

Índice

Prólogo.....	13
--------------	----

Capítulo 1

Introducción.....	15
1.1 Introducción.....	15
1.2 Planteo general del problema.....	17
1.3 Nomenclatura y unidades.....	18
1.4 Química.....	19
1.5 Termoquímica.....	20
1.6 Sistemas de reacciones elementales.....	22
1.7 Reducción de sistemas esquelatales	24
1.8 Resumen de química.....	26
Referencias al Capítulo 1.....	26

Capítulo 2

Modelos y métodos.....	27
2.1 Escalares conservados.....	27
2.2 Modelos de reacción.....	28
2.3 Método de resolución numérica.....	37
Referencias al Capítulo 2.....	42

Capítulo 3

Flujos turbulentos.....	43
3.1 Ecuaciones instantáneas y promedios.....	43
3.2 Tipos de promedios	44
3.3 Propiedades de los promedios Reynolds y Favre.....	46
3.4 La ecuación de Navier-Stokes en promedio Favre.....	48

Capítulo 4

Ecuaciones de continuidad y de transporte.....	53
4.1 La ecuación de continuidad o de conservación de la masa... 53	
4.2 La ecuación general de conservación de un escalar.....	54
4.3 La ecuación de conservación de la energía.....	56
4.4 La ecuación de transporte de la fracción de mezcla.....	58
4.5 La ecuación de transporte de las especies químicas.....	58
4.6 La ecuación de transporte del avance de reacción.....	60
4.7 Resumen de las ecuaciones de transporte.....	60
4.8 Relaciones algebraicas.....	62
4.9 Cierre del modelo.....	66
Referencias al Capítulo 4.....	68

Capítulo 5

Modelos de turbulencia.....	69
5.1 Modelo de transporte de tensiones de Reynolds.....	69
5.2 Modelos de cero y una ecuación.....	70
5.3 El modelo de dos ecuaciones.....	71
5.4 Mejoras al modelo.....	76
Referencias al Capítulo 5.....	79

Capítulo 6

Condiciones de borde e iniciales	81
6.1 Condiciones de borde.....	81
6.2 Clases de fronteras.....	81
6.3 Clases de condiciones de borde.....	83
6.4 Entradas.....	84
6.5 Salidas.....	85
6.6 Paredes.....	85
6.7 Condiciones iniciales.....	91
Referencias al Capítulo 6.....	92

Capítulo 7

Diferencias y volúmenes finitos.....	93
7.1 Discretización de las ecuaciones de transporte.....	93
7.2 Celdas y volúmenes de control.....	94
7.3 Alternativas de discretización.....	97
7.4 La ecuación de transporte en diferencias y volúmenes finitos.....	101
7.5 Las condiciones de frontera	103
7.6 El número de Peclet.....	104
7.7 Otros métodos.....	105
7.8 Ubicación de las variables.....	106
7.9 La corrección de presión.....	108
Referencias al Capítulo 7.....	111

Capítulo 8

La grilla de cálculo.....	113
8.1 Tipos de grillas.....	113
8.2 Grillas cartesianas ortogonales.....	114
8.3 Grillas ajustadas al contorno (BFC).....	119
8.4 BFC, métodos diferenciales	121
8.5 BFC, métodos algebraicos.....	124
8.6 Transformación de las ecuaciones de transporte.....	126
8.7 Grillas no estructuradas.....	127
Referencias al Capítulo 8.....	131

Capítulo 9

Solución del sistema de ecuaciones	133
9.1 General.....	133
9.2 Resolvedores directos.....	134
9.3 Resolvedores iterativos.....	138
9.4 Método the Runge-Kutta.....	141
9.5 Convergencia, residuos.....	143
Referencias al Capítulo 9.....	149

Capítulo 10

Velocidades de reacción dominadas por la cinética y por la mezcla	151
10.1 Reactantes no premezclados.....	151
10.1.1 Cinética dominante.....	151
10.1.2 Mezcla dominante.....	152
10.1.3 Modelo de mezcla rápida.....	152
10.1.4 Funciones de distribución.....	157
10.1.5 El segundo momento de f.....	160
10.1.6 La velocidad de reacción.....	161
10.1.7 El método EBU.....	162
10.1.8 Velocidad de reacción.....	164
10.2 Reactantes premezclados.....	164
10.2.1 Química rápida.....	165
10.2.2 Química lenta.....	165
10.2.3 El segundo momento del avance de reacción.....	166
10.2.4 La velocidad de reacción.....	166
Referencias al Capítulo 10.....	167

Capítulo 11

Modelos de equilibrio y bases de datos	169
11.1 Bases de datos.....	169
11.2 Modelos de equilibrio.....	171
Referencias al Capítulo 11.....	174

Capítulo 12

Postprocesado.....	175
12.1 Graficadores.....	175
12.2 Postprocesado de especies menores.....	176
Referencias al Capítulo 12.....	181

Bibliografía	183
--------------------	-----

Apéndices

Apéndice A: Sistemas esqueléticos.....	187
Mecanismo GRI-Mech2.11 (Metano en aire).....	187
Apéndice B: Reducción de un sistema esquelético.....	197
Apéndice C: Ecuaciones de Navier-Stokes en varios sistemas de coordenadas.....	207
Apéndice D: Software de generación de coordenadas ajustadas al contorno.....	211
Apéndice E: Software para realizar cálculos de equilibrio químico.....	229
Apéndice F: Un programa de simulación numérica de la combustión.....	235