v

$$c_v = \frac{de}{dT}$$

La deriva de e con respecto a la temperatura es

$$\begin{aligned} \frac{de}{dT} &= \frac{d}{dT} \left(e_{gi} + \left(T \frac{da\alpha}{dT} - a\alpha \right) \left[\frac{1}{(\delta_1 - \delta_2)b} \left(\ln \left(\frac{1 + \delta_1 b\rho}{1 + \delta_2 b\rho} \right) \right) \right] \right) \\ c_v &= c_{v,0} + \left[\frac{T}{(\delta_1 - \delta_2)b} \left(\frac{da\alpha^2}{dT} \right) \left(\ln \left(\frac{1 + \delta_1 b\rho}{1 + \delta_2 b\rho} \right) \right) \right] \end{aligned}$$

B3.2 Capacidad térmica a presión constante

El cálculo de la c_p se puede obtener a partir de la ecuación de desvío de la entalpía. Sin embargo, es posible obtener una relación que vincule las dos capacidades térmicas. A diferencia del caso ideal, donde la relación se expresaba haciendo uso de la constante universal

$$c_p = R + c_v$$

para gases reales la relación es relativamente más compleja.

La obtención de la relación se inicia al considerar a la entalpía y la entropía como función de la temperatura y la presión

$$\begin{aligned} s(T, p) \\ ds &= \left(\frac{\partial s}{\partial T}\right)_p dT + \left(\frac{\partial s}{\partial p}\right)_T dp \\ h(T, p) \\ dh &= \left(\frac{\partial h}{\partial T}\right)_p dT + \left(\frac{\partial h}{\partial p}\right)_T dp \\ dh &= c_p dT + \left(\frac{\partial h}{\partial p}\right)_T dp \end{aligned}$$

Ahora, si se considera la relación de Gibbs para la entalpía y se sustituyen

$$\begin{aligned} dh &= T ds + v dp \\ dh &= T \left(\left(\frac{\partial s}{\partial T}\right)_p dT + \left(\frac{\partial s}{\partial p}\right)_T dp \right) + v dp \\ dh &= T \left(\frac{\partial s}{\partial T}\right)_p dT + \left(v + T \left(\frac{\partial s}{\partial p}\right)_T \right) dp \end{aligned}$$

Igualando los coeficientes de dT y $de dp$

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial s}{\partial T}\right)_p &= \frac{c_p}{T} \\ v + T \left(\frac{\partial s}{\partial p}\right)_T &= \left(\frac{\partial h}{\partial p}\right)_T \end{aligned}$$

Utilizando primera igualdad y la cuarta relación de Maxwell, se obtiene la primera relación derivada para obtener el c_p

$$ds = \frac{c_p}{T} dT - \left(\frac{\partial v}{\partial T}\right)_p dp$$

La segunda relación se obtiene al sustituir la igualdad y la tercera relación de Maxwell

$$ds = \frac{c_v}{T} dT + \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_v dv$$

Igualando las ecuaciones ds , y despejando dT

$$\begin{aligned} \frac{c_p}{T} dT - \left(\frac{\partial v}{\partial T}\right)_p dp &= \frac{c_v}{T} dT + \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_v dv \\ dT &= \frac{T \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_v}{c_p - c_v} dv + \frac{T \left(\frac{\partial v}{\partial T}\right)_p}{c_p - c_v} dp \end{aligned}$$

Considerando a la temperatura como $T(v, p)$, y derivando se obtiene

$$dT = \left(\frac{\partial T}{\partial v}\right)_p dv + \left(\frac{\partial T}{\partial p}\right)_v dp$$

Si se igualan los coeficientes y se obtiene la relación deseada a partir de cualquiera de las igualaciones. De la primera igualdad

$$\begin{aligned} \frac{T \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_v}{c_p - c_v} &= \left(\frac{\partial T}{\partial v}\right)_p \\ \frac{T \left(\frac{\partial v}{\partial T}\right)_p}{c_p - c_v} &= \left(\frac{\partial T}{\partial p}\right)_v \\ c_p - c_v &= T \left(\frac{\partial v}{\partial T}\right)_p \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_v \\ c_p &= c_v - T \left(\frac{\partial v}{\partial T}\right)_p \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_v \end{aligned}$$

Una forma opcional de tal relación se obtiene con la relación cíclica

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial v}{\partial p}\right)_T \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_v \left(\frac{\partial T}{\partial v}\right)_p &= -1 \quad \rightarrow \quad \left(\frac{\partial v}{\partial p}\right)_T \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_v = -\left(\frac{\partial v}{\partial T}\right)_p \\ c_p &= c_v - T \frac{\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_v^2}{\left(\frac{\partial p}{\partial v}\right)_T} \end{aligned}$$

Así como en la ecuación de estado, es posible expresar esta relación en función de la densidad. Lo que produce una expresión para el cálculo de c_p haciendo uso de las derivadas calculadas con anterioridad

$$c_p = c_v + \frac{T \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_\rho^2}{\rho^2 \left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_T}$$

B3.3 Velocidad del sonido

La expresión para la velocidad del sonido

$$c_s = \sqrt{\left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_s}$$

A través de relaciones termodinámicas es posible expresar la ecuación anterior también como

$$c_s = \sqrt{\left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_s} = \sqrt{\frac{c_p}{c_v} \left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_T}$$

En este punto se cuenta con todos los parámetros necesario para determinar la velocidad del sonido haciendo uso de las propiedades que se definieron anteriormente, para cualquiera de las ecuaciones de estado utilizadas.

Chorro de densidad constante

En el capítulo de introducción, se menciona que la herramienta numérica obtenida para simular el fenómeno de inyección de un fluido supercrítico se obtuvo a partir de un código base, el cual, es descrito y validado en este apéndice. Para tal efecto se recurre a los datos experimentales Hussein et al.³⁷

Las ecuaciones de gobierno resultan independientes de la densidad o volumen específico del fluido de trabajo, por lo que las ecuaciones de gobierno son las mismas que para el caso gas real. A diferencia del código obtenido, en el código base se consideran la ecuación de estado de gas ideal y los modelos de Sutherland propiedades de transporte (viscosidad dinámica y conductividad térmica). Las condiciones de frontera son muy similares a las de gas real (Capítulo 2) y se describen de forma precisa en Poinot y Lele.⁴³ Para el tratamiento numérico de la discretización espacial y la integración temporal, se utilizan los mismos métodos del código de alta presión. La curva mediante la cual se define el perfil de velocidad de entrada, es la función error con lo que se define un perfil de entrada tipo “top-hat”. De nuevo, la transición del flujo a la turbulencia se genera con ruido blanco (Capítulo 2).

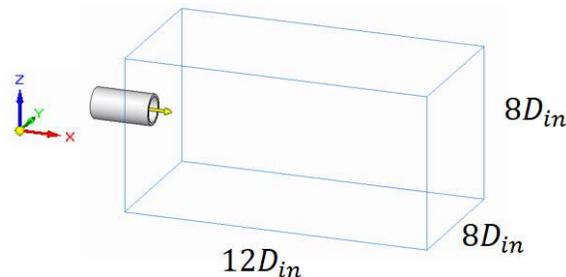


Figura C1. Dimensiones del dominio computacional para el chorro de densidad constante.

En la simulación numérica, se consideran 12 diámetros de longitud del dominio computacional en la dirección axial, véase Fig. C1. El gas inyectado y el gas ambiente son de la misma especie química (aire), y se encuentran a la misma temperatura. El número de Reynolds es de 10800.

El trabajo de Hussein et al.³⁷ es uno de los casos de prueba por excelencia para validación de simulaciones numéricas (de grandes escalas o directas) orientadas al estudio de chorros. En dicho estudio, una vez que el flujo se encuentra estadísticamente desarrollado, se obtienen curvas ajustadas de diferentes propiedades promedio. Particularmente, más allá de la región de núcleo potencial y de transición, es decir, la región de auto-similaridad. Curvas del perfil axial del inverso de la velocidad promedio, el perfil de velocidad radial de la componente axial y fluctuaciones turbulentas de diferente orden son obtenidas, entre otras. Si bien la simulación permite la obtención de campos instantáneos como se muestra en al Fig. C2, aquí únicamente se compararan los resultados promedio dadas las curvas obtenidas en el trabajo experimental.

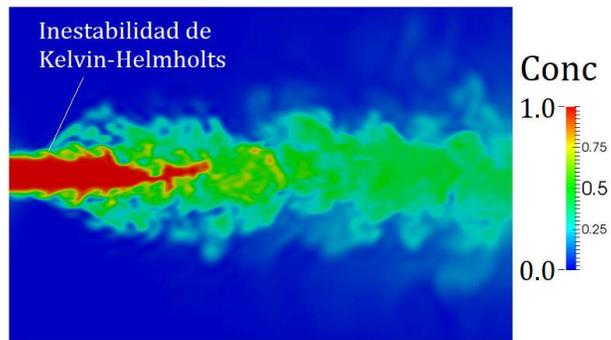


Figura C2. Contornos de concentración (Conc). La inestabilidad longitudinal y axisimétrica primaria asociada a la inestabilidad de Kelvin-Helmholtz crecen rápidamente.

En las Figs. C3-6, se presentan diferentes curvas ajustadas, las cuales se comparan con los resultados numéricos de nuestra simulación. En la Fig. C3 se muestra el inverso del decaimiento de la velocidad. A partir de los 5 diámetros, el núcleo potencial desaparece y la velocidad se reduce progresivamente y de manera lineal. Hussein et al.³⁷ determinan un valor en la pendiente de 0.1743 y la nuestra simulación presenta un valor de 0.1724. Al final del dominio computacional se presenta un cambio en la pendiente y se debe a la condición numérica impuesta. En los nodos cercanos a la salida del dominio los valores instantáneos de las fluctuaciones turbulentas se amortiguan, afectando también la magnitud de las variables promedio. Tal condición brinda homogeneidad al flujo a la salida del dominio y estabilidad al código.

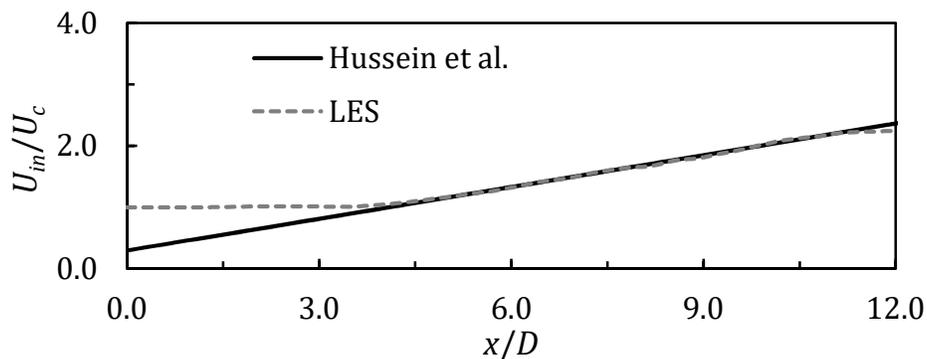


Figura C3. Inverso del decaimiento de la velocidad axial promedio.

Las tasa del crecimiento o ángulo de dispersión de un chorro de densidad constante oscila entre los 20° y los 35° para números de Reynolds entre, $2000 \leq Re \leq 25000$. En este trabajo se obtiene un ángulo de dispersión de 23°. Aguas abajo se presenta la región de auto similaridad, que como se menciona en el Capítulo 1, los perfiles radiales de velocidad axial se traslapaban en una sola. La curva ajustada del perfil de velocidad radial es comparado con las curvas adimensionales de la región de auto-similaridad del flujo Fig. C4. A partir de los 6 diámetros las curvas de velocidad coinciden en el mismo perfil y concuerda de buena forma con la curva experimental.

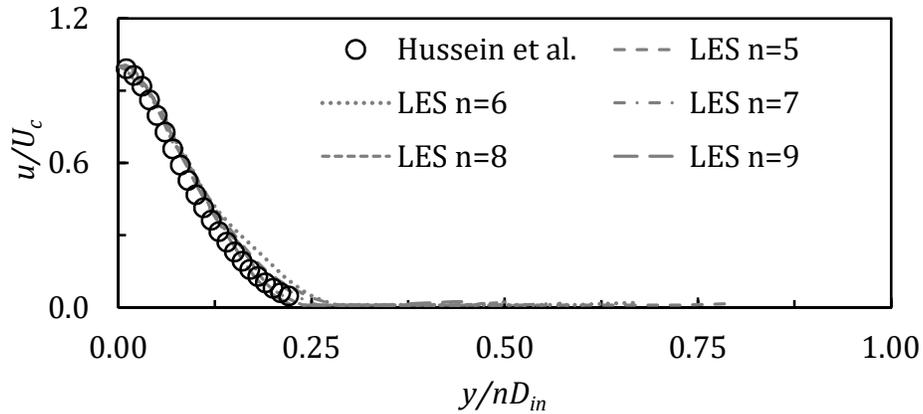


Figura C4. Perfil de velocidad axial promedio.

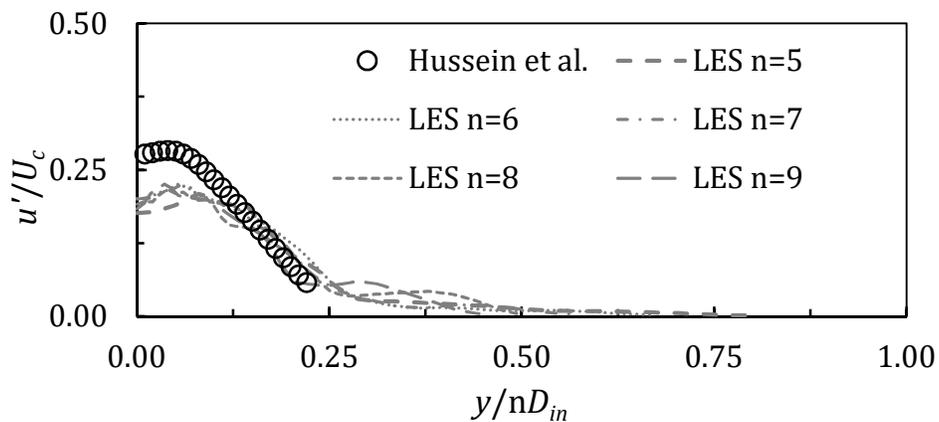


Figura C5. Perfil radial de la intensidad turbulenta axial. El parámetro “n”, define la posición axial del perfil radial.

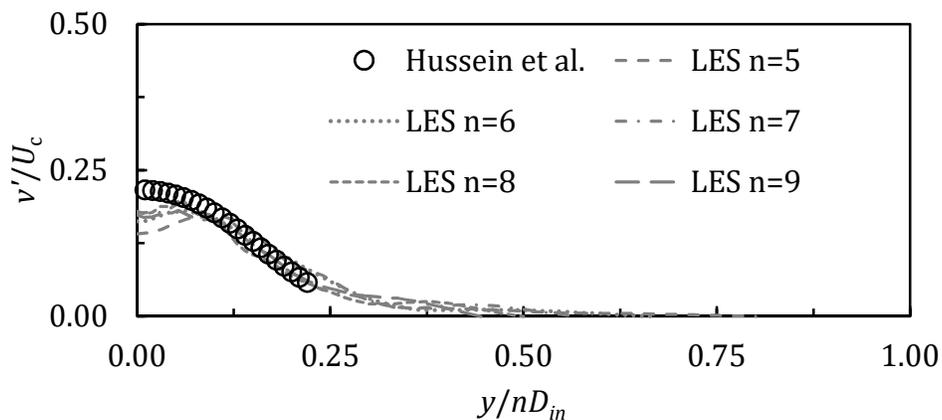


Figura C6. Perfil radial de la intensidad turbulenta normal a la dirección axial. El parámetro “n”, define la posición axial del perfil radial.

Aunando a los perfiles de velocidad, se muestran también los perfiles radiales de las fluctuaciones turbulentas de primer orden de velocidad, en las Figs. C5 y C6. De nuevo, las curvas presentan buena concordancia con los datos experimentales. Algunas subestimaciones en la región central del flujo se observan. Esto se explica, al reconocer que la transición artificial de la turbulencia en el chorro se promueve por la imposición

de ruido numérico sobre el perfil de velocidad, lo cual causa la desestabilización necesaria para el desarrollo y crecimiento del chorro. De esto se generan algunas variaciones en los perfiles de las fluctuaciones turbulentas presentadas. A modo de trabajo futuro, se trabaja en el acoplamiento de simulaciones paralelas que permitan simular proceso de inyección con flujos totalmente desarrollados antes de ser inyectados en el dominio computacional.

Chorro de densidad variable

Tal como se mencionó en el [Capítulo 1](#), los chorros de densidad variable se deben a la existencia de un gradiente de densidad. Este gradiente se cuantifica a partir de la relación de densidad (RD) que existe entre el chorro y el ambiente circundante. Las relaciones de densidad a bajas o moderadas presiones a través de la diferencia de temperatura son menores que las obtenidas al operar con diferentes especies químicas. En las [Tabla D1](#) y [D2](#), se muestran las relaciones de densidad obtenidas a diferente temperatura y diferente especie química, ambas a la misma presión. Al cambiar la especie química se genera una mayor relación de densidad. Por tanto, a bajas o moderadas presiones, la mayoría de los trabajos relacionados con los chorros de densidad variable se desarrollan considerando diferentes gases.

Tabla D1.

	<i>Fluido</i>	<i>p [kPa]</i>	<i>T [K]</i>	<i>ρ [kg/m³]</i>
Chorro	Aire	101.325	300	1.17
Ambiente	Aire	101.325	900	0.58

<i>RD</i>	3.0
------------------	------------

Tabla D2.

	<i>Fluido</i>	<i>p [kPa]</i>	<i>T [K]</i>	<i>ρ [kg/m³]</i>
Chorro	Aire	101.325	300	1.17
Ambiente	Helio	101.325	300	0.16

<i>RD</i>	7.27
------------------	-------------

Los chorros completamente supercríticos presentan características similares a los chorros de densidad variable por especie química, particularmente en el ángulo de dispersión y en su morfología. En ese sentido, se consideró importante la validación del código y determinar su capacidad de simular flujos con gradientes de densidad. Esta simulación resulta crítica como paso previo a la incorporación de las propiedades térmicas y de transporte de gas real. Los datos experimentales se extraen del caso de Amielh et al.¹⁰ Ahí, se inyectan tres gases (helio, aire y dióxido de carbono) en un coflujo de aire, el cual es concéntrico. El chorro central y el coflujo se encuentran confinados. En la [Tabla D3](#), se presentan algunas características del experimento, y en la [Fig. D1](#), se muestra un esquema de la disposición del mismo. La relación de diámetros es de 11.0, por lo que el confinamiento puede considerarse como débil ([Capítulo 1](#)). Aunque, los casos presentan diferente número de Reynolds, el flujo de momento es el mismo, $M_{in} = 0.1 N$. Así, se establece la misma condición en plano de inyección y se igualan efectos inerciales en la región inicial, la cual, es la región de mayor interés en ese trabajo. Los

subíndices *in* y *amb*, refieren a las condiciones del chorro central y del coflujo, respectivamente.

Tabla D3.

<i>Chorro</i>	ρ_{in}/ρ_{amb}	U_{in} [m/s]	U_{amb} [m/s]	<i>Re</i>	<i>Fr</i>	X_1/D_{in}
<i>He</i>	0.14	32	0.9	7000	654	7.8
<i>Aire</i>	1.0	12	0.9	21000	-	-
<i>CO₂</i>	1.5	10	0.9	32000	1147	18.8

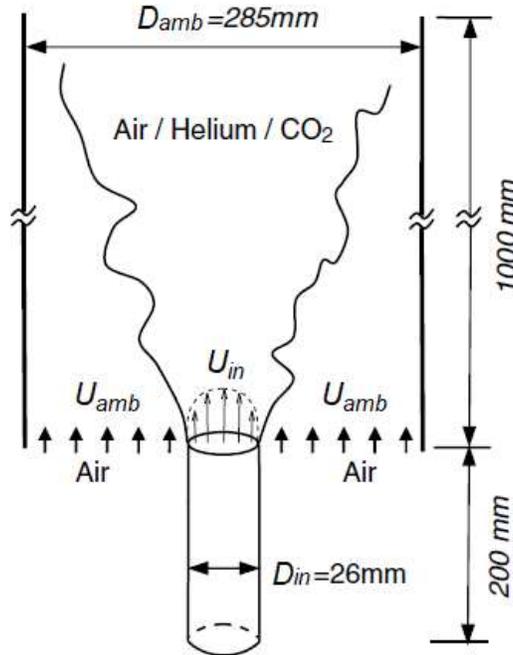


Figura D1. Esquema del experimento de chorro de densidad variable de Amielh et al.^x

El dominio computacional, para las direcciones normales al flujo se consideró con las mismas longitudes adimensionales que en caso del chorro de densidad constante. Para la dirección axial se consideró el doble de diámetros. Las ecuaciones de gobierno y los métodos numéricos aplicados para la solución de numérica del flujo con densidad variable son los mismos que para el chorro redondo del [Apéndice C](#). No obstante, es necesario agregar dos ecuaciones más. La primera, se basa en la ley de Dalton de presiones aditivas para determinar la densidad de la mezcla

$$\rho = \frac{p}{R_u T} \left[\frac{M_{m,in} M_{m,amb}}{c(M_{m,amb}) + (1 - c)M_{m,in}} \right] \quad (D2)$$

donde $M_{m,in}$ y $M_{m,amb}$, son las masas moleculares del fluido inyectado y del fluido ambiente respectivamente. El parámetro c es un escalar pasivo de concentración y su valor fluctúa entre 0 y 1.0. Si en un nodo la concentración es 1.0, la densidad es igual a

la del fluido inyectado. Para el caso donde la concentración es cero, se tiene una densidad igual a la del fluido ambiente. La segunda ecuación es la de convección-fusión para el escalar pasivo de concentración. A raves de dicha ecuación se determina la región de interacción entre el chorro y el coflujo, además de facilitar la visualización de flujo desde su morfología. La ecuación convección-difusión del escalar pasivo es la siguiente

$$\frac{\partial \rho c}{\partial t} + \frac{\partial \rho c u_i}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D_e \frac{\partial c}{\partial x_i} \right) \quad (D2)$$

donde D_e , es la coeficiente de difusión másica del escalar pasivo. Es importante mencionar que un chorro redondo de densidad constante puede ser modelado sin necesidad de eliminar estas dos ecuaciones. Esto se logra definir la misma masa molecular para el fluido inyectado y el ambiente, así como determinando el coeficiente de auto difusión. En conjunto, lo anterior permite lograr visualización de fenómenos de interés en el chorro de densidad constante como el crecimiento de la inestabilidad longitudinal (inestabilidad de Kelvin-Helmholtz), arrastre o ingesta de aire hacia el cuerpo principal del chorro, longitud del núcleo potencial, etc.

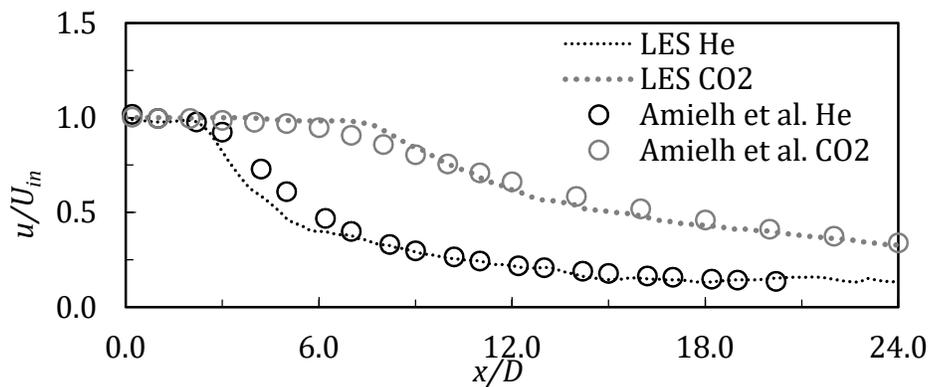


Figura D2. Perfil de velocidad promedio a lo largo del eje central del chorro.

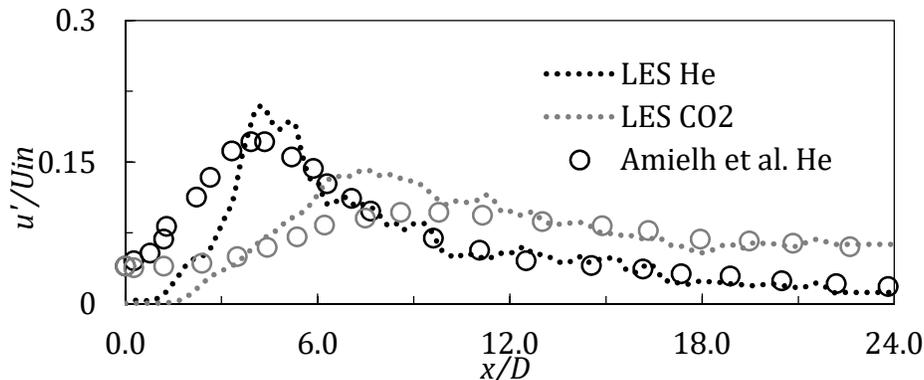


Figura D3. Perfil la rms de la componente axial de velocidad a lo largo del eje central del chorro.

La diferencia entre las relaciones de densidad promueve cambios significativos en los perfiles de velocidad. En la Fig. D2, se muestra los perfiles de velocidad para los casos de relación de densidad diferentes de 1.0. Los perfiles de CO_2 y aire son muy parecidos. En el perfil del chorro de helio se observa una pronta disminución del mismo en una distancia más corta en comparación con el chorro de dióxido de carbono. Al ser más ligero que el medio ambiente el chorro se desestabiliza y se mezcla rápidamente con el ambiente. La longitud del núcleo potencial del chorro de dióxido de carbono es casi tres veces más larga que el de helio y coincide con la idea anterior. De hecho, la longitud del núcleo potencial es una medida de la rapidez de mezclado en un chorro. Como se observa en la Fig. D3, el rápido mezclado se ve acompañado por un rápido crecimiento en la intensidad de las fluctuaciones turbulenta de la componente axial de la densidad. Las fluctuaciones más intensas se dan cerca del final del núcleo potencial del chorro de helio, con valores cercanos al 19%. Las máximas fluctuaciones en el chorro de dióxido de carbono, son 9% y se dan aguas más abajo. Lo anterior coincide con la rápida desaparición y mezclado del chorro de gas más ligero. Los perfiles promedio guardan un buen proximidad con datos experimentales. Sin embargo, se observan algunas diferencias en los primeros diámetros del dominio y se debe a la forma en cómo se promueve la transición del flujo hacia la turbulencia. Cabe mencionar, que esta diferencia no afecta la morfología y/o la aparición de estructuras coherentes clásicas o características de este fenómeno de flujo. Los ángulos de dispersión para los chorros de densidad variable son de 23° y 12° , para los chorros de helio y dióxido de carbono, respectivamente. El chorro de He presentó un error del 20% y el de CO_2 uno del 8%. El mayor porcentaje de error, que se presenta en el caso del gas más ligero, se atribuye a la cercanía de los muros con el chorro.

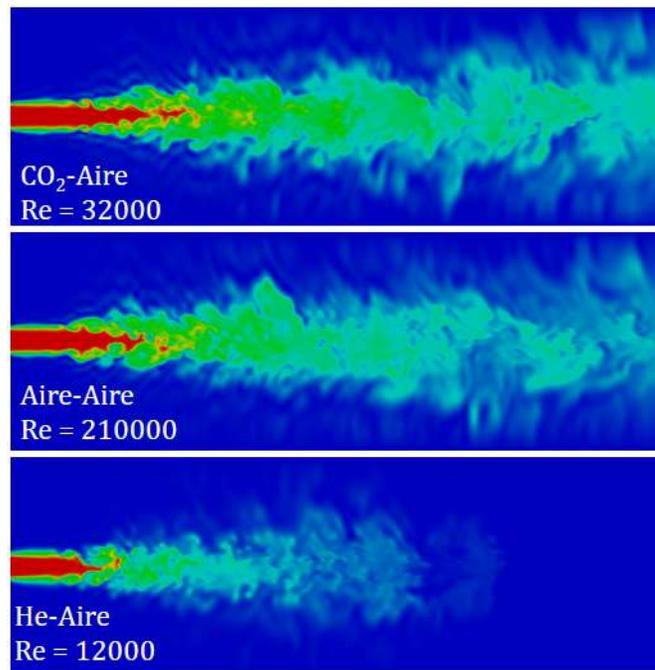


Figura D4. Esquema del experimento de chorro de densidad variable de Amielh et al.^x Los contornos abarcan una longitud adimensional de 24.0 diámetros.

En la [Fig. D4](#) se muestran los contornos de concentración en el plano central. El contorno de con el chorro de mayor densidad presenta una mayor penetración y estabilidad. Los contornos de concentración del aire y dióxido de carbono son muy similares, y es de esperarse dada su relación de densidad, es decir, el dióxido de carbono es 1.52 veces más denso que el aire. El chorro de helio presenta una morfología única en comparación con los casos más densos y se debe a que el helio es 7.23 veces menos denso que el aire. Cuando el chorro entrar en el ambiente de aire, el fluido circundante más denso empuja al menos denso y lo desestabiliza con facilidad.

Todo lo anterior, exhibe las capacidades del código para tratar con gradientes de densidad y se valida el funcionamiento del código para realizar estudios asociados al tema del chorro de densidad variable.

Por último, y aunque no era el objetivo de las simulaciones, se observan pequeños paquetes o parcelas de fluido de alta y moderada densidad que se desprenden de cuerpo principal del chorro (en los tres casos). Como se verá más adelante, estas parcelas también se observan en los chorros en estado supercrítico y representa una semejanza más entre estos fenómenos de flujo.

- [1] A. H. Lefebvre y V. G. McDonell. Atomization and sprays. 2nd Ed. Taylor & Francis Group, LLC, 2017.
- [2] C. G. Ball, H. Fellouah y A. Pollard, "The flow field in turbulent round free jets." Progress in Aerospace Sciences. 50,1 (2012).
- [3] R. C. Reid, J. M. Prausnitz y B. E. Poling. The properties of gases and liquids. 4th Ed. McGraw-Hill, 1987. 3^{er} 8^{ra} raj
- [4] B. E. Poling, J. M. Prausnitz and J. P. O'Connell. The properties of gases and liquids, 5th Ed. McGraw-Hill, Professional, 2000.
- [5] J. Bellan, "Supercritical (and subcritical) fluid behavior and modeling: drops, streams, shear and mixing layers, jets and sprays." Progress in Energy and Combustion Science, 26, 329 (2000).
- [6] B. Chehroudi, "Recent experimental efforts on high-pressure supercritical injection for liquid rockets and their implications." Int. J. Aerospace Engineering, 121802 (2012).
- [7] I. Wygnanski y H. E. Fiedler, "Some measurements in the self-preserving jet." Journal of Fluid Mechanics. 38, 577 (1969).
- [8] E. Ruffin, R. Schiestel, F. Anselmet, M. Amielh y L. Fulachier, "Investigation of characteristic scales in variable density turbulent jets using a second-order model". Physics of Fluids 6, 2785 (1994).
- [9] T. Djeridane, M. Amielh, F. Anselmet y L. Fulachier, "Velocity turbulence properties in the nearfield region of axisymmetric variable density jets". Physics of Fluids (1994-present) 8, 1614 (1996).
- [10] M. Amielh, T. Djeridane, F. Anselmet y L. Fulachier, "Velocity near-field of variable density turbulent jets". Int. J. Heat Mass Transfer. 39 (10), 2149 (1996).
- [11] P. Wang, J. Fröhlich, V. Michelassi and W. Rodi, "Large-eddy simulation of variable-density turbulent axisymmetric jets." Int. J. Heat and Fluid Flow. 29, 654 (2008).
- [12] C. J. Chen and W. Rodi, Vertical turbulent buoyant jets: A review of experimental data. Pergamon Press, 1980.
- [13] R. D. Reitz, "Modeling atomization processes in high-pressure vaporizing sprays". Atom. Spray Technol. 3, 309 (1987).

- [14] S. P. Lin y R. D. Reitz, "Drop and spray formation from a liquid jet". *Annu. Rev. Fluid Mech.* 1998. 30, 85 (1998).
- [15] B. Bonhoeffer, A. Kwade y M. Juhnke, "Impact of formulation properties and process parameters on the dispensing and deposition of drug nanosuspensions using micro-valve technology. *Journal of Pharmaceutical Sciences.* 106, 1102 (2017).
- [16] M. Santoro and F. A. Gorelli, "Structural changes in supercritical fluids at high pressures." *Physical Review B*, 77, 212103 (2008).
- [17] D. T. Banuti and K. Hannemann, "Supercritical pseudo-boiling and its relevance for transcritical injection." 50th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference, AIAA Propulsion and Energy Forum, (AIAA 2014-3571).
- [18] N. Ashgriz. *Handbook of atomization and sprays: theory and applications* (Chapter 11). 9781441972644. Springer Link: Bücher, Springer US (2011).
- [19] J. A. Newman and T. A. Brzustowski, "Behavior of a liquid jet near the thermodynamic critical region." *AIAA Journal*, 9 (8), 1595 (1971).
- [20] W. Mayer, A. Schik, B. Vielle, C. Chauveau, I. Gokalp, D. G. Talley and R. G. Woodward, "Atomization and break-up of cryogenic propellants under high-pressure subcritical and supercritical conditions." *Journal of Propulsion and Power*, 14 (5), 835 (1998).
- [21] W. Mayer, J. Telaar, R. Branam, G. Schneider and J. Hussong, "Raman measurements of cryogenic injection at supercritical pressure." *Heat and Mass Transfer*, 39, 709 (2003).
- [22] B. Chehroudi, D. Talley, and E. Coy, "Initial growth rate and visual characteristics of a round Jet into a sub- to supercritical environment of relevance to rocket, gas turbine, and diesel engines," 37th AIAA, 99-0206, Aerospace Science Meeting and Exhibit (1999).
- [23] B. Chehroudi, D. Talley, and E. Coy, "Visual characteristics and initial growth rates of round cryogenic jets at subcritical and supercritical pressures," *Physics of Fluids*, 14 (2), 850 (2002).
- [24] M. Oswald and A. Schik, "Supercritical nitrogen free jet investigated by spontaneous Raman scattering." *Exper. Fluids*, 27, 497 (1999).
- [25] J. C. Oefelein and V. Yang, "Analysis of hydrogen-oxygen mixing and combustion processes at high-pressures." 35th AIAA, 97-0798, Aerospace Sciences Meeting and Exhibit (1997).

- [26] K. Harstad and J. Bellan, "Isolated fluid oxygen drop behavior in fluid hydrogen at rocket chamber pressures." *Int. J. Heat and Mass Transfer*. 41 (22), 3537 (1998).
- [27] N. Zong, H. Meng, S. Hsieh, and V. Yang, "A numerical study of cryogenic fluid injection and mixing under supercritical conditions," *Physics of Fluids* 16(12), 4248 (2004).
- [28] T. Schmitt, L. Selle, B. Cuenot, and T. Poinso, "Large-eddy simulation of transcritical flows," *C. R. Mecanique*, 337(6), 528 (2009).
- [29] P. E. Dimotakis, "Two-dimensional shear-layer entrainment," *AIAA Journal*, 24 (11), 1791 (1986).
- [30] G. L. Brown and A. Roshko, "On density effects and large structure in turbulent mixing layers," *Journal of Fluid Mechanics*, 64 (4), 775 (1974).
- [31] L. Tseng, G. A. Ruff, P.-K. Wu, and G. M. Faeth, "Continuous- and dispersed-phase structure of pressure-atomized sprays," *Proceedings of the Progress in Astronautics and Aeronautics: Recent Advances in Spray Combustion*, 3 (1995).
- [32] W. A. Sirignano, "Fluid dynamics and transport of droplets and sprays.", Cambridge University Press, (2010)
- [33] A. Roy and C. Segal, "Experimental study of fluid jet mixing at supercritical conditions." *J. of Propulsion and Power*, 26 (6), 1205 (2010).
- [34] H. Tani, S. Teramoto and K. Okamoto, "High-speed observations of cryogenic single and coaxial jets under subcritical and transcritical conditions." *Experiments of fluids*, 56:85 (2015).
- [35] G. Ribert, D. Taieb, X. Petit, G. Lartigue and P. Domingo, "Simulation of supercritical flows in rocket-motor engines: application to cooling channel and injection system." *Progress in Propulsion Physics*, 4, 205 (2013).
- [36] X. Petit, G. Ribert, G. Lartigue and P. Domingo, "Large eddy simulation of supercritical fluid injection," *J. Supercritical Fluids*. 84, 61 (2013).
- [37] H. J. Hussein, S. P. Capps y W. K. George, "Velocity measurements in a high-Reynolds-number, momentum-conserving, axisymmetric, turbulent jet". *J. Fluid Mech*. 258, 31 (1994).
- [38] T. S. Park. "LES and RANS simulations of cryogenic liquid nitrogen jets." *J. of Supercritical Fluids*. 72, 232 (2012).

- [39] H. Müller, C. A. Niedermeier, J. Matheis, M. Pfitzner and S. Hickel. "Large eddy simulation of nitrogen injection at trans- and supercritical conditions." *Physics of Fluids*. 28, 015102 (2016).
- [40] K. K. Kuo, *Principles of combustion*, 2nd Ed. John Wiley and Sons, Inc.
- [41] M. Jarczyk and M. Pfitzner, "Large eddy simulation of supercritical nitrogen jets." *AIAA*, 2012-1270 (2012).
- [42] D. T. Banuti and K. Hannemann, "Effect of injector wall heat flux on cryogenic injection." *AIAA*. 2010-7139 (2010).
- [43] T. J. Poinso and S. K. Lele, "Boundary Conditions for Direct Simulations of Compressible Viscous Flows." *Journal of computational physics*. 101, 104 (1992).
- [44] N. Okong'o and J. Bellan, "Consistent boundary conditions for multicomponent real gas mixtures based on characteristic waves." *Journal of Computational Physics*. 176, 330 (2002).
- [45] G. Lodato, P. Domingo and L. Vervisch, "Three-dimensional boundary conditions for direct and large-eddy simulation of compressible viscous flows." *J. of Computational Physics*. 227, 5105 (2008).
- [46] M. Salinas-Vazquez and O. Metais, "Large-eddy simulation of the turbulent flow through a heated square duct." *J. Fluid Mechanics*. 453, 201 (2002).
- [47] J. M. Cubos-Ramírez, J. Ramírez-Cruz, M. Salinas-Vázquez *, W. Vicente-Rodríguez, E. Martínez-Espinosa, C. Lagarza-Cortes, "Efficient two-phase mass-conserving level set method for simulation of incompressible turbulent free surface flows with large density ratio." *Computers and Fluids* 136, 212 (2016).
- [48] J. R. Elliott and C. T. Lira. *Introductory Chemical Engineering Thermodynamics*. 2nd Ed. Prentice-Hall, 2012.
- [49] K. K. Kuo y R. Acharya. *Fundamentals of turbulent and multiphase combustion*. John Wiley & Sons, Inc., 2012
- [50] E. David. "Modelisation of compressible and hypersonic flows: an instationary approach". Grenoble Institute of Technology; 1993. Ph.D. Thesis.
- [51] M. Lesieur and O. Métais, "New trends in large eddy simulations of turbulence." *Annu. Rev. Fluid Mechanics*. 28, 45 (1996).

- [52] P. Comte and M. Lesieur, "Large-eddy simulation of compressible turbulent flows. Turbulence in compressible flows." AGARD-VKI Course, AGARD Rep., 819 (1997).
- [53] M. Salinas-Vázquez, W. Vicente-Rodríguez, C. González-Rodríguez, E. Barrios-Bonilla, A. Espinosa-Gayosso, "Large eddy simulation of a jet flow with a suction/ejection system using immersed boundary conditions." *J. Wind Eng. Ind. Aerodyn.* 98, 618 (2010).
- [54] M. Salinas-Vazquez, M. A. de la Lama, W. Vicente-Rodriguez, E. Martinez-Espinosa. " Large Eddy Simulation of a flow through circular tube bundle." *Applied Mathematical Modelling.* 35, 4393 (2011).
- [55] M. J. Schuler, T. Rothenfluh, P. Stathopoulos, D. Brkic, T. Meler and P. R. Von Rohr, "Simulating supercritical water jets with a variable turbulent Prandtl number." *Chem. Eng. Technol.* 37 (11), 1896 (2014).
- [56] J. Sierra-Pallares, J. García del Valle, P. García-Carrascal, F. Castro-Ruiz, "Numerical study of supercritical and transcritical injection using different turbulent Prandtl numbers: A second law analysis." *J. of Supercritical Fluids.* 115, 86 (2016).
- [57] S. K. Lele, "Compact finite difference scheme with spectral-like resolution." *J. Computational Physics.* 103, 16 (1992).
- [58] M. R. Visbal and D. V. Gaitonde, "On the use of high-order finite-difference schemes on curvilinear and deforming meshes." *J. Computational Physics.* 181, 155 (2002).
- [59] G. Soave, "Equilibrium constants from a modified Redlich-Kwong equation of state," *Chem. Eng. Sci.* 27(6), 1197 (1972).
- [60] S. Kim, H. Choi and Y. Kim, "Thermodynamic modeling based on a generalized cubic equation of state for kerosene/LOx rocket combustion." *Combustion and Flame.* 159, 1351 (2012).
- [61] A. D. Polyanin and A. V. Manzhirov. *Handbook of mathematics for engineers and scientists.* Chapman & Hall/CRC (2007).
- [62] NIST Chemistry WebBook, Edited by P. J. Linstrom and W. G. Mallard, NIST Standard Reference Database Number 69 (2011), URL: <http://webbook.nist.gov/chemistry/fluid/>.

- [63] D. T. Banuti and K. Hannemann. "The absence of a dense potential core in supercritical injection: A thermal break-up mechanism." *Physics of Fluids*. 28, 035103 (2016).
- [64] R. Span, E.W. Lemmon, R.T. Jacobsen, W. Wagner, and A. Yokozeki. A reference equation of state for the thermodynamic properties of nitrogen for temperatures from 63.151 to 1000 K and pressures to 2200 MPa. In P.J. Linstrom and W.G. Mallard, editors, *NIST Chemistry WebBook*, NIST Standard Reference Database Number 69. National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg MD, 20899, <http://webbook.nist.gov>, (retrieved November 12, 2010), 2013.
- [65] A. Ruiz. Unsteady numerical simulations of transcritical turbulent combustion in liquid rocket engines. Ph. D. Thesis. Toulouse University. Toulouse, France.
- [66] T. Chung, M. Ajlan, L. L. Lee and K. E. Starling, "Generalized multiparameter correlation for nonpolar and polar fluid transport properties." *Ind. Eng. Chem. Res.* 27(4), 671 (1988).
- [67] R. Branam and W. Mayer, "Characterization of cryogenic injection at supercritical pressure." *J. of Propulsion and Power*. 19 (3), 342 (2003).
- [68] M. Oswald and M. M. Micci, "Spreading angle and centerline variation of density of supercritical nitrogen jets." *Atomization and Sprays*. 11, 91 (2002).
- [69] M. W. Thring and M. P. Newby, "Combustion length of enclosed turbulent jet flames". *Fourth Symposium (International) on Combustion*.4 (1), 789 (1953).
- [70] P. Wang, J. Fröhlich, V. Michelassi and W. Rodi, "Large-eddy simulation of variable-density turbulent axisymmetric jets." *Int. J. Heat and Fluid Flow*. 29, 654 (2008).
- [71] D. Lipmann and M. Gharib, "The role of the streamwise vorticity in the near-field entrainment of round jets." *J. Fluid Mech.* 245, 643 (1992).
- [72] T. Schmitt, A. Ruiz, L. Selle and B. Cuenot, "Numerical investigation of destabilization of supercritical round turbulent jets using large eddy simulation." *Progress in Propulsion Physics*. 2, 225 (2011).
- [73] N. Okong'o and J. Bellan, "Direct numerical simulation of a transitional supercritical binary mixing layer: Heptane and nitrogen." *J. Fluid Mech.* 464,1 (2002).

- [74] E. Villermaux and C. Clanet, "Life of a flapping liquid sheet." *J. Fluid Mech.* 462, 341 (2002).
- [75] P. Marmottant and E. Villermaux, "On spray formation." *J. Fluid Mech.* 498, 73 (2004).
- [76] R. N. Dahms, and J. C. Oefelein, "On the transition between two-phase and single-phase interface dynamics in multicomponent fluids at supercritical pressures." *Physics of Fluids.* 25, 092103 (2013).
- [77] F. Battista, F. Picano and C. M. Casciola, "Turbulent mixing of a slightly supercritical van der Waals fluid at low-Mach number." *Physics of Fluids.* 26, 055101 (2014).