



Análisis de modelos sencillos para los términos difusivos del sistema conjunto gradiente de velocidad - gradiente de un escalar en mezcla escalar turbulenta mediante simulaciones Montecarlo

Trabajo fin de Máster presentado en la Universidad de Zaragoza para la obtención del grado de Máster en Mecánica Aplicada
por
Luis Hernando Cifuentes Rubio

Director:
Dr. Jesús Joaquín Martín Yagüe

POP en Ingeniería Mecánica y de Materiales
Curso Académico 2010 - 2011
Centro Politécnico Superior
Universidad de Zaragoza
Noviembre, 2010

Análisis de modelos sencillos para los términos difusivos del sistema conjunto gradiente de velocidad - gradiente de un escalar en mezcla escalar turbulenta mediante simulaciones Montecarlo

Resumen

El presente trabajo comienza con un capítulo introductorio donde se expone brevemente el contexto que motiva la investigación, los antecedentes en turbulencia, los objetivos y estructura del trabajo.

Posteriormente se describe la dinámica del flujo turbulento no reactivo, formulándose las ecuaciones de transporte del gradiente de velocidad en turbulencia homogénea e incompresible.

Se detallan las condiciones de homogeneidad e isotropía que se suponen en el estudio y se analiza el significado físico del tensor gradiente de velocidad y el papel que desempeña en la dinámica de líneas, superficies, volúmenes fluidos y evolución en un campo escalar.

Se plantea el problema de la evolución del sistema conjunto gradiente de velocidad - gradiente del escalar en la mezcla escalar turbulenta y se afronta éste por medio del método de la función densidad de probabilidad. El cierre del problema planteado se lleva a cabo con un modelo isótropo para la presión, una estimación lineal (*LMSE*) modificada para el término difusivo del gradiente de velocidad, la cual contiene una parte aleatoria para darle variabilidad al término y otra parte no lineal en función del gradiente de velocidad inicial e instantáneo que asegura la convergencia del sistema, y una estimación lineal para el término difusivo del gradiente del escalar.

Se analiza la solución numérica de los métodos para la evolución del sistema conjunto gradiente de velocidad - gradiente del escalar, teniendo en cuenta los errores tanto globales como locales, la exactitud y estabilidad. Cada sistema se resuelve mediante un método numérico de Runge - Kutta de segundo orden.

Se implementa una modelización Montecarlo para la evolución de una distribución de sistemas de gradientes, la cual reproduce numerosas características de la estadística de las pequeñas escalas, como la intermitencia en las funciones densidad de probabilidad de los tensores, así como para las magnitudes dependientes de las mismas. La estadística del campo final se analiza y se valida con resultados conocidos de *LMSE*, *DNS* y experimentales.

Finalmente se presentan las conclusiones del trabajo de forma compacta en un capítulo final.

Índice general

1. Introducción	1
1.1. Motivación	1
1.2. Estado del arte	2
1.2.1. Cascada de energía	2
1.2.2. Intermitencia	2
1.2.3. Simulación Numérica Directa	3
1.3. Objetivos del trabajo	4
1.4. Estructura del Trabajo	5
2. Dinámica del flujo turbulento no reactivo	7
2.1. Descripción del comportamiento en un flujo turbulento	7
2.2. Tensor gradiente de velocidad, vorticidad y deformación. Invariantes	9
2.2.1. Tensores gradiente de velocidad, velocidad de deformación, velocidad de rotación y vector vorticidad	9
2.2.2. Autovalores, autovectores e invariantes del los tensores gradiente de velocidad, velocidad de deformación y velocidad de rotación	10
2.2.3. Influencia del tensor gradiente de velocidad en la evolución de un campo escalar	13
3. Planteamiento del problema, modelización y resultados	15
3.1. Evolución de las <i>PDFs</i>	15
3.2. Modelos para los términos difusivos	17
3.3. Implementación del modelo	20
3.4. Campo resultante	23
4. Conclusiones	39

Capítulo 1

Introducción

La predicción de la mezcla escalar turbulenta constituye una parte esencial en numerosos problemas de la ingeniería, la industria y en proyectos medioambientales. La comprensión de la estructura de los campos de velocidades y escalares en turbulencia es todavía un problema no resuelto satisfactoriamente. No se ha podido establecer la teoría que englobe todos los fenómenos que aparecen en los flujos turbulentos y permita predecir su comportamiento en un caso general.

Este trabajo de investigación toma como herramienta el método de la función densidad de probabilidad [1, 2] para analizar el comportamiento estadístico que presenta la mezcla escalar turbulenta.

En este capítulo se expone brevemente el contexto que motiva la investigación, los antecedentes en turbulencia y finalmente, los objetivos y estructura del trabajo.

1.1. Motivación

En general, las técnicas y modelos para la predicción de flujos turbulentos constituyen una parte esencial en numerosos problemas de la ingeniería, la industria y en proyectos medioambientales. Los flujos turbulentos con escalares inertes y reactivos se presentan en numerosos procesos naturales y en muy variadas tecnologías. Sin embargo, por el momento el problema está muy lejos de ser resuelto. La enorme complejidad de estos flujos no solo excluye soluciones analíticas, sino que impide un tratamiento matemático general único y exacto, por lo que las técnicas principales para su estudio son la modelización teórica, la simulación numérica computacional y la experimentación.

En un flujo turbulento la dinámica del transporte del escalar es muy compleja dado que las ecuaciones que describen el comportamiento del campo de velocidades, que son las de Navier-Stokes [3, 4, 5, 6], son un conjunto de ecuaciones en derivadas parciales no lineales. En ellas aparecen términos que especifican fenómenos de difusión, estiramientos, cortes y rotaciones.

Conocer los efectos y la importancia relativa de estos términos es esencial en la modelización de mezcla escalar turbulenta.

1.2. Estado del arte

1.2.1. Cascada de energía

Kolmogorov [7, 8, 9] introduce en 1941 con sus dos hipótesis de semejanza una teoría para las pequeñas escalas de los flujos turbulentos a altos números de Reynolds que establece una distribución universal de la estadística de diferencias de velocidades entre puntos separados por una distancia pequeña comparada con la escala integral de la turbulencia. La primera hipótesis supone que los momentos estadísticos de estas diferencias de velocidades, llamados funciones de estructura, son funciones isótropas universales dependientes únicamente de la interdistancia, de la viscosidad cinemática y de la disipación media de energía cinética por unidad de masa. La segunda propone que sí además la separación es grande comparada con las escalas disipativas de longitud, la estadística de estas distribuciones es independiente de la viscosidad.

Ambas hipótesis conducen inmediatamente, por análisis dimensional a una relación funcional explícita del enésimo momento de las diferencias de velocidades con la disipación y la interdistancia. En el espacio de *Fourier* lo anterior implica la famosa ley de la pendiente $-5/3$ [10] en escala logarítmica para el espectro de energía en el subrango inercial, siempre que se cumpla la segunda hipótesis, es decir que la separación entre puntos sea grande frente a las escalas disipativas.

La imagen que se deduce de las ideas de *Kolmogorov* para la dinámica de la turbulencia es la de transferencia de energía de las escalas grandes a las pequeñas, donde actúa la disipación, es lo que se ha llamado *Cascada de energía de Onsager - Kolmogorov*.

1.2.2. Intermitencia

Cuando se considera estadística de ordenes más altos, los momentos normalizados (*adimensionados dividiendo por la potencia adecuada de la varianza*) de las diferencias de velocidades deberían ser, de acuerdo con las hipótesis de semejanza de *Kolmogorov*, constantes universales independientes de la interdistancia r , supuesta ésta en el subrango inercial. Por el contrario se observa una dependencia de esos momentos adimensionales con el inverso de la separación. Además esta dependencia aumenta con el número de Reynolds, es decir, con la viscosidad, y con el orden del momento considerado, lo que implica fuerte intermitencia en las pequeñas escalas [11, 12, 13]. La imagen física asociada es la de zonas de intensos gradientes de velocidad concentradas en una fracción limitada del espacio en láminas, bandas o tubos, de dimensiones tanto más pequeñas cuanto mayor es el numero de Reynolds. Esto es, las fluctuaciones de la velocidad de mayor amplitud aumentan su probabilidad, y su función de densidad de probabilidad (*en adelante PDF, Probability Density Function*) es mucho más abierta que una gaussiana,

con momentos normalizados muy diferentes a los de aquella. (*Batchelor y Townsend, 1949; Corrsin, 1972; Saffman, 1968*) [14, 15, 16]. Cuando la distancia de separación tiende a cero, la estadística de diferencias de velocidades equivale a la de gradientes de velocidad. Si la distancia aumenta, por el contrario, se obtiene comportamiento próximo al gaussiano (*Vincent y Meneguzzi, 1991; Chen et al., 1993*) [17, 18].

Tsinober et al., 1992 [19, 20]; *Zocchi et al., 1994* [21]; *Maurer et al., 1994* [22]; *Tabeling et al., 1996* [23] y *Belin et al, 1997* [24] presentan medidas experimentales en turbulencia generada por una rejilla, en la región externa de una capa límite y en un flujo entre dos discos a contra - rotación. Confirman las relaciones de isotropía entre las componentes del gradiente de velocidad predichas por *Taylor (1938)* [25], el momento de tercer orden (*asimetría*) negativo para la derivada longitudinal y la intermitencia de la disipación. Belin et al, obtienen distribuciones del gradiente de velocidad adimensionalizada con su desviación estándar adecuada, demuestran el aumento de la asimetría de la PDF con el aumento del número de Reynolds, Tsinober et al, obtienen distribuciones de producción de enstrofia (*el cuadrado del vector vorticidad*) de media positiva y alineación de la vorticidad con la dirección principal asociada al autovalor intermedio del tensor velocidad de deformación (*parte simétrica del tensor gradiente de velocidad*) y demuestran la alineación en dirección y sentido de la vorticidad con el vector "*vortex - stretching*"(*estiramiento de la vorticidad*).

Como se indicó, la noción de intermitencia implica que existen unas zonas espacialmente muy localizadas que presentan valores anormalmente altos de las variables consideradas. Si estas regiones ocupan una fracción mínima del volumen total, la contribución de estos valores altos a los momentos de orden bajo será inapreciable, pero aumentarán considerablemente en los momentos de orden más alto. Esta explicación, comúnmente aceptada, refleja por qué la teoría de Kolmogorov reproduce bien el espectro de energía, relacionado con momentos de segundo orden, y no la forma de las funciones de densidad de probabilidad, determinada por los momentos de orden mayor para valores altos (*alejados más de una desviación típica*) de la variable.

1.2.3. Simulación Numérica Directa

La simulación numérica directa (*en adelante DNS, Direct Numerical Simulation*) de las ecuaciones de *Navier - Stokes* es una poderosa herramienta para el estudio de la turbulencia y , en concreto, para la investigación en la estructura de las pequeñas escalas. Las tres componentes de la velocidad y las nueve de su tensor gradiente pueden conocerse simultáneamente en todos los puntos del campo para cualquier instante de tiempo, lo que proporciona información completa de la estadística y de la dinámica local. Como todas las escalas son resueltas sin aproximación puede estudiarse tanto el rango inercial del espectro como el rango disipativo donde los gradientes son más altos y se producen los fenómenos de intermitencia. Sin embargo la técnica de DNS está limitada por el momento a números de Reynolds moderados, ya que la

resolución espacial de las escalas disipativas acarrea unos enormes costes de memoria computacional y de tiempos de CPU. Estas limitaciones impiden conclusiones definitivas acerca de un posible estado asintótico de la turbulencia en el límite de altos números de Reynolds, pero la DNS ha servido para avanzar espectacularmente en la comprensión de la turbulencia, y ha permitido visualizar la dinámica organizada de las pequeñas escalas.

Siggia (1981) [26] reproduce y observa filamentos de vorticidad en el campo turbulento. *Kerr (1985)* [27], *Vincent y meneguzzi (1991)* [17] confirman la existencia de estructuras organizadas en forma de tubos para las regiones con vorticidad más intensa. *Jiménez et al. (1993)* [28, 29], encuentran estas mismas estructuras para la vorticidad y confirman la naturaleza no gaussiana de ésta y de las velocidades de deformación, con distribuciones de aplastamiento creciente con el número de Reynolds.

Chong, Perry y Cantwell (1990) [30, 31, 32] hacen un estudio teórico de la topología de flujos turbulentos en función de los invariantes \mathbf{P} , \mathbf{Q} , \mathbf{R} del tensor gradiente de velocidad. En una referencia lagrangiana que sigue a la partícula fluida el flujo en el origen es un punto crítico, y con una aproximación en primer orden del desarrollo de Taylor se obtiene un sistema dinámico lineal para las trayectorias próximas donde la matriz que define tal sistema es el tensor gradiente de velocidad. Estos invariantes se definen de forma análoga para el tensor velocidad de deformación (P_S , Q_S , R_S), y para el tensor velocidad de rotación, parte antisimétrica del gradiente de velocidad, Q_W . La técnica es útil para el análisis de los resultados de DNS que pueden estudiarse mediante diagramas de dispersión de los invariantes citados para la caracterización de la configuración espacial de las diferentes estructuras que puedan aparecer.

1.3. Objetivos del trabajo

El objetivo principal del trabajo es la simulación de la evolución de distribuciones estocásticas del gradiente de velocidad y el gradiente del escalar, inicialmente gaussianas, para la predicción y análisis de la estructura de una mezcla escalar turbulenta.

Se hablará a menudo en este trabajo de turbulencia homogénea, es decir con estadística equivalente en cualquier punto del fluido, e isotrópia local que significa que además esta estadística es independiente de rotaciones o reflexiones espaciales del sistema de referencia.

En este trabajo los modelos de cierre para los términos difusivos del gradiente de velocidad y del gradiente de un escalar pasivo se han formulado mediante 'frecuencias de difusión'- inversas de tiempos característicos de difusión - que dependen de forma lineal o no lineal de las variables.

En la investigación se han planteado los siguientes objetivos concretos:

- Modelizar los términos de difusión del gradiente de velocidad A_{ij} y del gradiente del escalar $C_{,j}$ mediante funciones de frecuencias que dependen de las variables del problema y probar dichos modelos mediante simulaciones por el método Montecarlo.

- Comparar la estadística de las distribuciones obtenidas con resultados experimentales y de DNS.
- Analizar las características geométricas y alineación del vector gradiente del escalar $c_{,j}$ y del tensor gradiente de velocidad $\frac{\partial u_i}{\partial x_j} = a_{ij}$ resultantes del modelo.

1.4. Estructura del Trabajo

Tras el capítulo introductorio, en el Capítulo 2 se describen las ecuaciones de transporte que describen la dinámica del flujo turbulento no reactivo, se introduce el tensor gradiente de velocidad, a_{ij} , y sus partes simétrica y antisimétrica, S_{ij} y W_{ij} respectivamente, haciendo hincapié en su relevancia en la dinámica de líneas, superficies y volúmenes fluidos. Se definen los invariantes de los tensores citados y se clasifican las geometrías definidas por ellos, en el marco de los sistemas dinámicos. Se finaliza con el papel que juegan a_{ij} y S_{ij} en la evolución de campos escalares.

En el Capítulo 3 se presenta el problema de estudio, la modelización del mismo y los resultados obtenidos. Se introduce el problema para la evolución de la PDF conjunta del tensor gradiente de velocidad y el gradiente del escalar, se detalla la implementación y cierre de los modelos mediante formulación Montecarlo y la dinámica resultante de los mismos se analiza y valida con resultados experimentales y de DNS.

Las conclusiones de la investigación se recopilan en el Capítulo 4. Algunos análisis desarrollados durante este trabajo se han anexado como apéndices ya que podrían contribuir a la interpretación de los resultados o de sus conclusiones finales.

Capítulo 2

Dinámica del flujo turbulento no reactivo

Entre los objetivos de este trabajo se encuentra el modelado numérico de la mezcla escalar turbulenta. En el capítulo anterior se ha establecido la importancia de modelar numéricamente este tipo de configuraciones. En este capítulo se introduce la descripción matemática indispensable en el análisis del problema considerado.

2.1. Descripción del comportamiento en un flujo turbulento

Las ecuaciones básicas que describen el comportamiento de un escalar inerte en un flujo turbulento pueden ser derivadas de las leyes de conservación de masa, cantidad de movimiento y energía. Resulta un sistema complicado que incluye un conjunto de ecuaciones en derivadas parciales no lineales.

Para el caso en estudio se considera un flujo con densidad ρ constante, con efectos de difusión molecular pero dinámicamente pasivo, turbulencia estadísticamente homogénea e isótropa y sin gradientes medios.

las ecuaciones que gobiernan este sistema son las siguientes:

- Ecuación de continuidad:

$$\frac{\partial u_k}{\partial x_k} = 0 \quad (2.1)$$

- Ecuación de cantidad de movimiento:

$$\frac{Du_i}{Dt} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} + \nu \nabla^2 u_i \quad (2.2)$$

donde ρ es la densidad, ν es la viscosidad cinemática y $\frac{D}{Dt}$ es el operador derivada material o sustancial, definido por:

$$\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + u_j \frac{\partial}{\partial x_j}$$

- Conservación de un escalar pasivo (*sin reacción química*):

$$\frac{Dc}{Dt} = D \nabla^2 c \quad (2.3)$$

donde D es el coeficiente de difusión molecular.

Para obtener la ecuación que rige el comportamiento del tensor gradiente de velocidad, se deriva la ecuación 2.2 respecto a x_j , de lo cual resulta:

$$\frac{Du_{i,j}}{Dt} = -u_{i,k} u_{k,j} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial^2 p}{\partial x_i \partial x_j} + \nu \nabla^2 u_{i,j} \quad (2.4)$$

El término del lado izquierdo de la ecuación 2.4 es la variación de $u_{i,j}$ siguiendo a una partícula fluida. El primer término de la derecha es cuadrático en u_{ij} , local y no lineal y actúa semejante a un término fuente de una reacción química autocatalítica. El segundo término refleja la acción de la presión. Se denominará por P_{ij} , y cumple $P_{ij} = P_{ji}$. Finalmente, el último término del lado derecho es la difusión viscosa, responsable de su decaimiento.

A lo largo de todo el estudio, por comodidad se utilizará para el tensor gradiente de velocidad la notación $a_{ij} = a_{ij}(\mathbf{x}, t) = \frac{\partial u_i(\mathbf{x}, t)}{\partial x_j}$. Se empleará además el convenio de Einstein únicamente para los subíndices latinos, mientras que los subíndices griegos repetidos no implicarán suma.

Se cumplirán siempre las relaciones:

- $\langle u_k \rangle = 0$. No hay velocidades medias.
- $a_{kk} = 0$, ($a_{11} + a_{22} + a_{33} = 0$). El tensor \mathbf{a} tiene traza nula por incompresibilidad, al igual que su parte simétrica S_{ij} .

- $\langle a_{\alpha\alpha}^n \rangle = \langle a_{\beta\beta}^n \rangle$. Todos los elementos diagonales de \mathbf{a} tienen idénticos momentos estadísticos.
- $\langle a_{\alpha\beta}^n \rangle = \langle a_{\alpha\gamma}^n \rangle = \langle a_{\beta\gamma}^n \rangle$. Todos los elementos no diagonales de \mathbf{a} tienen idénticos momentos estadísticos.
- $\frac{\partial}{\partial x_j} \langle \rangle = 0$. Las derivadas espaciales de cualquier magnitud promediada son nulas; como consecuencia de esto $\langle a_{ij} \rangle = 0$.
- Por isotropía, para las correlaciones de orden dos de los elementos de a_{ij} (Hinze, 1975) [33]:

$$\langle a_{ij} a_{kl} \rangle = -\frac{\langle \varepsilon \rangle}{30\nu} (\delta_{ij}\delta_{lk} - 4\delta_{jl}\delta_{ik} + \delta_{kj}\delta_{il}) \quad (2.5)$$

donde $\langle \varepsilon \rangle = 15\nu \langle a_{11}^2 \rangle$ es la disipación media de la energía cinética turbulenta. Las únicas no nulas son:

$$\begin{aligned} \langle a_{\alpha\alpha}^2 \rangle &= \frac{\langle \varepsilon \rangle}{15\nu} \\ \langle a_{\alpha\beta}^2 \rangle &= 2\langle a_{\alpha\alpha}^2 \rangle \\ \langle a_{\alpha\beta} a_{\beta\alpha} \rangle &= -\frac{1}{2} \langle a_{\alpha\alpha}^2 \rangle \\ \langle a_{\alpha\alpha} a_{\beta\beta} \rangle &= -\frac{1}{2} \langle a_{\alpha\alpha}^2 \rangle \end{aligned}$$

es decir, cualquier correlación de segundo orden podrá escribirse como función únicamente de $\langle a_{11}^2 \rangle$ ó de $\langle a_{12}^2 \rangle$. Análogamente cualquier correlación de orden tres puede expresarse en función de $\langle a_{11}^3 \rangle$. Así la producción de enstrofía (*magnitud que aparecerá más adelante*) puede escribirse como:

$$\langle S_{ij} \omega_i \omega_j \rangle = -\frac{35}{2} \langle a_{11}^3 \rangle \quad (2.6)$$

$\langle a_{11}^3 \rangle$ es típicamente negativo mientras que $\langle a_{12}^3 \rangle$ es nulo en turbulencia homogénea.

2.2. Tensor gradiente de velocidad, vorticidad y deformación. Invariantes

2.2.1. Tensores gradiente de velocidad, velocidad de deformación, velocidad de rotación y vector vorticidad

Es habitual descomponer el tensor gradiente de velocidad a_{ij} , en sus partes simétrica S_{ij} , y antisimétrica W_{ij} , definidas por:

- Tensor velocidad de deformación:

$$S_{ij}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{2} (a_{ij} + a_{ji}) \quad (2.7)$$

- Tensor velocidad de rotación:

$$W_{ij}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{2} (a_{ij} - a_{ji}) \quad (2.8)$$

Respectivamente W_{ij} tiene asociado un vector axial ω (*también denominado eje del tensor*) y se puede expresar en función de éste como:

$$W_{ij} = -\frac{1}{2} \varepsilon_{ijk} \omega_k \quad (2.9)$$

donde ε_{ijk} es el tensor alternador o pseudotensor de *Levi - Civitá*. Aquí ω se conoce como *vector vorticidad* y, como se puede ver fácilmente, viene definido por

$$\omega = \nabla \times \mathbf{u} \quad (2.10)$$

o en notación de subíndices

$$\omega_i = \varepsilon_{ijk} \frac{\partial u_k}{\partial x_j} = \varepsilon_{ijk} a_{kj} \quad (2.11)$$

La relación inversa de 2.9 permite escribir

$$\omega_i = \varepsilon_{ijk} W_{kj} \quad (2.12)$$

2.2.2. Autovalores, autovectores e invariantes del los tensores gradiente de velocidad, velocidad de deformación y velocidad de rotación

Para estudiar el significado físico de los tensores gradiente de velocidad, velocidad de deformación y velocidad de rotación, se hace un estudio detallado de la clasificación de todas las posibles geometrías espaciales asociadas al sistema dinámico definido por el tensor correspondiente en función de los invariantes, *Chong, Perry y Cantwell (1990)* [30].

Para el tensor a_{ij} los autovalores satisfacen la ecuación característica:

$$\lambda^3 + P\lambda^2 + Q\lambda + R = 0 \quad (2.13)$$

donde λ es un valor propio o autovalor del tensor \mathbf{a} y P, Q, R sus invariantes. Se denominan invariantes del tensor a_{ij} dado que no cambian ante una transformación de coordenadas. Identificando coeficientes en la ecuación 2.13 se obtiene:

$$\begin{aligned} P &= -(a_{11} + a_{22} + a_{33}) = -\text{traza}(\mathbf{a}) \\ Q &= \frac{1}{2} [P^2 - \text{traza}(\mathbf{a}^2)] = \frac{1}{2} (P^2 - a_{ik}a_{ki}) \\ R &= -\det(\mathbf{a}) = \frac{1}{3} [-P^3 + 3PQ - \text{traza}(\mathbf{a}^3)] \end{aligned} \quad (2.14)$$

primero, segundo y tercer invariante respectivamente.

Si se descompone \mathbf{a} en sus partes simétricas \mathbf{S} , y antisimétrica \mathbf{W} , estas expresiones de 2.14 resultan:

$$\begin{aligned}
 P &= -(S_{11} + S_{22} + S_{33}) = -\text{traza}(\mathbf{S}) \\
 Q &= \frac{1}{2} (P^2 - S_{ij}S_{ji} - W_{ij}W_{ji}) = \frac{1}{2} (P^2 - S_{ij}S_{ij} + W_{ij}W_{ij}) \\
 &= \frac{1}{2} (P^2 - |\mathbf{S}|^2 + |\mathbf{W}|^2) \\
 R &= \frac{1}{3} (-P^3 + 3PQ - S_{ij}S_{jk}S_{ki} - 3W_{ij}W_{jk}S_{ki}) \\
 &= \frac{1}{3} [-P^3 + 3PQ - \text{traza}(\mathbf{S}^3) - 3\text{traza}(\mathbf{W}^2\mathbf{S})]
 \end{aligned} \tag{2.15}$$

Introduciendo la condición de incompresibilidad, $\text{traza}(\mathbf{a}) = \text{traza}(\mathbf{S}) = 0$,

$$\begin{aligned}
 P &= 0 \\
 Q &= \frac{1}{2} (|\mathbf{W}|^2 - |\mathbf{S}|^2) \\
 R &= -\text{traza}(\mathbf{a}^3) = -\frac{1}{3}a_{ik}a_{kj}a_{ji}
 \end{aligned} \tag{2.16}$$

En efecto los valores propios de a vienen completamente determinados por los tres invariantes.

En el espacio P, Q, R , la superficie que separa regiones con valores propios reales de aquellas con valores propios complejos viene dada por el discriminante $D = 0$.

Para el caso en estudio (*flujo incompresible - figura 2.1*):

$$D = \frac{R^2}{4} + \frac{Q^3}{27} \tag{2.17}$$

En el *caso real* ($D < 0$, *velocidad de deformación > vorticidad*), las trayectorias de las partículas fluidas en un entorno del punto crítico pueden presentar topologías de nodos inestables, nodos estables, puntos de sillas con trayectorias en expansión, contracción y fijos.

En el *caso complejo* ($D > 0$, *velocidad de deformación < vorticidad*), se presentaran topologías de focos, si el eje del foco esta a compresión se presentara la configuración de foco inestable y si el eje del foco esta a tracción la topología es de foco estable.

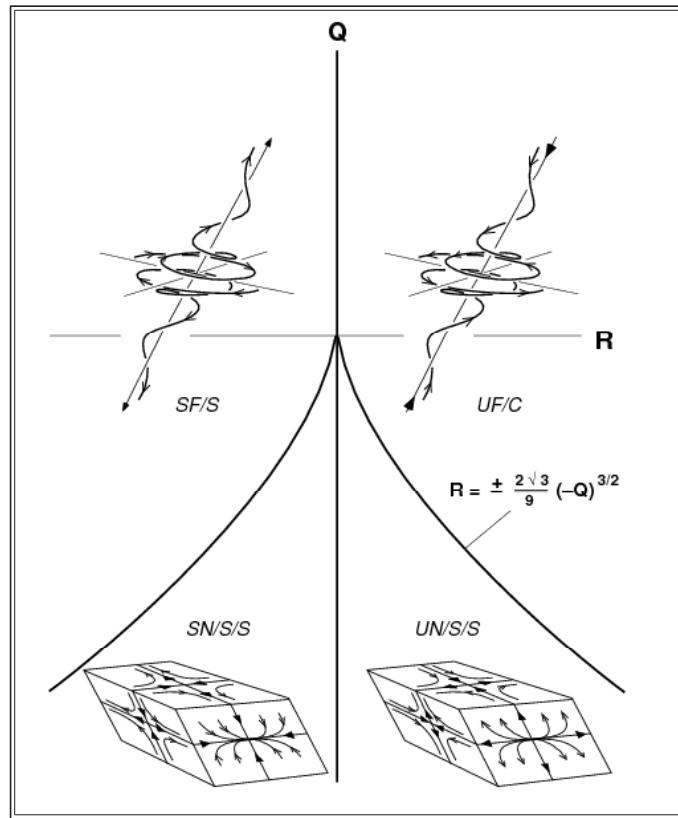


Fig. 2.1: Topología tridimensional en el plano $Q - R$ ($P=0$). Dato de Soria et al. (1992) [34]

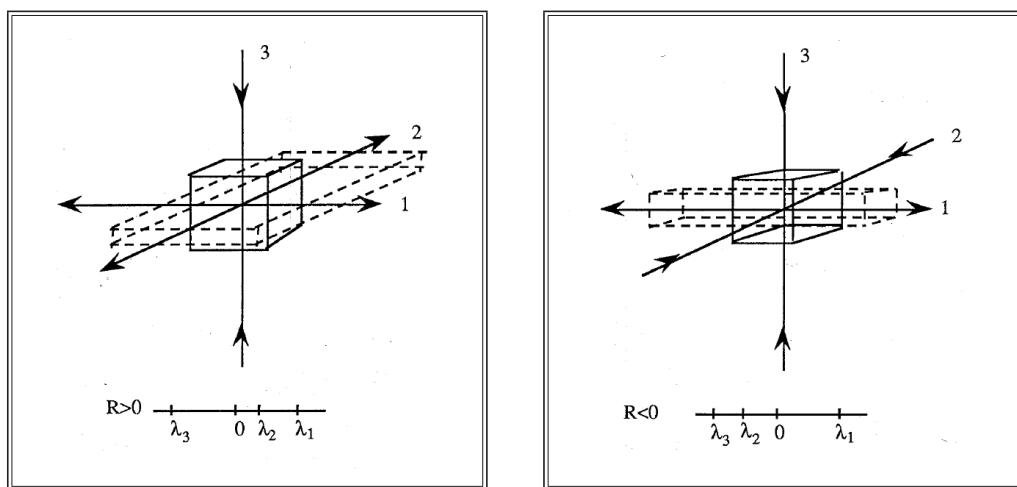


Fig. 2.2: Esbozo para la deformación de un cubo de fluido en función de λ_2 .

El tercer invariante R aporta información, en el caso real, sobre el carácter del valor propio intermedio λ_2 del tensor a_{ij} (*figura 2.2*). Si ' $R \rightarrow 0$, $\lambda_2 \rightarrow 0'$ ', si ' $R > 0$, $\lambda_2 > 0'$ ', y si ' $R < 0$, $\lambda_2 < 0'$ (*supuesto* $\lambda_1 > \lambda_2 > \lambda_3$). Entonces R positivo implica dos direcciones expansivas y una compresiva que deformarán un cubo de fluido hacia una lámina. R negativo produce, por el contrario, dos direcciones compresivas y una expansiva y el cubo en este caso se transformará en un prisma alargado.

Para el tensor S_{ij} las expresiones de los invariantes son:

$$\begin{aligned} Q_S &= \frac{1}{2} (P_S - S_{ij}S_{ji}) = -\frac{1}{2}|\mathbf{S}|^2 = -\frac{\varepsilon}{4\nu} \\ R_S &= -\frac{1}{3} (-P_S^3 + 3P_S Q_S - S_{ij}S_{jk}S_{ki}) = -\frac{1}{3} \text{traza}(\mathbf{S}^3) \end{aligned} \quad (2.18)$$

P_S es nulo por incompresibilidad.

Para el tensor W_{ij} :

$$Q_W = \frac{1}{2} (-W_{ij}W_{ji}) = \frac{1}{2}W_{ij}W_{ij} = \frac{1}{2}|\mathbf{W}|^2 = \frac{\omega^2}{4} \quad (2.19)$$

El único invariante no nulo de W_{ij} es Q_W que resulta ser la mitad de la *enstrofía*, (*el cuadrado de la vorticidad dividido por dos*, Ver Apéndice ??), y es siempre positivo.

Con respecto a los invariantes de a_{ij} , se cumplen las relaciones:

$$\begin{aligned} Q &= Q_S + Q_W \\ R &= R_S - \frac{1}{4}S_{ij}\omega_i\omega_j \end{aligned} \quad (2.20)$$

donde $S_{ij}\omega_i\omega_j$ es el llamado término de producción de enstrofía que aparece en la ecuación de variación temporal de la enstrofía $\frac{\omega^2}{2}$, (Ver Apéndice ??).

2.2.3. Influencia del tensor gradiente de velocidad en la evolución de un campo escalar

Los gradientes de c , ∇c , influyen decisivamente en la evolución del campo escalar hacia un estado de homogenización espacial. Si derivamos la ecuación de conservación de un escalar 2.3 con respecto a x_i y denotando $\frac{\partial c}{\partial x_i}$ por $c_{,i}$ (*de aquí en adelante*), se obtiene:

$$\frac{Dc_{,i}}{Dt} = -c_{,i}u_{j,i} + D\nabla^2 c_{,i} \quad (2.21)$$

El primer término del lado derecho de la ecuación 2.21 sin el signo menos se puede expresar de la siguiente manera:

$$-c_{,i}u_{j,i} = S_{ij}c_{,j} + \frac{1}{2}\varepsilon_{ijk}\omega_jc_{,k} \quad (2.22)$$

El primer término representa la contribución del tensor velocidad de deformación a la variación con el tiempo de ∇c ; el segundo término expresa la variación de ∇c debida a la velocidad angular $\frac{\omega}{2}$; esto nos hace referencia a que en la dinámica del transporte del escalar existen deformaciones de estiramiento, cortes y rotaciones debidos a los tensores velocidad de deformación y rotación.

Si se multiplica la ecuación 2.21 por $c_{,i}$ y se contraen índices, resulta la ecuación para el módulo al cuadrado del gradiente del escalar, esta variable es la llamada *disipación del escalar* y se denota como ε_c . La ecuación obtenida es:

$$\frac{\partial}{\partial t}(c_{,i} c_{,i}) + u_j \frac{\partial}{\partial x_j}(c_{,i} c_{,i}) = -2u_{j,i} c_{,i} c_{,j} + D\nabla^2(c_{,i} c_{,i}) - 2D\nabla c_{,i} \cdot \nabla c_{,i} \quad (2.23)$$

donde se ha utilizado la identidad

$$c_{,i} \nabla^2 c_{,i} = \nabla^2(c_{,i} c_{,i}) - 2\nabla c_{,i} \nabla c_{,i}$$

promediando la ecuación 2.23 se obtiene la ecuación de variación de la disipación (*ó módulo del gradiente al cuadrado*) del escalar, a saber:

$$\frac{d}{dt}\langle c_{,i} c_{,i} \rangle = -2\langle u_{j,i} c_{,i} c_{,j} \rangle - 2D\langle \nabla c_{,i} \cdot \nabla c_{,i} \rangle \quad (2.24)$$

donde por homogeneidad se han anulado las derivadas espaciales de promedios.

El segundo término de 2.24 es la *disipación de la disipación del escalar*, siempre negativo ya que el promedio es sobre un cuadrado.

El primer término, que procede del estiramiento y rotación del gradiente del escalar, es el responsable de la amplificación o reducción del módulo del gradiente de $c_{,i}$. Actúa similarmente al término de producción $S_{ij}\omega_i\omega_j$ en la ecuación de la vorticidad, ya que $u_{i,j} c_{,i} c_{,j} = S_{ij}c_{,i} c_{,j}$.

Capítulo 3

Planteamiento del problema, modelización y resultados

En este capítulo se plantea el problema en la evolución del flujo turbulento, los términos no lineales, locales, cerrados y no cerrados que se presentan en las ecuaciones del gradiente de velocidad y el gradiente del escalar, al igual que la modelización y el método para sus evoluciones en el tiempo.

3.1. Evolución de las *PDFs*

El acoplamiento explícito entre las ecuaciones del escalar y su gradiente, 2.3 y 2.21, es a través del término difusivo, para campos escalares inertes, en el caso en estudio la evolución de ∇c dada por la ecuación 2.21 no depende explícitamente de c y ésta se puede tratar independientemente de la ecuación 2.3. Combinando en este caso las ecuaciones de evolución para $c_{,i}$ y para a_{ij} , los términos que representan los efectos de las velocidades de deformación y de rotación sobre los gradientes escalares, probablemente los definitorios y caracterizantes del efecto decisivo de la turbulencia sobre el campo escalar, se reducen a términos no lineales, locales y cerrados, similares a los términos fuente en reacciones químicas autocatalíticas. Parece apropiado atacar este problema en el marco de los métodos de PDF o, equivalentemente, de los métodos estocásticos.

Se desea ahora obtener la ecuación de transporte de la PDF del tensor gradiente de velocidad y gradiente del escalar. Sea $a_{ij}(\mathbf{x}, t)$ el valor de $\frac{\partial u_i}{\partial x_j}$ en el punto \mathbf{x} en tiempo t y A_{ij} su correspondiente variable asociada en el espacio de probabilidad.

Siguiendo a *Pope (1985)* [2] y *Dopazo (1994)* [1], la evolución de la PDF conjunta del gradiente del escalar y del gradiente de velocidad $P_{a, \nabla c}$ en los espacios de probabilidades A_{ij} para el

gradiente de velocidad y $C_{,i}$ para el gradiente del escalar, se tiene:

$$\begin{aligned} \frac{DP_{a,\nabla c}}{Dt} + \frac{\partial}{\partial A_{ij}} \left(\left\langle \frac{D a_{ij}}{Dt} \mid a = A, \nabla c = \nabla C \right\rangle P_{a,\nabla c} \right) \\ + \frac{\partial}{\partial C_{,i}} \left(\left\langle \frac{D c_{,i}}{Dt} \mid a = A, \nabla c = \nabla C \right\rangle P_{a,\nabla c} \right) = 0 \end{aligned} \quad (3.1)$$

Para cerrar esta ecuación de transporte los promedios condicionados deben ser expresados en términos conocidos.

El primer término condicionado en 3.1 es debido a la evolución del tensor gradiente de velocidad en el espacio de probabilidad:

$$\frac{\partial}{\partial A_{ij}} \left(\left\langle \frac{D a_{ij}}{Dt} \mid a = A, \nabla c = \nabla C \right\rangle P_{a,\nabla c} \right) \quad (3.2)$$

Esta ecuación 3.2 es de magnitud instantánea y el gradiente del escalar no influye en ella, se presenta el desarrollo de la ecuación desde una referencia lagrangiana siguiendo la trayectoria de una partícula, la evolución de la característica en el espacio de probabilidad A corrobora la independencia condicionada al gradiente del escalar:

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{D a_{ij}}{Dt} \mid a = A \right\rangle = & \langle -a_{ik} a_{kj} \mid a = A \rangle \\ & + \left\langle -\frac{1}{\rho} \frac{\partial^2 p}{\partial x_i \partial x_j} \mid a = A \right\rangle \\ & + \langle \nu \nabla^2 a_{ij} \mid a = A \rangle \end{aligned} \quad (3.3)$$

El primer término del lado derecho en la ecuación 3.3 es simplemente $-A_{ik} A_{kj}$, que es cerrado y no necesita modelización. Los términos segundo y tercero son, respectivamente, los correspondientes a la influencia de la presión y al efecto de la difusión viscosa de la ecuación del tensor gradiente de velocidad, ambos no cerrados y contienen promedios condicionados a que el gradiente de velocidad sea A_{ij} .

El sistema de Lagrange asociado a la ecuación 3.2 es:

$$\frac{dt}{1} = \frac{dx_i}{u_i(x, t)} = \frac{dA_{ij}}{\left(\frac{D a_{ij}}{Dt} \right)_{a_{ij}=A_{ij}}} \quad (3.4)$$

De la primera igualdad en 3.4 resultan las trayectorias de las partículas fluidas en el sistema fluido y de la segunda pueden obtenerse las trayectorias de A_{ij} en el espacio de probabilidad.

Estas ecuaciones son de magnitud instantáneas, a saber:

$$dA_{ij} = \left[\left(\frac{D a_{ij}}{Dt} \right)_{a_{ij}=A_{ij}} \right] dt$$

$$\frac{dA_{ij}}{dt} = \left(\frac{D a_{ij}}{Dt} \right)_{a_{ij}=A_{ij}} = \left\langle \frac{D a_{ij}}{Dt} | a = A \right\rangle$$

y de la ecuación 3.3 tenemos:

$$\frac{dA_{ij}}{dt} = - A_{ik} A_{kj}$$

$$+ \left\langle -\frac{1}{\rho} \frac{\partial^2 p}{\partial x_i \partial x_j} | a = A \right\rangle$$

$$+ \langle \nu \nabla^2 a_{ij} | a = A \rangle \quad (3.5)$$

La ecuación 3.5 produce una evolución determinista de A_{ij} en el espacio de probabilidad o de fases, \mathbf{A} , mientras su variable instantánea asociada $a_{ij}(\mathbf{x}, t)$ es estocástica.

El segundo término condicionado en la ecuación 3.1 es debido a la evolución del tensor gradiente del escalar en el espacio de probabilidad y tiene la forma:

$$\frac{\partial}{\partial C_{,i}} \left(\left\langle \frac{D c_{,i}}{Dt} | a = A, \nabla c = \nabla C \right\rangle P_{a, \nabla c} \right) \quad (3.6)$$

Para esta ecuación del gradiente del escalar 3.6 se realiza el mismo análisis que se planteo para el gradiente de velocidad en la ecuación 3.2 y se llega a que en una referencia lagrangiana que sigue la partícula, la evolución de las características en el espacio de probabilidad, \mathbf{C} , asociado al gradiente del escalar es:

$$\frac{dC_{,i}}{dt} = - \langle c_{,j} a_{ji} | a = A, \nabla c = \nabla C \rangle + \langle D \nabla^2 c_{,i} | a = A, \nabla c = \nabla C \rangle \quad (3.7)$$

donde A_{ji} es la variable asociada a $a_{ji}(\mathbf{x}, t)$ en el espacio de probabilidad \mathbf{A} .

En la ecuación 3.7 el primer término del lado derecho resulta $-C_{,j} A_{ji}$ y es cerrado, mientras que el segundo es no cerrado, este es correspondiente al efecto de la difusión viscosa del tensor gradiente del escalar.

$$\frac{dC_{,i}}{dt} \equiv -C_{,j} A_{ji} + \langle D \nabla^2 c_{,i} | a = A, \nabla c = \nabla C \rangle \quad (3.8)$$

3.2. Modelos para los términos difusivos

El término viscoso en las ecuaciones 3.5 y 3.8 es formalmente idéntico al de difusión másica que aparece en problemas de mezcla de escalares.

Autores como Dopazo [35, 36], Girimaji [37], Pope [2] y otros, han propuestos cierres para este

término difusivo y han contribuido formidablemente en la interpretación de las topologías de flujos turbulentos.

Dopazo [35, 36] sugiere un modelo determinista para la difusión condicionada al valor del escalar $C(\mathbf{x}, t) = \phi$ expresable como:

$$\langle D\nabla^2 C(\mathbf{x}, t) | C(\mathbf{x}, t) = \phi \rangle = -k(\phi - \langle C \rangle) \quad (3.9)$$

donde ϕ es la variable asociada a $C(\mathbf{x}, t)$ en el espacio de probabilidad. En este modelo la variable ϕ se desplaza hacia la media, $\langle C \rangle$, con una velocidad proporcional a su distancia a ella. La constante k puede considerarse el inverso de un tiempo característico de decaimiento de las fluctuaciones del campo escalar, que se elige de modo que ajuste la caída de la varianza del escalar. Este modelo, que se denominará [35] *LMSE (Linear Mean Square Estimation)*, no altera ni la media ni la forma de la PDF.

De lo anterior, para la ecuación 3.5 el cierre de los dos últimos términos de promedios condicionados para este trabajo fueron modelados usando una aproximación isotrópica del tensor Hessiano para la presión (*J. Martín, C. Dopazo, and L. Valiño, 1998* [38]) y una aproximación estimada para la difusión viscosa inspirada en el modelo *LMSE (Dopazo, 1974* [35]).

El resultado de la ecuación 3.5 queda de la siguiente manera:

$$\frac{dA_{ij}}{dt} \equiv -A_{ik}A_{kj} + \frac{1}{3}\delta_{ij}A_{lm}A_{ml} - \omega_0 A_{ij} \quad (3.10)$$

donde la constante ω_0 , que tiene dimensiones de inverso de tiempo, puede asociarse con un tiempo característico de decaimiento $\tau_a = \omega_0^{-1}$, de los gradientes del campo de velocidad.

Asimismo el término difusivo de la ecuación 3.8 se cerró con un modelo LMSE y su resultado es:

$$\frac{dC_{,i}}{dt} \equiv -C_{,j}A_{ji} - \omega_1 C_{,i} \quad (3.11)$$

ω_1 se considera como la frecuencia asociada al decaimiento viscoso del gradiente del escalar.

En el caso del tensor a_{ij} , la convergencia para el sistema dependerá, sin embargo, del valor de ω_0 ; pero, para todo valor inicial $A_{ij}(0)$, ($i = 1, \dots, 3, j = 1, \dots, 3$), existe un valor de ω_0 tal que $A_{ij}(t \rightarrow \infty) \rightarrow 0$, este valor no necesita ser mayor de dos ó tres veces el módulo $\|\mathbf{A}\|$, (*se usa la definición de módulo para matrices: $\|\mathbf{A}\| = (A_{ij}A_{ij})^{\frac{1}{2}}$*), (*J. Martín, 1995* [39]).

En este trabajo el modelo propuesto de ω_0 se compone de una parte constante/aleatoria y otra parte no lineal en función del módulo inicial $\|A_{ij}^{(n)}(0)\|$ y el módulo de la partícula montecarlo en cada instante $\|A_{ij}^{(n)}(t)\|$. La primera parte le da variabilidad a la relajación del sistema y la segunda le da convergencia debido a que los términos cuadráticos que existen en la ecuación 3.10 pueden dominar sobre la difusión lineal empleada en la evolución del modelo; cabe resaltar que usando el modelo LMSE lineal y constante el gradiente de velocidad diverge en tiempo

finito.

$$\omega_0 = \omega_a + \omega_b \quad (3.12)$$

De la ecuación 3.10 tenemos:

$$\begin{aligned} \frac{dA_{ij}}{dt} &= -A_{ik}A_{kj} + \frac{1}{3}\delta_{ij}A_{lm}A_{ml} - \omega_0 A_{ij} \\ \frac{dA_{ij}}{dt} &= -A_{ik}A_{kj} + \frac{1}{3}\delta_{ij}A_{lm}A_{ml} - (\omega_a + \omega_b)A_{ij} \end{aligned} \quad (3.13)$$

La parte constante/aleatoria en 3.12 es llamada ω_a :

$$\omega_a = \mu_a(1 + rand) \quad (3.14)$$

$rand$ es una variable gaussiana de media cero y varianza uno, por tanto es la parte aleatoria de ω_a , y μ_a es la parte constante. Las dos partes ($rand$ y μ_a) cumplen con la condición de tener un valor en cada paso de tiempo menor a tres veces el módulo $\|\mathbf{A}\|$ (J. Martín, 1995 [39]). Bajo los parámetros empleados, el valor de $\mu_a = 2,55s^{-1}$.

La parte que garantiza la convergencia de los gradientes A_{ij} es ω_b :

$$\omega_b = \mu_b \left(\frac{\|A_{ij}(t)\|}{\|A_{ij}(0)\|} \right)^2 \quad (3.15)$$

La frecuencia ω_b esta regulada con el módulo al cuadrado de la partícula montecarlo en cada instante. De acuerdo a la ecuación 3.13, con ω_b y A_{ij} en el último término, la difusión contiene un término cubico que dominará sobre el término cuadrático de estiramiento si los gradientes crecen. Por tanto esta parte garantiza la no divergencia a ∞ de los gradientes A_{ij} . Si el módulo $\|A_{ij}(t)\|$ respecto a $\|A_{ij}(0)\|$ en la ecuación 3.15 es muy grande, su resultado elevado al cuadrado lleva a ω_b a valores más altos para relajar el gradiente en el instante (ecuación 3.13) y viceversa. μ_b es la parte que hace que ω_b sea pequeña dado que el aporte de ω_b a ω_0 debe cumplir con la condición de tener un valor en cada paso de tiempo menor a tres veces el módulo $\|\mathbf{A}\|$. Bajo los parámetros empleados se ha tomado $\mu_b = 0.05s^{-1}$.

El último término en la ecuación 3.13 queda:

$$\omega_0 A_{ij} = (\omega_a + \omega_b)A_{ij} = \begin{vmatrix} (\omega_{a_{11}} + \omega_{b_{11}})A_{11} & (\omega_{a_{21}} + \omega_{b_{21}})A_{21} & (\omega_{a_{31}} + \omega_{b_{31}})A_{31} \\ (\omega_{a_{12}} + \omega_{b_{12}})A_{12} & (\omega_{a_{22}} + \omega_{b_{22}})A_{22} & (\omega_{a_{32}} + \omega_{b_{32}})A_{32} \\ (\omega_{a_{13}} + \omega_{b_{13}})A_{13} & (\omega_{a_{23}} + \omega_{b_{23}})A_{23} & (\omega_{a_{33}} + \omega_{b_{33}})A_{33} \end{vmatrix} \quad (3.16)$$

Por lo descrito, con el modelo propuesto existirán frecuencias ω_0 distintas en cada paso de tiempo para cada componente del tensor a_{ij} de las partículas montecarlo. Cabe señalar que para el tensor a_{ij} , en cada paso de tiempo, se ajustan las componentes de su diagonal de modo que $a_{11} + a_{22} + a_{33} = 0$, respetando de esta manera la condición de incompresibilidad, $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$.

Para el gradiente del escalar, ecuación 3.11, la característica aleatoria y no divergente del gradiente de velocidad influye favorablemente en su evolución, por tal motivo se ha escogido ω_1 de manera lineal y constante. Bajo los parámetros empleados se ha tomado a $\omega_1 = 1.5s^{-1}$ ya que con este valor cumple con la condición de tener un valor en cada paso de tiempo menor a tres veces el módulo $\|\mathbf{C}\|$.

3.3. Implementación del modelo

La ecuación 3.10 cerrada para las características del gradiente de velocidad y la ecuación 3.11 cerrada para las del gradiente del escalar se simularon mediante el *Método Montecarlo* [1, 39, 40, 41, 42, 43, 6], los resultados brindan la evolución de la PDF conjunta de A_{ij} y $C_{,i}$ de la ecuación 3.1, obteniéndose información detallada del flujo turbulento.

En el método de Montecarlo la PDF conjunta es representada bajo un conjunto de realizaciones de N partículas estocásticas. Cada partícula

$$\left[A_{ij}^{(n)}(t), C_{,i}^{(n)}(t) \right]$$

debe satisfacer las ecuaciones 3.10 y 3.11.

Para la ecuación 3.10 que es la evolución del gradiente de velocidad, el problema que se ha de abordar es el estudio de la estadística que implica la evolución de una muestra, $A_{ij}^{(n)}(t), n = 1, \dots, NP$, con distribución inicialmente gaussiana, que satisfaga las adecuadas relaciones entre momentos de orden dos de acuerdo con lo expresado en la ecuación 2.5, tal que cada $A_{ij}^{(n)}(t)$ obedezca la ecuación 3.10. Se tiene por tanto un método Montecarlo que simula la evolución de la función densidad de probabilidad de A_{ij} en términos de las trayectorias de un conjunto de partículas con valores $A_{ij}^{(n)}(t)$ que la representan en todo instante, a partir de la distribución inicial citada.

Las correlaciones iniciales de orden dos entre las componentes de $A_{ij}^{(n)}$ deben cumplir la ecuación 2.5. Las únicas no nulas (*Hinze, 1975*) [33], son:

$$\langle A_{\alpha\alpha} A_{\beta\beta} \rangle = -\frac{1}{2} \langle A_{\alpha\alpha}^2 \rangle$$

$$\langle A_{\alpha\beta} A_{\beta\alpha} \rangle = -\frac{1}{2} \langle A_{\alpha\alpha}^2 \rangle$$

$$\langle A_{\alpha\beta}^2 \rangle = 2 \langle A_{\alpha\alpha}^2 \rangle$$

Se tomó inicialmente una distribución de gradientes tal que $\langle A_{\alpha\alpha}^2 \rangle = 1$, $\langle A_{\alpha\beta}^2 \rangle = 2$, y $\langle A_{\alpha\beta} A_{\beta\alpha} \rangle = -0.5$. Cada partícula Montecarlo $A_{ij}^{(n)}$ ha de cumplir, además, la condición de incompresibilidad, $A_{11}^{(n)} + A_{22}^{(n)} + A_{33}^{(n)} = 0$.

Para cumplir las condiciones, se toma un conjunto de variables gaussianas independientes $x_1^{(n)}, \dots, x_{12}^{(n)}, n = 1, \dots, NP$ con matriz de covarianza unidad, es decir $\langle x_i x_j \rangle = \delta_{ij}$. Para los elementos diagonales se toman combinaciones lineales de las tres primeras:

$$A_{11}^{(n)}(0) = a_1 x_1^{(n)} + a_2 x_2^{(n)} + a_3 x_3^{(n)}$$

$$A_{22}^{(n)}(0) = b_1 x_1^{(n)} + b_2 x_2^{(n)} + b_3 x_3^{(n)}$$

$$A_{33}^{(n)}(0) = c_1 x_1^{(n)} + c_2 x_2^{(n)} + c_3 x_3^{(n)}$$

De la incompresibilidad y la condición de varianza unidad resulta un sistema de ecuaciones para los coeficientes. Una solución es:

$$a_1 = b_2 = c_3 = 1/\sqrt{2}$$

$$a_2 = b_3 = c_1 = -1/\sqrt{2}$$

$$a_3 = b_1 = c_2 = 0$$

Con los elementos no diagonales se procede de forma similar. Se toman del tensor el elemento (1 2) y (2 1) como combinaciones lineales de tres gaussianas diferentes de las primeras

$$A_{12}^{(n)}(0) = d_1 x_4^{(n)} + d_2 x_5^{(n)}$$

$$A_{21}^{(n)}(0) = e_1 x_4^{(n)} + e_2 x_5^{(n)}$$

Las condiciones de isotropía dan lugar a un nuevo sistema. Una solución sencilla es:

$$d_1 = d_2 = 1$$

$$e_1 = -1/2$$

$$e_2 = \sqrt{7}/2$$

Procediendo de manera análoga con los pares (1 3, 3 1) y (2 3, 3 2) (*elementos del tensor*) se obtiene una distribución inicial gaussiana para las componentes del tensor gradiente de velocidad, todas están vienen dadas por:

$$A_{11}^{(n)}(0) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(x_1^{(n)} - x_2^{(n)} \right)$$

$$A_{22}^{(n)}(0) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(x_2^{(n)} - x_3^{(n)} \right)$$

$$A_{33}^{(n)}(0) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(x_3^{(n)} - x_1^{(n)} \right)$$

$$A_{12}^{(n)}(0) = x_4^{(n)} + x_5^{(n)}$$

$$A_{21}^{(n)}(0) = -\frac{1}{2}x_4^{(n)} + \frac{\sqrt{7}}{2}x_6^{(n)}$$

$$A_{13}^{(n)}(0) = x_7^{(n)} + x_8^{(n)}$$

$$A_{31}^{(n)}(0) = -\frac{1}{2}x_7^{(n)} + \frac{\sqrt{7}}{2}x_9^{(n)}$$

$$A_{23}^{(n)}(0) = x_{10}^{(n)} + x_{11}^{(n)}$$

$$A_{32}^{(n)}(0) = -\frac{1}{2}x_{10}^{(n)} + \frac{\sqrt{7}}{2}x_{12}^{(n)}$$

Una vez obtenida la distribución $A_{ij}^{(n)}(t = 0)$, cada una de las partículas se mueve en el espacio de probabilidades según la ecuación 3.10.

La solución numérica [44] de la ecuación 3.10 implica dos tipos de errores:

- Errores de *truncamiento*, o de discretización, originados por la naturaleza de las técnicas empleadas para aproximar los valores de la variable dependiente.
- Errores de *redondeo*, causados por el número limitado de cifras significativas que una computadora puede retener.

Los errores de truncamiento se componen de dos partes. La primera es un *error de truncamiento local* que resulta de una aplicación del método considerado, en un solo paso. La segunda es un *error de truncamiento propagado* que resulta de las aproximaciones producidas durante los pasos previos. La suma de los dos es el *error de truncamiento global o total*.

Al adquirir cierta comprensión de la magnitud y de las propiedades del error de truncamiento, puede desarrollarse el método numérico directamente de la expansión de la serie de Taylor. Para ello, obsérvese que la ecuación 3.10 tiene la forma:

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y) \quad (3.17)$$

Si la solución (es decir, la función que describe el comportamiento de y) de la ecuación 3.17 tiene derivadas continuas, se representa por un desarrollo en serie de Taylor respecto a un valor inicial (x_i, y_i) , como sigue:

$$y_{i+1} = y_i + f(x_i, y_i)h + \frac{f'(x_i, y_i)}{2!}h^2 + \cdots + \frac{f^{(n-1)}(x_i, y_i)}{n!}h^n + O(h^{n+1}) \quad (3.18)$$

Se advierte que el error de truncamiento local es del orden de $O(h^{n+1})$ y el error de truncamiento global es del orden de $O(h^n)$ [44], los dos proporcionales al tamaño de paso elevado a las potencias citadas.

De lo anterior, podemos notar que este error de truncamiento puede determinarse como la discrepancia que existe entre la expansión de la serie de Taylor truncada y la de la solución verdadera. En un método de primer orden, como los de Euler, se pierde información valiosa

ya que corresponden en la serie de Taylor hasta el término $f(x_i, y_i)h$ inclusive, dejando fuera una parte de la solución verdadera. Estos errores disminuyen en tanto aumenta el orden del método, por tal motivo un método de primer orden que va con un error de truncamiento global de $O(h)$ dará resultados menos exactos frente a un método de Runge - Kutta de segundo orden que va con un error de $O(h^2)$.

Cabe resaltar que las relaciones de recurrencia en el método Runge - Kuta incorporan información del paso anterior para la variable a calcular, esto disminuye los errores relativos tanto locales como globales. Aumentando el orden del Runge - Kuta aumentan las relaciones de recurrencia ganando mayor información para la solución, de aquí que sean más estables y exactos para h pequeños frente a los métodos de primer orden.

Por lo descrito y teniendo en cuenta que se quiere obtener una solución muy próxima a la exacta, se ha escogido un método de Runge - Kutta de segundo orden para la solución numérica de la ecuación 3.10. La versión del método Runge - Kutta de segundo orden es:

$$A_{ij}^{(n)}(t + \Delta t) = A_{ij}(t) + k_2 \Delta t \quad (3.19)$$

donde las relaciones de recurrencia en este caso son:

$$\begin{aligned} k_2 &= \Delta_{ij} \left(\mathbf{A}^{(n)}(t) + \frac{1}{2} \mathbf{k}_1 \Delta t \right) \\ k_1 &= \Delta_{ij} \left(\mathbf{A}^{(n)}(t) \right) \end{aligned} \quad (3.20)$$

siendo Δ_{ij} el lado derecho de la ecuación 3.10 aplicado a $A_{ij}^{(n)}(t)$.

A la ecuación 3.11 concerniente a la evolución de las características en el espacio de probabilidad, \mathbf{C} , asociado al gradiente del escalar se le realiza el mismo procedimiento de partículas Montecarlo. $C_{,i}^{(n)}(0)$ se toma de componentes gaussianas independientes, con matriz de covarianzas unidad y sin correlación con $A_{ij}^{(n)}(0)$.

Finalmente se modeliza la PDF conjunta de A_{ij} y $C_{,i}$, mediante el conjunto de partículas $(A_{ij}^{(n)}, C_{,i}^{(n)})$ que la representa en todo instante. La evolución se detiene cuando los momentos de segundo orden de las distribuciones de $C_{,i}$ llegan a 1/100 de su valor inicial. Con un paso temporal $\Delta t = 0.01s$ se consigue una integración suficientemente precisa del sistema. El tiempo final se toma $t_f \approx 1.5s$, a partir del cual las varianzas de las distribuciones de $C_{,i}$ son menores a 1/100 de su valor inicial. El número de muestras es $NP = 10^6$, que resulta suficiente para obtener estadística final estable.

3.4. Campo resultante

El modelo de difusión propuesto, al ser inspirado en LMSE, asocia a ω con un tiempo característico de decaimiento de las fluctuaciones del campo escalar. Este comportamiento hace que la variable ϕ de la ecuación 3.9 se desplace hacia la media del campo, $\langle C \rangle$.

Las distribuciones de $C_{,i}$ del caso en estudio tienen como varianza inicial la unidad. Como el modelo LMSE desplaza esta varianza hacia el cero, se toma como criterio detener la evolución del sistema conjunto gradiente de velocidad - gradiente del escalar cuando la varianza de las componenetes del gradiente del escalar, $\langle c_{,i}^2 \rangle$, llega a 1/100 de su valor inicial.

La figura 3.1 muestra la evolución de la varianza del gradiente del escalar, $\langle c_{,1}^2 \rangle$. En ella se aprecia como el modelo propuesto relaja las fluctuaciones del campo del gradiente del escalar a través del tiempo.

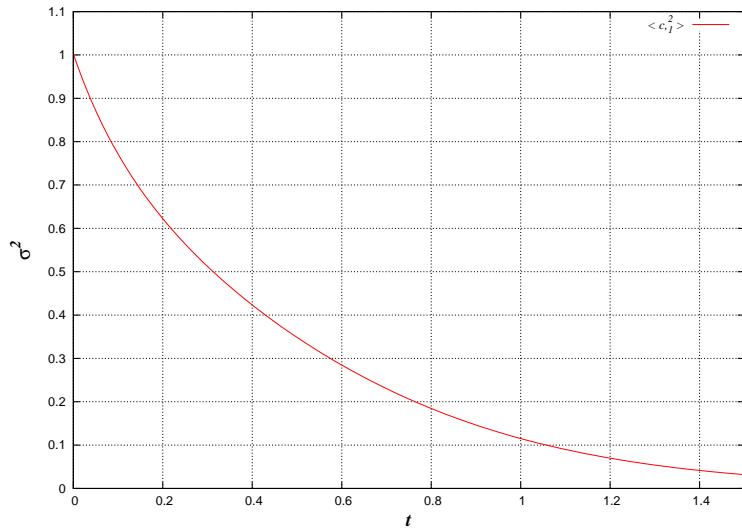


Fig. 3.1: Evolución de la varianza, $\langle c_{,1}^2 \rangle$, del modelo

En este trabajo se ha realizado una simulación con un modelo LMSE lineal y constante [39] para conocer sus ventajas y deficiencias en cuanto al modelo propuesto. A continuación se manifiestan los resultados más relevantes.

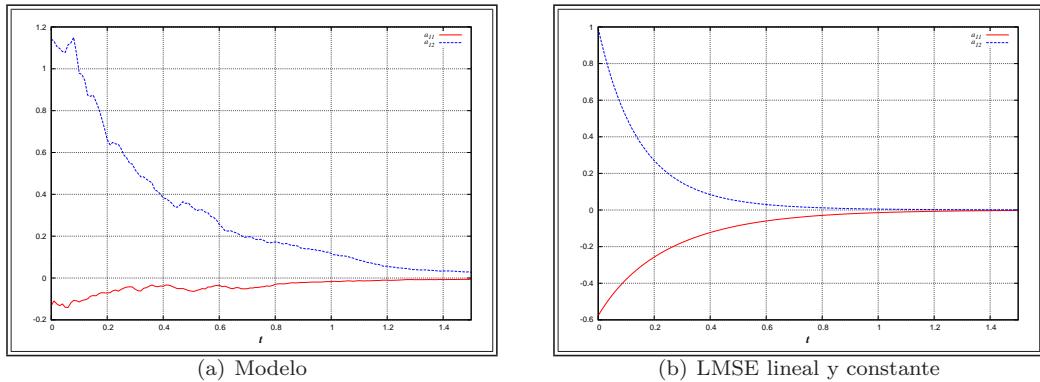


Fig. 3.2: Evolución de los valores a_{11} y a_{12} de una partícula Montecarlo

En la figura 3.2 se presenta el comportamiento en la evolución de una partícula Montecarlo cualquiera. Podemos observar que con el modelo propuesto la evolución tiene una parte estocástica, mientras que con el modelo LMSE lineal y constante es determinista, sin fluctuaciones aleatorias. Esta parte del modelo contribuye favorablemente en los resultados ya que es poco realista encontrar evoluciones deterministas en un flujo turbulento.

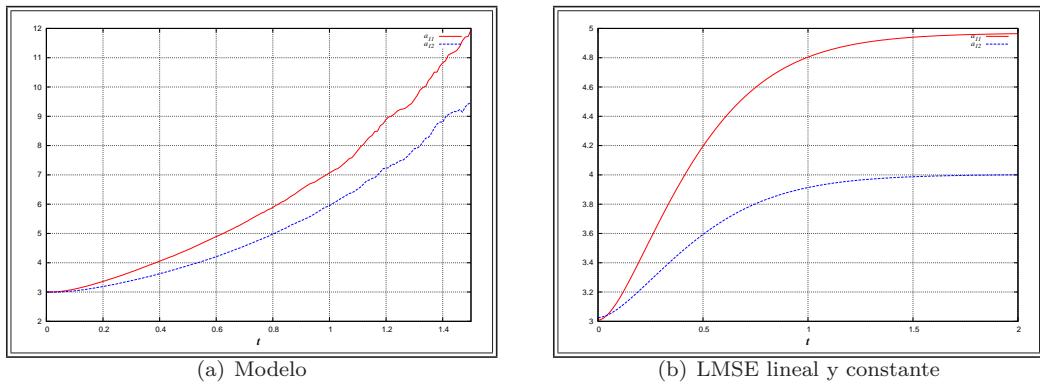


Fig. 3.3: Evolución del flatness de a_{11} y a_{12}

Podemos observar en la figura 3.3 la evolución del aplastamiento para ambos modelos. Se aprecian claramente las diferencias entre la evolución según el modelo propuesto, con una parte aleatoria, y la evolución determinista que ofrece a través del tiempo el modelo LMSE lineal y constante.

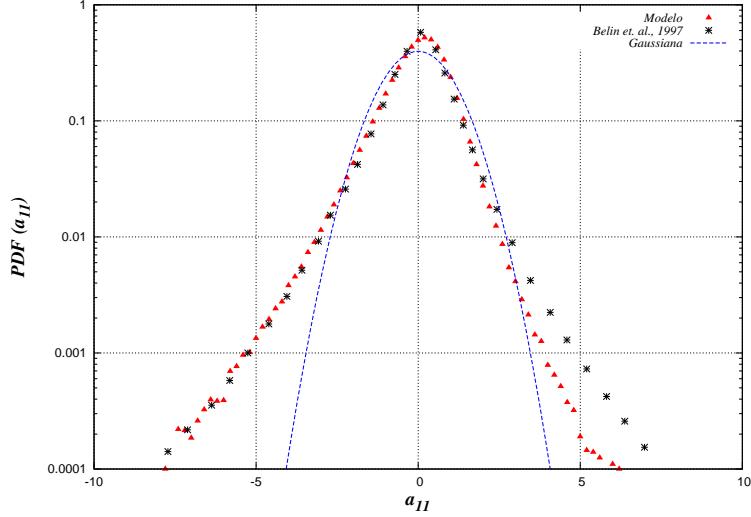
Otra característica a considerar es que los momentos de cuarto orden para las componentes diagonales de a_{ij} en el modelo propuesto y el modelo LMSE lineal y constante son mucho mayores que los de las no diagonales, figura 3.3. Este hecho resulta poco realista dado que las componentes de la vorticidad son variables intermitentes con distribuciones similares a las de las componentes no diagonales de a_{ij} , por tanto los aplastamientos para las componentes no diagonales deben ser mayores que las componentes diagonales.

A continuación se exponen y se validan los resultados de la modelización. La validación de la estadística obtenida se realiza mediante referencias experimentales (*F. Belin et al, 1997*) [24] y de campos obtenidos por DNS (*J. Martín, C. Dopazo, and L. Valiño, 2001*) [45].

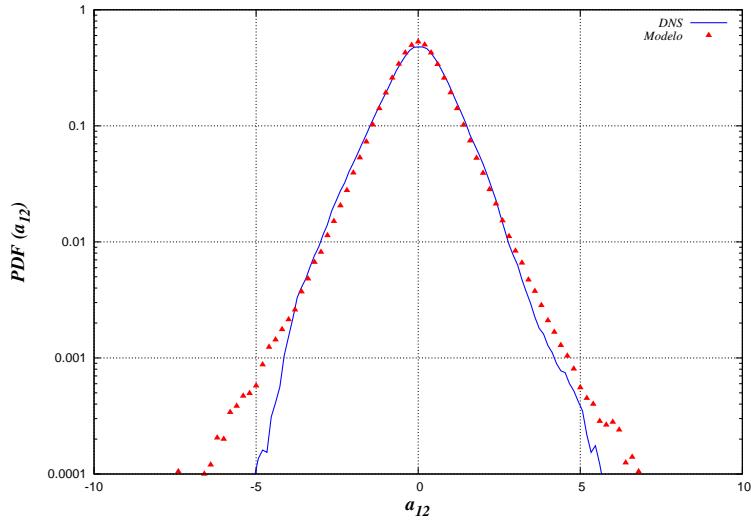
Cada una de las PDFs están adimensionalizadas con la desviación típica adecuada, y en escala Lognormal para apreciar con detalle la estadística intermitente obtenida.

La figura 3.4 representa la PDF de a_{11} . Esta es comparada con la distribución medida en un flujo turbulento (*F. Belin et al.*) [24] con $R_{e_\lambda} = 1500$ y una PDF gaussiana. Observamos claramente como el modelo propuesto representa fuertemente la intermitencia de las pequeñas escalas.

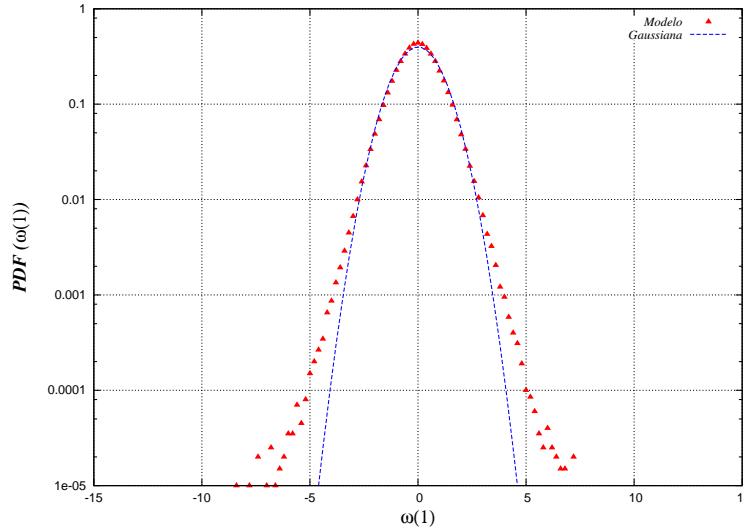
En flujos turbulentos (*números de Reynolds altos*) la representación de las PDFs se alejan de

Fig. 3.4: PDF final para a_{11}

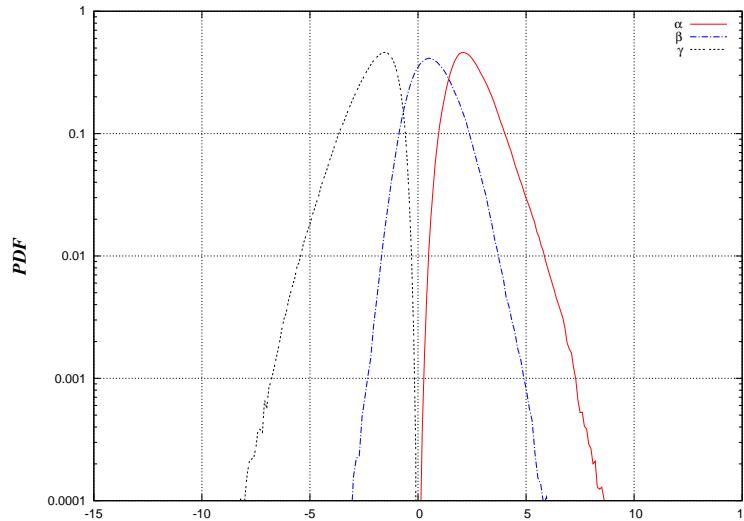
la gaussianidad, y por lo visto en la figura 3.4 el modelo representa de manera cualitativa y cuantitativamente aproximada este comportamiento.

Fig. 3.5: PDF final para a_{12}

La $P(a_{12})$ de a_{12} es comparada en la figura 3.5 con resultados de DNS de tamaño 128^3 (*J. Martín, C. Dopazo, and L. Valiño*) [45] con un $R_{e_\lambda} \simeq 47$. El modelo presenta caídas exponenciales de forma simétrica que siguen el comportamiento conocido de DNS. La PDF de una componente de la vorticidad se muestra en la figura 3.6, esta resulta casi gaussiana,

Fig. 3.6: PDF final para $\omega(1)$

contrariamente al hecho establecido de que las componentes de la vorticidad son variables intermitentes con distribuciones similares a las de las componentes no diagonales de a_{ij} , figura 3.5. El modelo falla en la estadística para momentos altos de la vorticidad.

Fig. 3.7: PDF final de DNS para los autovalores α , β y γ de S_{ij}

El tensor S_{ij} , por ser simétrico, tiene siempre tres autovalores propios reales que además, por la incompresibilidad, suman cero. Se denotarán estos autovalores por α , β y γ , con $\alpha > 0$ y $\gamma < 0$. β es el intermedio, que puede tener cualquier signo, figura 2.2. *Betchov (1956)* [46]

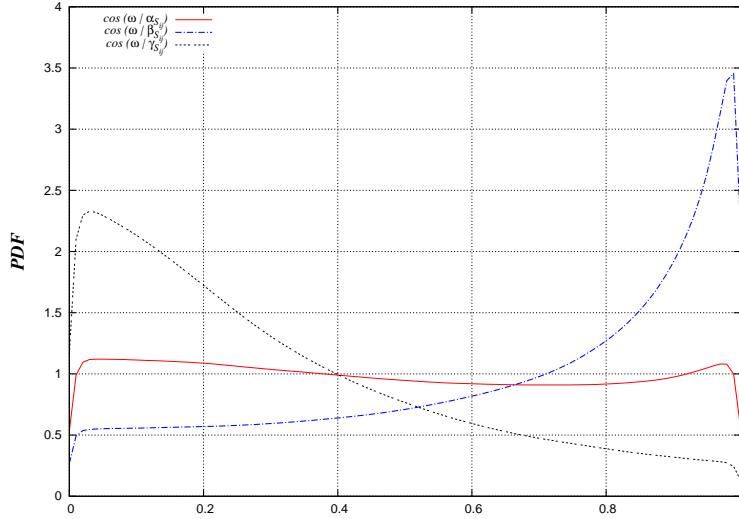


Fig. 3.8: PDF final de DNS para los cosenos de los ángulos de la vorticidad ω y los autovectores de S_{ij}

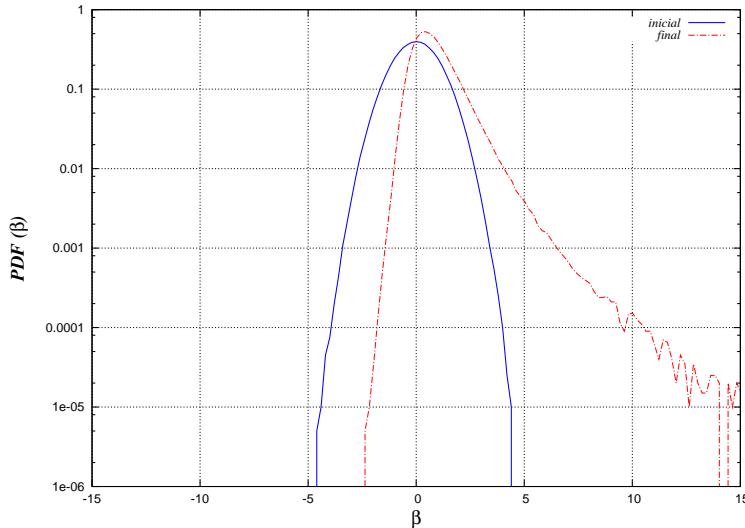
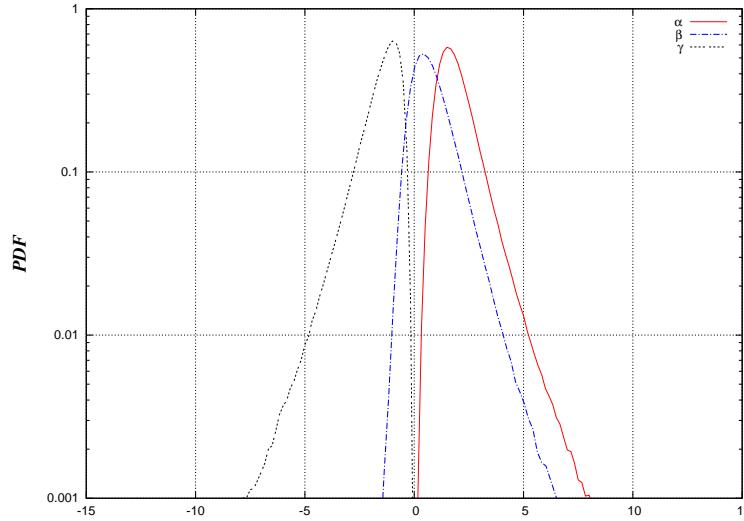


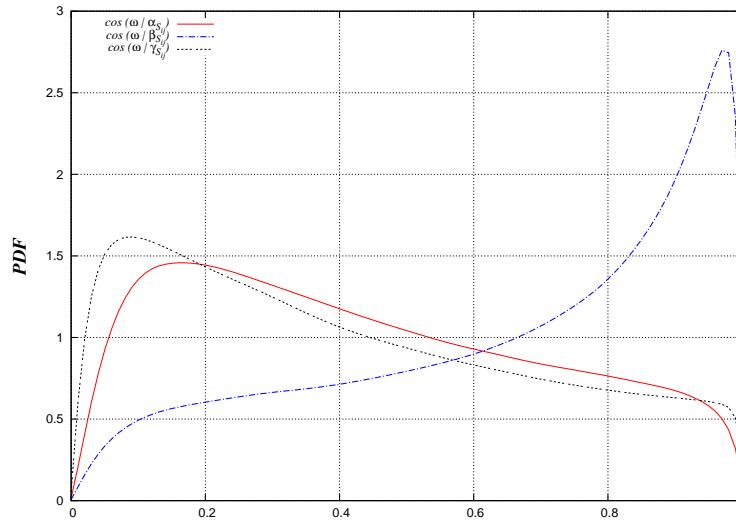
Fig. 3.9: PDF del modelo para el autovalor β de S_{ij}

demostró que el promedio $\langle \alpha\beta\gamma \rangle$ es proporcional al skewness de a_{11} , típicamente negativo (Ver Apéndice ??), por lo que la configuración más probable sería con $\beta > 0$. La figura 3.7 confirma este extremo. Además, presentan fuerte correlación S_{ij} y la vorticidad ω , teniendo esta última tendencia a la alineación con la dirección principal asociada al autovalor intermedio β , figura 3.8.

Los resultados del modelo para los autovalores de S_{ij} se representan en la figura 3.10.

Fig. 3.10: PDF final del Modelo para los autovalores α , β y γ de S_{ij}

$P(\alpha)$, $P(\beta)$, y $P(\gamma)$ son inicialmente gaussianas y el modelo las lleva hacia estados finales intermitentes con aumento de la asimetría y del aplastamiento. En la figura 3.9 se observa el desplazamiento de $P(\beta)$ hacia la derecha de modo que su media es positiva, hecho conocido de DNS, figura 3.7.

Fig. 3.11: PDF final del Modelo para los cosenos de los ángulos de la vorticidad ω y los autovectores de S_{ij}

La vorticidad en el modelo resulta fuertemente alineada con el autovector \mathbf{i}_β asociado al autovalor intermedio β de S_{ij} , según puede verse en la figura 3.11. $P(\cos(\omega|\alpha_{S_{ij}}))$ y $P(\cos(\omega|\gamma_{S_{ij}}))$

presentan máximos entorno al cero indicando tendencia a la perpendicularidad. Estos resultados coinciden con los estudios de DNS, figura 3.8, y con los resultados experimentales de Tsinober et al. (1992) [19, 20].

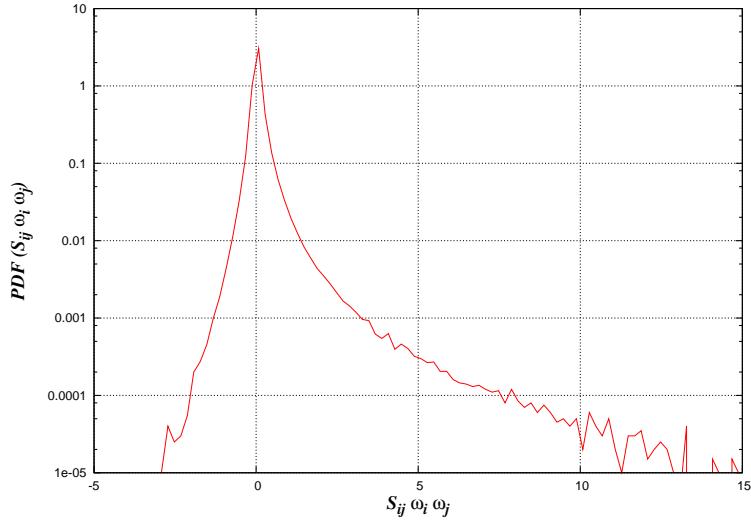
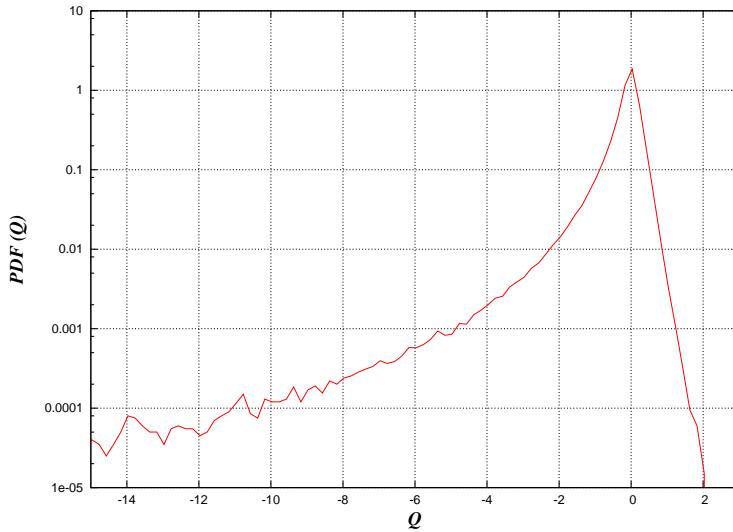
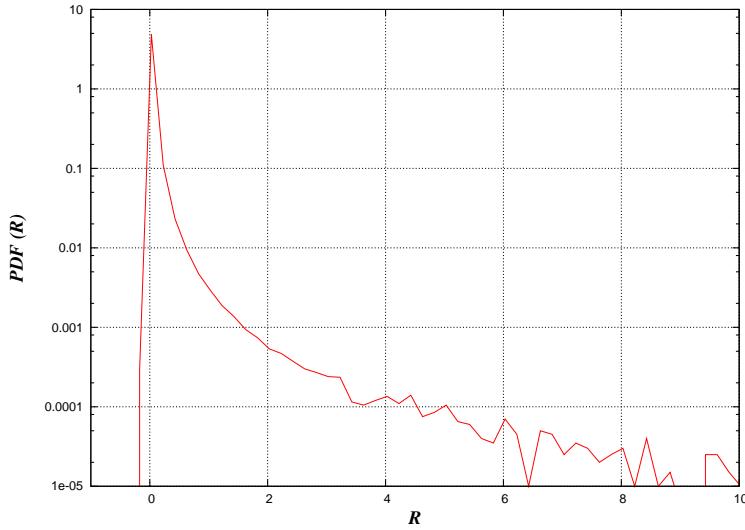


Fig. 3.12: PDF final del modelo para la producción de enstrofa $S_{ij}\omega_i\omega_j$

La producción de enstrofa ($S_{ij}\omega_i\omega_j$ - Ver Apéndice ??), responsable del crecimiento del cuadrado de la vorticidad presenta una PDF asimétrica extremadamente abierta, con caída más lenta para valores positivos, figura 3.12. Aquí cabe señalar que el modelo, a partir de un campo inicial donde únicamente se fijan las correlaciones hasta orden dos, produce $\langle S_{ij}\omega_i\omega_j \rangle$ (*una correlación de orden tres*) positiva en concordancia con lo expuesto en la ecuación 2.6, ya que el modelo genera también promedio del cubo de a_{11} negativo. Por lo tanto el término $S_{ij}\omega_i\omega_j$, efectivamente produce aumento del módulo de la vorticidad, según el resultado. Esta característica del campo, anticipada por Betchov (1956) [46] aparece en todos los resultados de DNS.

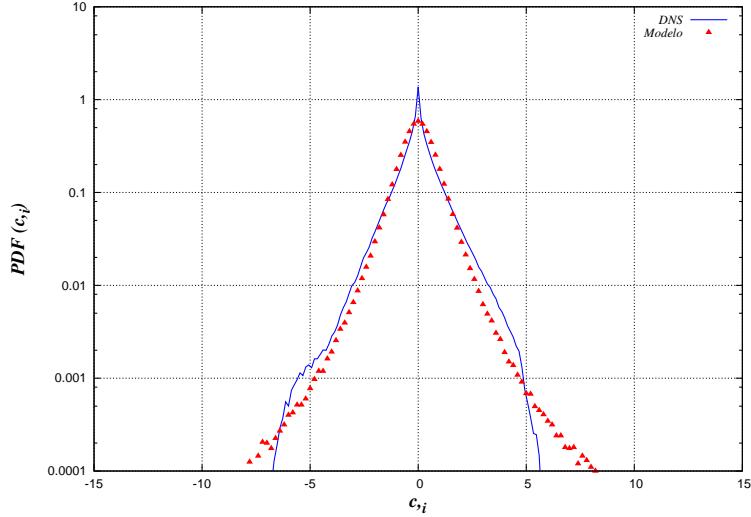
La distribución final del segundo invariante Q y tercer invariante R de a_{ij} se representan en las figuras 3.13 y 3.14. La $P(Q)$ desplazada hacia valores negativos nos confirma el comportamiento dominante del estiramiento en la estadística del modelo, (ecuación 2.16). $P(R)$ aparece desplazada hacia valores positivos, el resultado es coherente con el promedio positivo del autovalor intermedio β , a la vista de la ecuación 2.16.

La ecuación 3.11 para las características del gradiente del escalar se implementó mediante el método Montecarlo descrito en la sección 3.3. $C_{,i}^{(n)}(0)$ se tomó de componentes gaussianas independientes, con matriz de covarianzas unidad y sin correlación con $A_{ij}^{(n)}(0)$. La PDF final de una componente del gradiente del escalar se muestra en la figura 3.15, el resultado es simétrico con caídas exponenciales, alejada de la gaussianidad, similar en su forma a la de las componentes no diagonales de A_{ij} pero menos abierta. Su media es nula, al igual que el

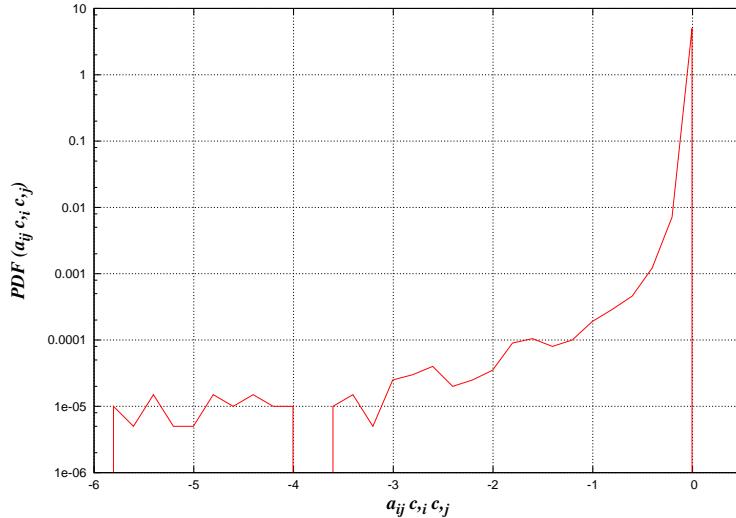
Fig. 3.13: PDF final del modelo para el segundo invariante de a_{ij} Fig. 3.14: PDF final del modelo para el tercer invariante de a_{ij}

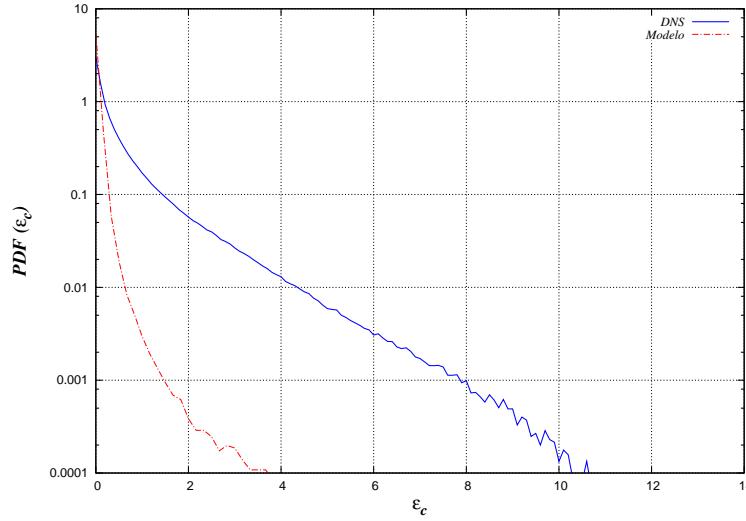
coeficiente de asimetría y su coeficiente de aplastamiento alcanza valores mayores a 3 indicando la no gaussianidad. El comportamiento del gradiente del escalar, con la modelización utilizada, resulta intermitente, como sucede con la del gradiente de velocidad.

En la figura 3.16 se representa la PDF final del producto $a_{ij}c_i c_{,j}$ procedente de la ecuación 2.24. Como se mencionó, este término actúa similarmente al término de producción $S_{ij}\omega_i\omega_j$ en la ecuación de la vorticidad, ya que $a_{ij}c_i c_{,j} = S_{ij}c_i c_{,j}$. La media se hace rápidamente

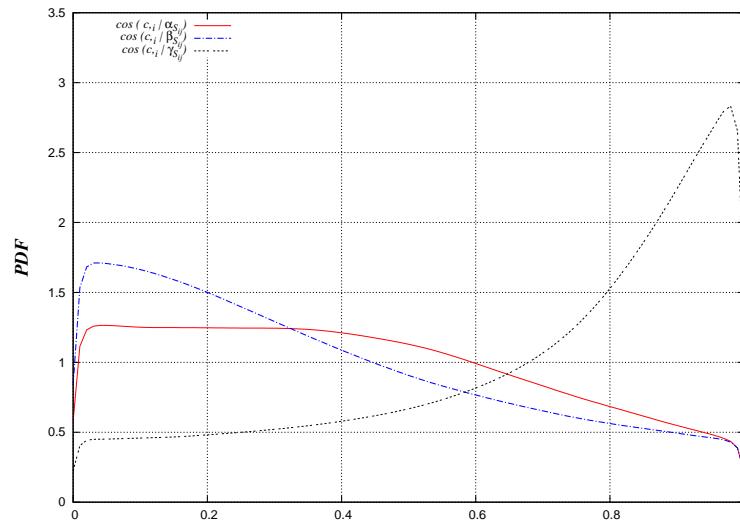
Fig. 3.15: PDF final para c_i

negativa al principio de la evolución, alcanzando un valor absoluto relativamente alto. Se aprecian en la figura 3.16 la fuerte asimetría y el alto aplastamiento de la PDF, resultando así el comportamiento intermitente. Además, el hecho de que esta variable tenga promedio negativo durante toda la evolución produce un término de producción de disipación del escalar positivo (ecuación 2.24), por lo que amplifica de manera continua el módulo del gradiente del escalar.

Fig. 3.16: PDF final del modelo para la producción del modulo del gradiente del escalar, $(a_{ij} c_i c_j)$

Fig. 3.17: PDF final para la disipación del escalar ε_c

La PDF de la disipación del escalar se aprecia en la figura 3.17. Observamos que el modelo en comparación con el resultado de DNS concuerda cualitativamente, ya que $P(\varepsilon_c)$ presenta caída más lenta para valores altos de la variable.

Fig. 3.18: PDF final de DNS para los cosenos de los ángulos del gradiente del escalar c_i y los autovectores de S_{ij}

Las figuras 3.18 por DNS y 3.19 del modelo muestran las PDFs de los cosenos de los ángulos que forman el gradiente del escalar con las tres direcciones principales del tensor velocidad de deformación, correspondientes a los autovalores α , β y γ . Se observa una gran probabilidad de

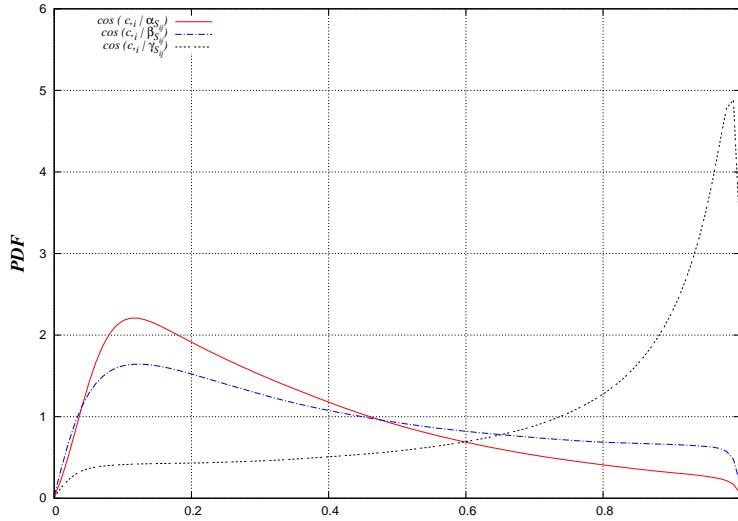


Fig. 3.19: PDF final del Modelo para los cosenos de los ángulos del gradiente del escalar $c_{,i}$ y los autovectores de S_{ij}

alineación de $c_{,i}$ con la dirección correspondiente al autovalor negativo γ . Anteriormente se vió que β , el intermedio, presenta promedio positivo, lo que producía mayor probabilidad de dos direcciones expansivas y una compresiva para la deformación en torno al punto fluido, lo que tendería a deformar un cubo a una estructura en forma de lámina (sección 2.2.2). El resultado para la alineación de $c_{,i}$ con la dirección compresiva indica que, en promedio, el gradiente del escalar sería perpendicular a dicha lámina. Este tipo de topología refleja el hecho de que ∇c es perpendicular a la superficie isoescalar $c(\mathbf{x}, t) = \text{constante}$, favoreciendo el transporte molecular del escalar.

Para el estudio de correlación entre magnitudes de interés en el campo resultante del modelo se han empleado diagramas de dispersión ('scatter - plots') de 5000 partículas, que dan una idea, al menos cualitativa, de la correlación entre las variables. Todas las variables presentadas en las dispersiones están normalizadas (*adimensionalizadas*) con el segundo invariante del tensor velocidad de rotación Q_W .

Jiménez *et al.*, 1993 [28], definieron una magnitud para la dinámica de la vorticidad llamada *Stretching rate*:

$$\sigma_\omega \equiv \frac{S_{ij}\omega_i\omega_j}{\omega_k\omega_k} \quad (3.21)$$

y Martín *et al.*, 2001 [45], definieron otra magnitud en la dinámica del gradiente del escalar llamada *Scalar gradient stretching rate*:

$$\sigma_{\nabla c} \equiv \frac{S_{ij}c_{,i}c_{,j}}{c_{,k}c_{,k}} \quad (3.22)$$

Estas variables, σ_ω y $\sigma_{\nabla c}$ brindan información de las magnitudes relativas de la enstrofia ω^2 y la disipación del escalar ε_c frente a los respectivos términos de producción.

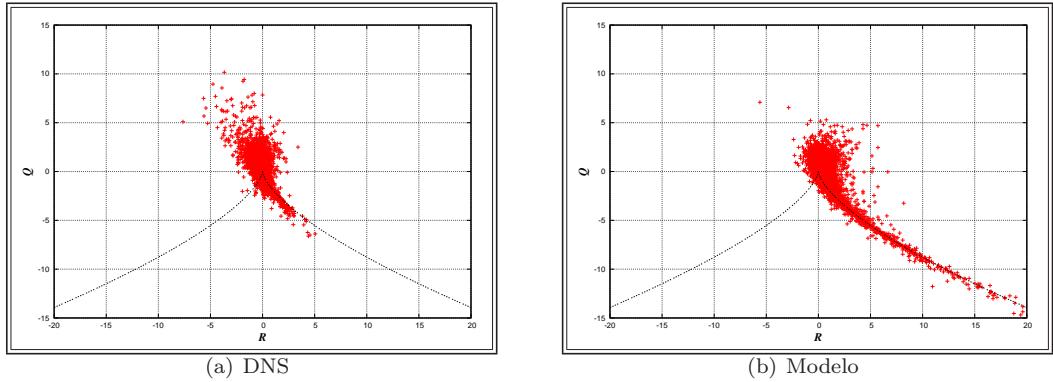


Fig. 3.20: Dispersión R vs Q

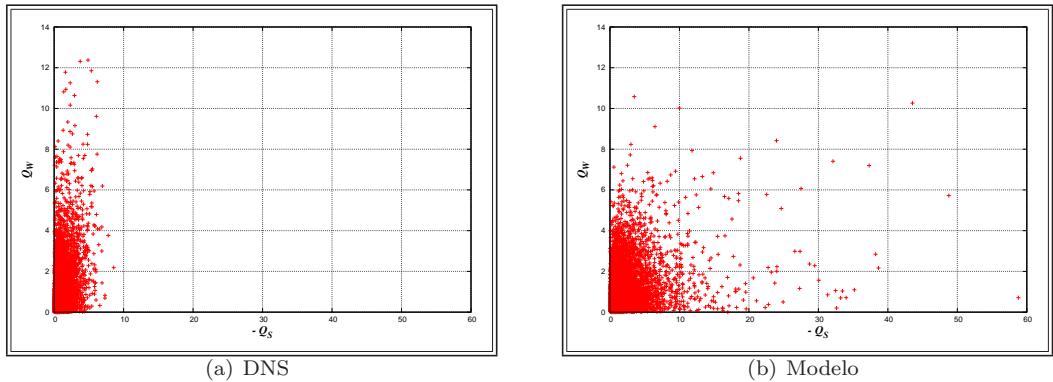
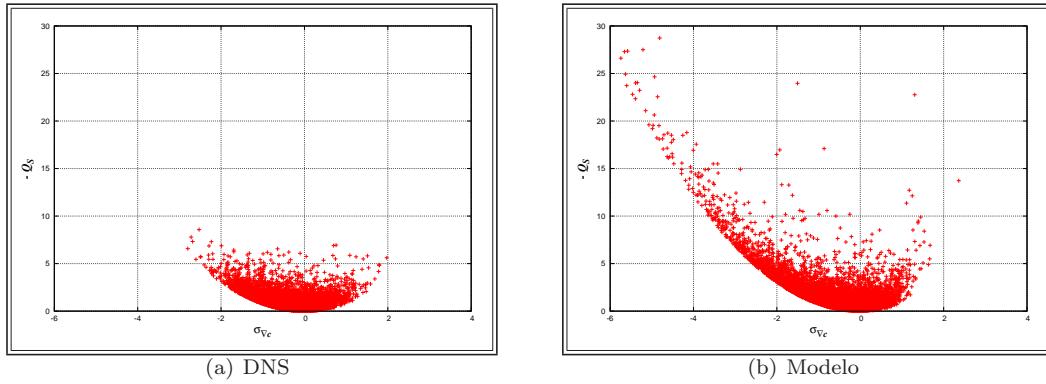
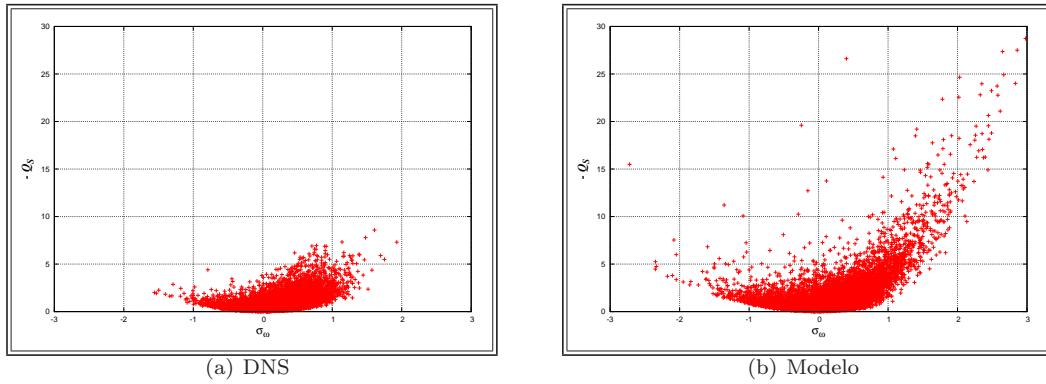
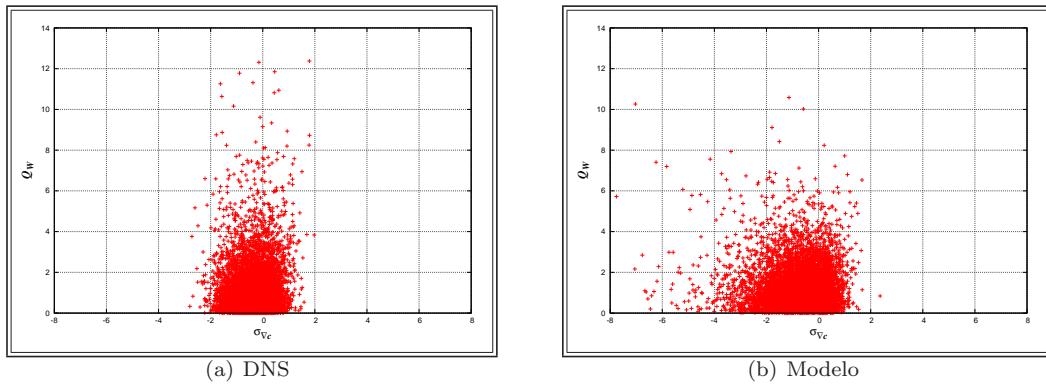


Fig. 3.21: Dispersion $-Q_S$ vs Q_W

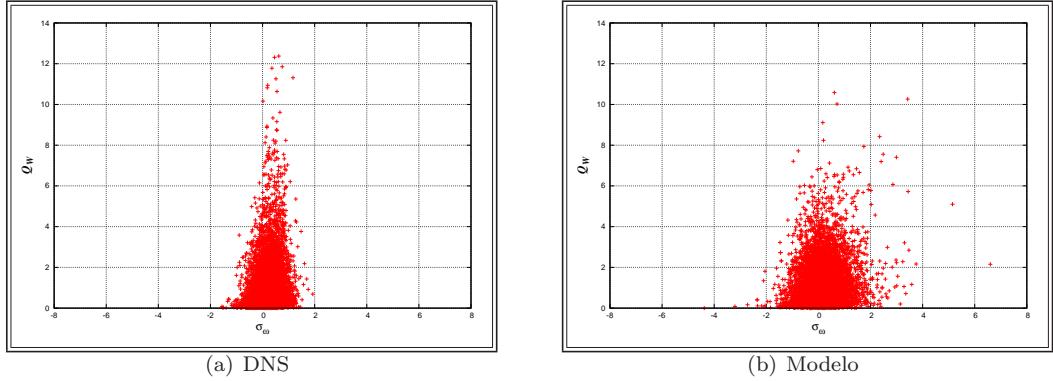
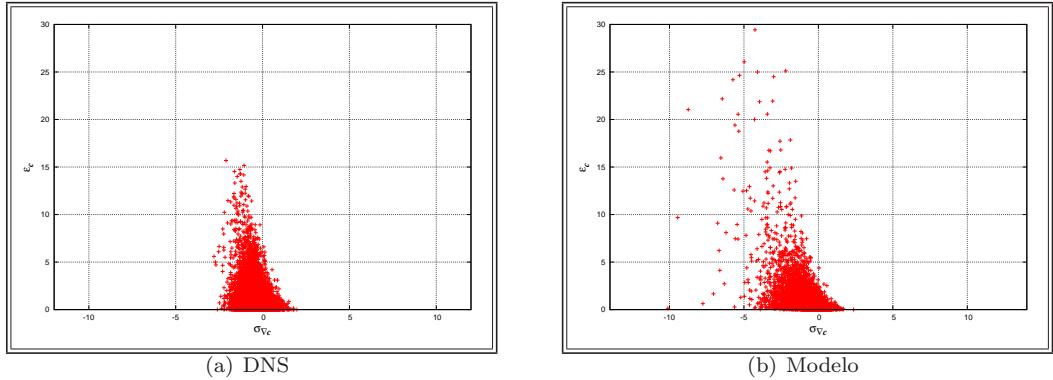
El diagrama de dispersión del segundo y tercer invariantes de a_{ij} (R , Q) se muestra en la figura 3.20; vemos que el modelo llega a valores de Q positivos entrando en la zona compleja donde la velocidad de deformación es mucho menor que la vorticidad, muestra también un llenado en la región de discriminante nulo y por debajo de ella misma donde los autovalores son reales, en la región de discriminante nulo se extiende hacia la zona de $R > 0$, lo que explica el promedio positivo del autovalor intermedio de S_{ij} .

Para la correlación de $-Q_S$ y Q_W , figura 3.21, el modelo parece reproducir la geometría conocida de DNS, sin embargo se aprecia que el estiramiento es dominante ante la vorticidad debido a que no hay muchos valores altos para Q_W en la dispersión.

En las figuras 3.22 y 3.23 se muestra la correlación que $-Q_S$ con las magnitudes $\sigma_{\nabla c}$ y σ_ω . Los valores altos del estiramiento hacen que se amplifique la disipación del escalar y la vorticidad,

Fig. 3.22: Dispersión $\sigma_{\nabla c}$ vs $-Q_S$ Fig. 3.23: Dispersión σ_{ω} vs $-Q_S$ Fig. 3.24: Dispersión $\sigma_{\nabla c}$ vs Q_W

estas amplificaciones hacen que las magnitudes $\sigma_{\nabla c}$ y σ_{ω} se mantengan en un rango de valores bajos. Se ve claramente que la estructura es similar en su geometría a la presentada por

Fig. 3.25: Dispersión σ_ω vs Q_W Fig. 3.26: Dispersión $\sigma_{\nabla c}$ vs ε_c

DNS, sin embargo los valores altos de $-Q_S$ en las dos figuras muestran de nuevo el fuerte estiramiento que produce el modelo.

En las figuras 3.24 y 3.25 se muestra la correlación que tiene Q_W con las magnitudes $\sigma_{\nabla c}$ y σ_ω . Aquí los valores de éstas son pequeñas debidas a la amplificación dada por el estiramiento; sin embargo en ambos casos el modelo muestra valores de la vorticidad moderados. Cualitativamente sigue los resultados de DNS pero no produce valores suficientemente altos de Q_W .

En la figura 3.26 se muestra la correlación que tiene la disipación del escalar $\varepsilon_c = Dc_i c_i$ con $\sigma_{\nabla c}$. Se ve claramente que la estructura es similar en su geometría a la presentada por DNS y concuerda con el comportamiento observado por Martín et al. [45], donde valores negativos de $\sigma_{\nabla c}$ aparecen correlacionados con altos valores de ε_c , mientras que valores positivos se correlacionan con débil disipación escalar.

Capítulo 4

Conclusiones

En el presente trabajo se ha demostrado como el método de la función de densidad de probabilidad es una herramienta útil para tratar la dinámica turbulenta, ya que permite reproducir y comprender el comportamiento del gradiente de velocidad en las distintas topologías que presenta un flujo turbulento no reactivo.

En el estudio realizado se destaca cómo con modelos muy sencillos para el cierre de la difusión viscosa se pueden generar resultados razonables, próximos a los conocidos de DNS y experimentales.

El seleccionar y aplicar el método numérico de Runge - Kutta de segundo orden al problema es adecuado, debido a que los resultados obtenidos son más precisos y se cometen menos errores frente a un método numérico de primer orden.

A la vista de los resultados, se aprecia como el modelo propuesto representa razonablemente bien muchas características de la estadística de las pequeñas escalas de la turbulencia. Usando el modelo LMSE lineal y constante el gradiente de velocidad diverge en tiempo finito, pero con el modelo propuesto no. Además, la parte estocástica incluida en el modelo propuesto mejora la evolución del sistema, ya que es poco realista encontrar en un flujo turbulento un comportamiento determinista como el presentado por el modelo LMSE lineal y constante.

En este trabajo se resalta la viabilidad de la modelización Montecarlo para la simulación de problemas que involucran la no linealidad de las ecuaciones de Navier - Stokes, ya que permite generar campos cualitativamente semejantes a los de DNS con un tiempo de cálculo muy inferior.

Se propone como trabajo futuro abordar el problema de la evolución para el gradiente de velocidad fijando las correlaciones iniciales hasta orden tres, y conseguir una dependencia clara del número de Reynolds para las PDFs finales del campo mediante un modelo más sofisticado para la difusión. También afrontar el problema de la evolución conjunta de un escalar, su gradiente, y el gradiente de velocidad en un flujo turbulento reactivo, siguiendo una

metodología semejante a la expuesta en este trabajo, ya que en los procesos de combustión se hace necesaria la modelización del transporte de especies y energía para el diseño de sistemas eficientes y poco contaminantes.

Bibliografía

- [1] C. Dopazo. In *Turbulent reacting flows: Recent development in P.D.F. Methods*, Eds. Libby, P. A. and Williams, F. A. 1994. 1, 15, 20
- [2] S. B. Pope. Pdf methods for turbulent reactive flows. *Prog. Energy Combust. Sci.*, 11:119–192, 1985. 1, 15, 17
- [3] G.K. Batchelor. In *An Introduction to Fluid Dynamics*, Cambridge Mathematical Library. Cambridge University Press, 2000. 1
- [4] H. Tennekes and J. L. Lumley. In *A first course in turbulence*, Cambridge, Massachusetts and London. The MIT Press, 1972. 1
- [5] A. Tsinober. In *An informal introduction to turbulence*, Dordrecht, Boston and London. Kluwer academic, 2001. 1
- [6] S. B. Pope. In *Turbulent flows*, Cornell University. Cambridge University, 2000. 1, 20
- [7] A. Kolmogorov. The local structure of turbulence in incompressible viscous fluid for very large reynolds numbers. *Proc. R. Soc. Lond. A.*, 434:9–13, 1941. 2
- [8] A. Kolmogorov. *J. Fluid Mech.*, 13:82–85, 1962. 2
- [9] R. H. Kraichnan. On kolmogorov’s inertial - range theories. *J. Fluid Mech.*, 2:305–330, 1974. 2
- [10] R. H. Kraichnan. Turbulent cascade and intermittency growth. *Proc. R. Soc. Lond. A.*, 434:65–78, 1991. 2
- [11] A. Kuo and S. Courrsin. Experiments on internal intermittency and fine - structure distribution functions in fully turbulent fluid. *J. Fluid Mech.*, 50:285–319, 1971. 2
- [12] E. Jackson Z. S. She and S. A. Orszag. Intermittent vortex structures in homogenous isotropic turbulence. *Nature*, 344:226–228, 1990. 2
- [13] Y. Couder S. Douady and M. E. Brachet. Direct observation of intermittency of intense vorticity filaments in turbulence. *Physical review letters*, 6:983–986, 1991. 2

- [14] G. K. Batchelor and A. A. Townsend. The nature of turbulent motion at large wave - numbers. *Proc. R. Soc. Lond. A.*, 199:238–255, 1949. 3
- [15] A. Kuo and S. Courrsin. Experiment on the geometry of the fine - structure regions in fully turbulent fluid. *J. Fluid Mech.*, 56:447–479, 1972. 3
- [16] P. G. Saffman. In *Vortex dynamics*, California institute of technology. Cambridge University, 1992. 3
- [17] A. Vincent and M. Meneguzzi. The spatial structure and statistical properties of homogeneous turbulence. *J. Fluid Mech.*, 225:1–20, 1991. 3, 4
- [18] R. H. Kraichnan S. Chen, G. D. Doolen and S. She. On statistical correlations between velocity increments and locally averaged dissipation in homogeneous turbulence. *Phys. Fluids A.*, 5:458–463, 1993. 3
- [19] E. Kit A. Bershadskii and A. Tsinober. On universality of geometrical invariants in turbulence - experimental results. *Phys. Fluids A.*, 5:1523–1525, 1993. 3, 30
- [20] E. Kit A. Tsinober and T. Dracos. Experimental investigation of the field velocity gradients in turbulence flows. *J. Fluids Mech.*, 242:162–192, 1992. 3, 30
- [21] J. Maurer G. Zocchi, P. Tabeling and H. Willaime. Measurement of the scaling of the dissipation at high reynolds numbers. *Phys. Rev.*, 50:3693–3700, 1994. 3
- [22] P. Tabeling J. Maurer and G. Zocchi. Statistics of turbulence between two counterrotating disks in low-temperature helium gas. *Europhys. Lett.*, 26:31–36, 1994. 3
- [23] F. Belin J. Maurer P. Tabeling, G. Zocchi and H. Willaime. Probability density functions, skewness, and flatness in large reynolds number turbulence. *Phys. Rev. E*, 53:1613–1621, 1996. 3
- [24] P. Tabeling F. Belin, J. Maurer and H. Willaime. Velocity gradient distributions in fully developed turbulence: An experimental study. *Phys. Fluids*, 9:3843–3850, 1997. 3, 25
- [25] G. I. Taylor. Production and dissipation of vorticity in a turbulent fluid. *Proc. R. Soc. Lond. A.*, 164:15–23, 1938. 3
- [26] E. D. Siggia. Point-vortex simulation of the inverse energy cascade in two-dimensional turbulence. *Phys. Fluids*, 24:171–173, 1981. 4
- [27] R. M. Kerr. Higher - order derivative correlations and the alignment of small - scale structures in isotropic numerical turbulence. *J. Fluid Mech.*, 153:31–58, 1985. 4
- [28] P. Saffman J. Jiménez, A. Wray and R. Rogallo. The structure of intense vorticity in homogeneous turbulence. *J. Fluid Mech.*, 255:65–90, 1993. 4, 34

-
- [29] J. Jiménez. Kinematic alignment effects in turbulent flows. *Phys. Fluids A.*, 4:652–654, 1992. 4
 - [30] A. E. Perry M. S. Chong and B. J. Cantwell. A general classification of three - dimensional flow fields. *Phys. Fluids A.*, 2:765–777, 1990. 4, 10
 - [31] B. J. Cantwell. Exact solution of a restricted euler equation for the velocity gradient tensor. *Phys. Fluids*, 4:782–793, 1992. 4
 - [32] B. J. Cantwell. On the berhavior of velocity gradient tensor invariants in direct numerical simulations of turbulence. *Phys. Fluids*, 5:2008–2013, 1993. 4
 - [33] J. O. Hinze. In *Turbulence*. Mc. Graw Hill, 1975. 9, 20
 - [34] R. Sondergaard A. E. Perry J. Soria, M. S. Chong and B. J. Cantwell. A study of the fine scale motions of incompressible time - developing mixing layers. *Center for Turbulence Research Proceedings of the Summer Program*, pages 101–121, 1992. 12
 - [35] C. Dopazo and E. E. O'Brien. An approach to the autoignition of a turbulent mixture. *Acta Astronaut.*, 1:1239–1266, 1974. 17, 18
 - [36] C. Dopazo. Probability density function approach for a turbulent axisymmetric heated jet. centerline evolution. *Phys. Fluids*, 18:397–404, 1975. 17, 18
 - [37] S. S. Girimaji and S. B. Pope. A diffusion model for velocity gradients in turbulence. *Phys. Fluids A n°2*, 2:242–256, 1990. 17
 - [38] C. Dopazo J. Martín and L. Valiño. Dynamics of velocity gradient invariants in turbulence: Restricted euler and linear diffusion models. *Phys. Fluids*, 10:2012–2025, 1998. 18
 - [39] J. J. Martín. *Modelización de la intermitencia interna del gradiente de velocidad y del gradiente de un escalar en turbulencia homogénea*. PhD thesis, Universidad de Zaragoza, España, 1995. 18, 19, 20, 24
 - [40] S. B. Pope. A monte carlo method for the pdf equations of turbulent reactive flow. *Combustion science and technology*, 25:159–174, 1981. 20
 - [41] S. B. Pope. Monte carlo calculations of premixed turbulent flames. *Eighteenth symposium (international) on combustion*, pages 1001–1010, 1981. 20
 - [42] L. Valiño. *Computación de flujos turbulentos homogéneos con reacción química. Simulación Numérica Montecarlo de velocidades, concentraciones y gradientes de concentraciones*. PhD thesis, Universidad de Zaragoza, España, 1989. 20
 - [43] J. P. Hierro. *Métodos estadísticos para simular la evolución de campos escalares y de gradientes en turbulencia homogénea e isotropa*. PhD thesis, Universidad de Zaragoza, España, 2002. 20

- [44] S. C. Chapra and R. P. Canale. Métodos de runge - kutta. In McGraw Hill Interamericana, editor, *Métodos numéricos para ingenieros*, pages 713 – 759. McGraw - Hill, México, 2003. 22
- [45] C. Dopazo J. Martín and L. Valiño. Averaged dynamics in the phase planes of a scalar field using dns data. *Journal of Turbulence*, 2001. 25, 26, 34, 37
- [46] R. Betchov. An inequality concerning the production of vorticity in isotropic turbulence. *J. Fluid Mech.*, 1:497–504, 1956. 27, 30