

2022-12

Efecto de la altitud en desaceleradores aerodinámicos inflables durante la reentrada atmosférica de CubeSat

Rioseco Olave, Diego Valentín

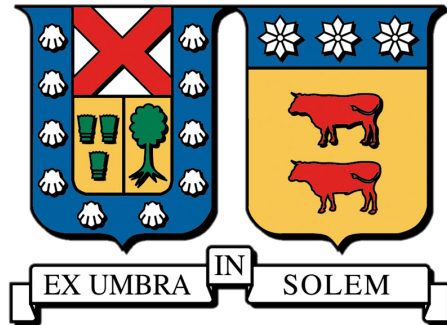
<https://hdl.handle.net/11673/55385>

Repositorio Digital USM, UNIVERSIDAD TECNICA FEDERICO SANTA MARIA

UNIVERSIDAD TÉCNICA FEDERICO SANTA MARÍA

DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA MECÁNICA

VALPARAÍSO, CHILE



**EFECTO DE LA ALTITUD EN DESACELERADORES
AERODINÁMICOS INFLABLES DURANTE LA
REENTRADA ATMOSFÉRICA DE CUBESAT**

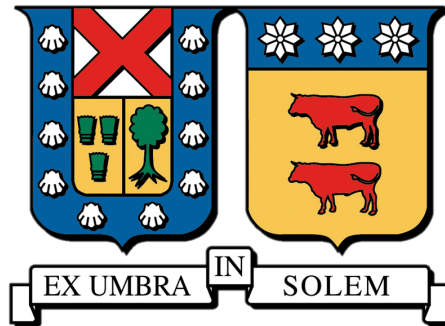
DIEGO VALENTÍN RIOSECO OLAVE

MAGÍSTER EN CIENCIAS DE LA INGENIERÍA MECÁNICA

PROFESOR GUÍA: DR. RODRIGO CASSINELI PALHARINI

DICIEMBRE - 2022

UNIVERSIDAD TÉCNICA FEDERICO SANTA MARÍA
DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA MECÁNICA
VALPARAÍSO, CHILE



**EFEECTO DE LA ALTITUD EN DESACELERADORES
AERODINÁMICOS INFLABLES DURANTE LA REENTRADA
ATMOSFÉRICA DE CUBESAT**

DIEGO VALENTÍN RIOSECO OLAVE

TESIS PARA OPTAR AL GRADO DE:
MAGÍSTER EN CIENCIAS DE LA INGENIERÍA MECÁNICA

Y AL TÍTULO DE:
INGENIERO CIVIL MECÁNICO

Profesor guía: Dr. Rodrigo Cassineli Palharini

Profesor revisor: Dr. Harvey Zambrano Rodríguez

Profesor revisor externo: Dr. Marcos Díaz Quezada (Universidad de Chile)

DICIEMBRE - 2022

TITULO DE LA TESIS:

EFFECTO DE LA ALTITUD EN DESACELERADORES AERODINÁMICOS
INFLABLES DURANTE LA REENTRADA ATMOSFÉRICA DE CUBESAT

AUTOR:

Diego Valentín Rioseco Olave

TRABAJO DE TESIS, presentado en cumplimiento parcial de los requisitos para
el Grado de Magíster en Ciencias de la Ingeniería Mecánica de la Universidad
Técnica Federico Santa María.

Dr. Rodrigo Cassineli Palharini

Dr. Harvey Zambrano Rodríguez

Dr. Marcos Díaz Quezada

Valparaíso, Chile. Diciembre 2022

Resumen

En esta investigación se plantea el uso de desaceleradores aerodinámicos inflables (IAD) para reentrada atmosférica y recuperación de CubeSat, como una forma de atacar el problema del rápido aumento de la basura espacial. Los IADs se inflan en la etapa de reentrada y podrían usarse como sistema de protección térmica (TPS), ofreciendo una serie de ventajas por sobre TPSs rígidos. Así, se estudió la aerotermodinámica de un IAD sumergido en un flujo de aire hipersónico enrarecido, mediante el método Direct Simulation Monte Carlo (DSMC). Para ello, se realizó un proceso de validación y verificación del código `dsmcFoam+`. Se emplearon datos experimentales y numéricos del caso de prueba de un modelo de la sonda Mars Pathfinder, disponibles en la literatura. Estos datos se compararon con los resultados obtenidos con el código `dsmcFoam+`, encontrándose una buena concordancia entre `dsmcFoam+` y los datos experimentales/numéricos disponibles en la literatura. Con ello, se validó el uso del código `dsmcFoam+` en capturar la física de flujos de gas no reactivos en régimen hipersónico y enrarecido, sobre geometrías de tipo cono romo.

Una vez validado el código `dsmcFoam+`, este se utilizó para investigar una configuración de IAD acoplada a un CubeSat 1U, para altitudes entre los 115 y 95 *km*. Se observó la formación de una onda de choque altamente difusa aguas arriba del vehículo. En el hombro del IAD se genera una abrupta expansión del flujo hacia la estela cercana. Los resultados mostraron que la variación de altitud tiene un efecto significativo sobre la estructura del campo de flujo alrededor del vehículo. Durante la reentrada atmosférica, la onda de choque disminuye su nivel de difusión y se aproxima a la superficie frontal del IAD, aumentando en forma importante los gradientes de las propiedades macroscópicas. Las distribuciones de presión y densidad aumentan en forma exponencial con la reducción de la altitud. Por su parte, el nivel de expansión del flujo en la estela cercana disminuye a

menores altitudes.

Las cantidades superficiales (el flujo de calor, la presión y el esfuerzo cortante) alcanzan valores máximos en la parte frontal del IAD, y disminuyen abruptamente en el hombro y hacia la base del IAD. Sobre la superficie del CubeSat 1U, el flujo de calor, la presión y el esfuerzo cortante no superan el 1% del valor máximo de la parte frontal del IAD, para cada altitud analizada. Estos resultados permitieron comprobar la eficacia del uso de IADs para reducir las cargas térmicas y mecánicas sobre CubeSats. Además, se determinó que las cantidades superficiales aumentan exponencialmente durante la entrada atmosférica, para el rango de altitud analizado.

Abstract

In this research, the use of Inflatable Aerodynamic Decelerators (IAD) for CubeSat reentry and recovery is proposed as a way to attack the problem of the rapid increase in space debris. IADs inflate during re-entry and could be used as a Thermal Protection System (TPS), offering a number of advantages over rigid TPSs. Thus, the aerothermodynamics of an IAD immersed in a rarefied hypersonic air-flow was studied using the Direct Simulation Monte Carlo (DSMC) method. In this scenario, a validation and verification process of the dsmcFoam+ code was carried out. Experimental and numerical data from the test case of a model of the Mars Pathfinder probe, available in the literature, were used. These data were compared with the results obtained with the dsmcFoam+ code, and it was found a good agreement between the dsmcFoam+ and experimental/numerical data available in the literature. Thus, the use of the dsmcFoam+ code was validated in capturing the physics of non-reactive gas flows in hypersonic and rarefied regime, on blunt cone type geometries.

Once the dsmcFoam+ code was validated, it was used to investigate an IAD configuration attached to a 1U CubeSat, for altitudes ranging from 115 to 95 *km*. The formation of a highly diffuse shock wave was observed upstream of the vehicle. At the shoulder of the IAD, an abrupt expansion of the flow towards the near wake is generated. The results showed that altitude variation has a significant effect on the structure of the flowfield around the vehicle. During atmospheric reentry, the shock wave decreases its level of diffusion and approaches the front surface of the IAD, significantly increasing the gradients of the macroscopic properties. Pressure and density distributions increase exponentially with decreasing altitude. In addition, the level of expansion of the flow in the near wake decreases at lower altitudes.

The surface quantities (heat flux, pressure, and shear stress) reach maximum

values at the front of the IAD, and decrease sharply at the shoulder and toward the base of the IAD. On the 1U CubeSat surface, heat flux, pressure and shear stress do not exceed 1% of the maximum value of the front part of the IAD, for each altitude analyzed. These results allowed to verify the effectiveness of the use of IADs to reduce the thermal and mechanical loads on CubeSats. In addition, it was determined that the surface quantities increase exponentially during atmospheric entry, for the analyzed altitude range.

Agradecimientos

En primer lugar, quisiera agradecer a mi profesor guía, Dr. Rodrigo Cassineli Palharini, por el apoyo brindado a lo largo de todo el magíster y durante el desarrollo de este trabajo de tesis. Esta tesis no podría haber sido realizado sin su gran colaboración. Le agradezco también por permitirme trabajar y desarrollar mis conocimientos y pasión por las ciencias de la Ingeniería Aeroespacial. Quisiera agradecer también a los profesores Alex Flores y Guillermo González por su apoyo en el proceso de postulación al programa de magíster y a las becas respectivas. También agradezco al Dr. Harvey Zambrano Rodríguez y al Dr. Marcos Díaz Quezada por participar como profesores revisores en este trabajo de tesis.

Quisiera agradecer profundamente a mi familia por el amor y cariño brindado a lo largo de mi vida, y por creer en mí y apoyarme en cada objetivo que me he planteado. A mi mamá Cecilia Olave Salinas y a mi papá Daniel Rioseco Muñoz, por enseñarme el valor de estudiar y el valor del trabajo para salir adelante y ser mejor persona cada día. Sin sus enseñanzas y su ejemplo no podría haber llegado hasta aquí. A mi hermano Eric Rioseco Olave por siempre estar presente y ser un apoyo para mí y la familia. A mis abuelos, tíos y primos y a toda mi familia por el cariño y apoyo incondicional. A mis amigos y compañeros de carrera por los buenos momentos, el apoyo y el compañerismo durante esta etapa de la vida que compartimos juntos.

Quiero agradecer además a la Dirección de Postgrados y Programas de la UTFSM por darme la oportunidad de estudiar el magíster becado. Agradezco al Programa de Incentivo a la Iniciación Científica (PIIC) de la UTFSM, por el apoyo financiero brindado durante el desarrollo del magíster. De igual forma, agradezco a la Agencia Nacional de Investigación y Desarrollo (ANID), que por medio del FONDECYT de iniciación en investigación N°11190068, brindo apoyo financiero durante el desarrollo del magíster.

Tabla de Contenidos

1	Introducción	1
1.1	Regímenes de flujo en reentrada atmosférica	8
1.2	Objetivos del proyecto	12
1.3	Esquema de tesis	13
2	Estado del arte	14
2.1	Sistemas desplegables e inflables	14
2.2	Aplicaciones en CubeSats	19
3	Marco Teórico	26
3.1	Fundamentos de Termodinámica Estadística	27
3.1.1	Descripción microscópica de gases	27
3.1.2	Distribución de estados energéticos	29
3.1.3	Evaluación de las propiedades termodinámicas	32
3.2	Fundamentos de la Teórica Cinética de Gases	34
3.2.1	Modelo de partículas	34
3.2.2	Colisiones moleculares	35
3.2.3	Función de distribución de velocidad y ecuación de Boltzmann	38
3.2.4	Análisis de Chapman-Enskog	41
3.2.5	Cantidades macroscópicas	44
3.3	Procesos de tasa finita	46
3.4	Método Direct Simulation Monte Carlo	48
3.4.1	Fundamentos del método DSMC	48
3.4.2	Movimiento y clasificación de partículas	51
3.4.3	Colisiones moleculares	52
3.4.4	Modelado de transferencia de energía interna	58

3.4.5	Propiedades macroscópicas	65
3.5	Código computacional dsmcFoam+	70
4	Verificación y validación	72
4.1	Validación del código dsmcFoam+	78
4.2	Verificación del código dsmcFoam+	86
4.2.1	Efecto de la discretización espacial	86
4.2.2	Efectos de la discretización del tiempo	90
4.2.3	Efecto de la cantidad de partículas por celda	93
4.2.4	Efectos del número de iteraciones	95
5	Análisis de desaceleradores aerodinámicos inflables	98
5.1	Metodología	98
5.1.1	Parámetros geométricos del IAD	99
5.1.2	Condiciones de flujo libre	100
5.1.3	Condiciones de simulación	101
5.2	Resultados computacionales y discusión	105
5.2.1	Estructura del campo de flujo	105
5.2.2	Propiedades sobre la superficie	131
5.2.3	Fuerzas aerodinámicas	144
6	Conclusiones	147
6.0.1	Trabajos futuros	150

Lista de Tablas

4.1	Condiciones de flujo libre.	76
4.2	Parámetros de simulación en cada caso de estudio.	78
4.3	Parámetros de simulación al variar el nivel de refinamiento de la malla.	87
4.4	Parámetros de simulación del estudio del tamaño del paso de tiempo.	90
4.5	Parámetros de simulación del estudio de la cantidad de partículas por celda.	93
4.6	Parámetros de simulación en el estudio de la cantidad de iteraciones.	95
5.1	Condiciones de flujo libre.	100
5.2	Composición atmosférica y densidad numérica en función de la al- titud.	101
5.3	Propiedades requeridas en los modelos del método DSMC.	102
5.4	Parámetros de simulación a diferentes altitudes.	105
5.5	Componentes normal y tangencial de la fuerza de arrastre y del coeficiente de arrastre.	146

Lista de Figuras

1.1	Distribución de basura espacial en la órbita terrestre. Fuente: ESA.	2
1.2	Número total de objetos lanzados al espacio según tipo de órbita.	3
1.3	Número total de objetos lanzados al espacio según el tipo de objeto.	3
1.4	Número acumulado de nanosatélites y CubeSats lanzados al espacio.	5
1.5	Representaciones de naves espaciales durante la reentrada atmosférica, haciendo uso de sistemas de protección (a) rígido e (b) inflable.	7
1.6	Números de Knudsen y regímenes de flujo en función de la altitud y de la longitud característica.	9
1.7	Clasificación de regímenes de flujo y formulaciones matemáticas utilizadas.	10
2.1	Cápsula espacial Skidbladnir. (a) Esqueleto interno desplegable. Configuraciones (b) retraída y (c) desplegada.	15
2.2	Cápsula BREM-SAT 2. Configuraciones (a) retraída y (b) desplegada.	15
2.3	Escudo térmico IRDT. Configuraciones (a) guardado e (b) inflado.	16
2.4	Aeroshell inflable IRVE de la NASA.	17
2.5	Escudo térmico MAAC de JAXA.	18
2.6	Proyecto IRENE. (a) Demostrador de IRENE, (b) prueba en túnel de viento de plasma SCIROCCO de CIRA y (c) diseño de MINI-IRENE.	18
2.7	Diseño y estructura del CubeSat Deorbit and Recovery System (DRS).	19
2.8	Concepto de sistemas desplegables para CubeSat propuestos por la Universidad de Nápoles Federico II.	20

2.9	Nano satélite de reentrada EGG de la JAXA. (a) Aeroshell desplegado y expandido. (b) Estructura tipo CubeSat 3U con el aeroshell guardado. (c) Fotografía durante el lanzamiento de EGG desde el brazo robótico Kibo de la ISS. Fuente: JAXA.	22
2.10	Etapas del vuelo de prueba de nano-ADEPT, SR-1. Fuente: NASA.	23
3.1	Modelos de los modos de energía molecular.	28
3.2	(a) Sección transversal de colisión, y (b) Volumen barrido durante la interacción de dos moléculas.	36
3.3	Dispersión de partículas en una colisión intermolecular.	37
3.4	Representación visual del dominio computacional empleado en simulaciones utilizando el método DSMC.	50
4.1	(a) Dimensiones del modelo de la sonda Mars Pathfinder (unidades en milímetros). (b) Gradiente de flujo aguas arriba en experimentos realizados en el túnel de viento SR3.	75
4.2	Dominio computacional. (a) Condiciones de frontera y (b) dimensiones (unidades en milímetros).	77
4.3	Sistema de referencia sobre la superficie (s/R_n).	77
4.4	Distribución de densidad adimensional (ρ/ρ_∞). Comparación entre resultados con el código dsmcFoam+ y los experimentos en SR3. .	79
4.5	Distribuciones de densidad adimensional (ρ/ρ_∞), temperatura total (T_{ov}) y número de Mach (M). Comparación entre las simulaciones dsmcFoam+ y DAC.	80
4.6	(a) Posiciones (X) en dirección normal a la superficie para mediciones de propiedades del flujo. (b) Ubicaciones de termocuplas para las mediciones experimentales de la transferencia de calor. .	81
4.7	Perfiles de densidad (ρ/ρ_∞) de simulaciones DAC y dsmcFoam+. .	82
4.8	Perfiles de temperatura (T_{ov}/T_∞) de simulaciones DAC y dsmcFoam+. .	82
4.9	Perfiles de velocidad (V_x/V_∞) de simulaciones DAC y dsmcFoam+. .	83
4.10	Comparación de las líneas de corriente obtenidas con el código dsmcFoam+ y con el código DAC.	84

4.11	Coeficiente de transferencia de calor (C_h) a lo largo de la superficie de la sonda Mars Pathfinder. Comparación entre resultados con el código dsmcFoam+ a distinta cantidad de iteraciones, con resultados del código DAC.	85
4.12	Mallas computacionales usadas en el estudio de la discretización espacial.	87
4.13	Influencia del nivel de refinamiento de la malla computacional en las propiedades aerotermodinámicas sobre la superficie del modelo de sonda (izquierda), y con mayor detalle sobre su parte cónica (derecha).	89
4.14	Influencia de la variación del paso de tiempo en las propiedades aerotermodinámicas sobre la superficie del modelo de sonda (izquierda), y con mayor detalle sobre su parte cónica (derecha).	92
4.15	Influencia de la variación de la cantidad de partículas DSMC por celda, en las propiedades aerotermodinámicas sobre la superficie del modelo de sonda (izquierda), y con mayor detalle sobre su parte cónica (derecha).	94
4.16	Influencia de la variación del número de iteraciones en las propiedades aerotermodinámicas sobre la superficie del modelo de sonda (izquierda), y con mayor detalle sobre su parte cónica (derecha).	96
5.1	Dimensiones del IAD desplegado y acoplado al CubeSat 1U. . . .	99
5.2	Esquema del (a) dominio computacional y de las condiciones de borde. (b) Malla computacional.	103
5.3	Dimensiones del dominio computacional en función de la altitud. .	103
5.4	Esquema de los perfiles de medición de propiedades macroscópicas.	106
5.5	Contornos de velocidad (V) y líneas de corriente alrededor de la geometría para las altitudes consideradas.	110
5.6	Perfiles de velocidad en función de la altitud en distintas posiciones normales a la geometría. A la izquierda las componentes de velocidad V_X y la derecha las componentes de velocidad V_Z	113
5.7	Contornos de temperatura (T) alrededor de la geometría para las altitudes consideradas.	117
5.8	Perfiles de temperatura en función de la altitud en distintas posiciones normales a la geometría.	119

5.9	Contornos de densidad (ρ) alrededor de la geometría para las altitudes consideradas.	122
5.10	Perfiles de densidad en función de la altitud en distintas posiciones normales a la geometría.	125
5.11	Contornos de presión (p) alrededor de la geometría para las altitudes consideradas.	128
5.12	Perfiles de presión en función de la altitud en distintas posiciones normales a la geometría.	130
5.13	Sistema de referencia para medición de propiedades sobre la superficie (s).	131
5.14	Distribución del flujo de calor a lo largo de la superficie geométrica al variar la altitud.	133
5.15	Contornos de flujo de calor (q) sobre la superficie de la parte frontal del IAD a diferentes altitudes.	135
5.16	Distribución de la presión a lo largo de la superficie geométrica al variar la altitud.	137
5.17	Contornos de presión (p) sobre la superficie de la parte frontal del IAD a diferentes altitudes.	139
5.18	Distribución del esfuerzo cortante a lo largo de la superficie geométrica al variar la altitud.	141
5.19	Contornos de esfuerzo cortante (τ) sobre la superficie de la parte frontal del IAD a diferentes altitudes.	143
5.20	(a) Fuerza de arrastre (F_d) y (b) coeficiente de arrastre (C_d), y sus contribuciones normal (n) y tangencial (t) a la superficie.	146
6.1	Configuraciones de IAD para futuras investigaciones.	150

Nomenclatura

Simbolos del latín

A	Area frontal del vehiculo espacial, m^2
A	Area del elemento de superficie, m^2
a	Velocidad del sonido, m/s
b	Parámetro de impacto
C_f	Coefficiente de fricción, $\tau/0.5\rho V_\infty^2$
C_h	Coefficiente de tranferencia de calor, $q/0.5\rho V_\infty^3$
C_p	Coefficiente de presión, $p - p_\infty/0.5\rho V_\infty^2$
C_d	Coefficiente de arrastre, $F_d/0.5\rho V_\infty^2 A$
\vec{C}	Velocidad molecular, m/s
D	Coefficiente de difusión, m^2/s
d	Diametro molecular, m
\hat{d}	Vector unitario en dirección del flujo libre
E	Energía total del sistema
F	Fuerza interatómica, N
$F_{correction}$	Factor de corrección
\vec{F}_d	Fuerza de arrastre, N
\vec{F}_M	Flujo neto de cantidad de movimiento, N/m^2
\vec{F}^{total}	Fuerza neta o total sobre el vehiculo espacial, N
g	Degeneración
g	Velocidad relativa, m/s
H	Altitud, km
h	Constante de Planck, $J \cdot s$
i	Nivel cuántico vibratorio, adimensional
J	Número cuántico rotacional
k	Constante de Boltzmann, $m^2 kg/s^2 K$
Kn	Número de Knudsen, λ/R_n
Ma	Número de Mach, V/a
m	Masa molecular, Kg
m_r	Masa reducida

N	Numero de moleculas reales
N_{coll}	Numero de colisiones
N_e	Número de elementos de superficie de la geometría
N_p	Número de particulas simuladas dentro de la celda de muestreo
N_{ps}	Numero de particulas que chocan con la superficie de la celda
N_s	Número de especies de la mezcla
N_{samp}	Número de pasos de tiempo de muestreo
n	Concentración molecular, m^{-3}
n_f	Flujo numérico, s^{-1}
n_1, n_2, n_3	Números cuánticos de traslación
P	Probabilidad
p	Presión escalar, Pa
Q	Función de partición
q	Flujo de calor, kW/m^2
R	Constante de los gases ordinaria $kJ/kg \cdot K$
\hat{R}	Constante universal de los gases, $J/kg \cdot mol \cdot K$
R_c	Radio del hombro, m
Re	Número de Reynolds, $\rho V L / \mu$
R_n	Radio de la nariz de la cápsula de reentrada, mm
\vec{r}	Posición de la particula, m
s	Sistema de referencia sobre la superficie, m
T	Temperatura, K
t	Tiempo, s
\hat{t}	Vector unitario tangente a la superficie
t_{mc}	Tiempo medio de colisión, s
\vec{V}	Velocidad macroscopica local o de corriente, m/s
V_c	Volumen de la celda, m^3
V_{mp}	Velocidad térmica más probable, m/s
\hat{n}	Vector unitario en dirección normal a la superficie
\vec{W}	Velocidad del centro de masa, m/s
W_p	Número de moléculas reales que representa cada partícula DSMC
X, Y, Z	Coordenadas cartesianas espaciales, m
Z	Número de colisión
$1U$	Unidad CubeSat

Simbolos griegos

α	Angulo de ataque, grados
γ	Relación de calores específicos, adimensional
δ	Separación media molecular, m
ϵ	Energía
ζ	Grado de libertad, adimensional
θ_v	Temperatura vibratoria característica, K
λ	Recorrido libre medio, m
μ	Viscosidad, $N \cdot s/m$
ν	Exponente de la ley de potencia
ν	Frecuencia de colisión, s^{-1}
ρ	Densidad, kg/m^3
σ	Sección transversal de colisión, m^2
τ	Tiempo característicos, s
τ	Esfuerzo de corte, N/m^2
χ	Ángulo de dispersión
ω	Índice de viscosidad dinámica, adimensional
Γ	Función Gamma
Ψ	Función potencial interatómica

Superíndices

$'$	Post-colisión
$'$	Velocidad termica o aleatoria
$post$	Post-colisión
pre	Pre-colisión

Subíndices

<i>coll</i>	Colisión
<i>mp</i>	Más probable
<i>ov</i>	General
<i>poly</i>	Poliatómico
<i>ref</i>	Referencia
<i>rot</i>	Rotacional
<i>s</i>	Especie que compone el gas
<i>T</i>	Total
<i>tr</i>	Traslacional
<i>vib</i>	Vibracional
<i>w</i>	Propiedad de la superficie
∞	Condiciones de flujo libre

Acrónimos

AIAA	American Institute of Aeronautics and Astronautics
AGARD	Advisory Group for Aerospace Research and Development
CFD	Computational Fluid Dynamics
CNRS	Centre National de la Recherche Scientifique
DAC	DSMC Analysis Code
DSMC	Direct Simulation Monte Carlo
GHS	Generalised Hard Sphere
GSS	Generalized Soft Sphere
HPC	High Performance Computer
HS	Hard Sphere
LaRC	Langley Research Center
LB	Larsen-Borgnakke
MD	Molecular Dynamics
NASA	National Aeronautics and Space Administration
NSF	Navier-Stokes-Fourier
NTC	No-Time-Counter
OpenFOAM	Open Field Operation And Manipulation
PES	Potential Energy Surface
QK	Quantum-Kinetic
TC	Time Counter
TPS	Thermal Protection System
VDF	Velocity Distribution Function
VHS	Variable Hard Sphere
VSS	Variable Soft Sphere

Capítulo 1

Introducción

Los desechos espaciales son objetos artificiales creados por el hombre en órbita alrededor de la Tierra, los cuales representan un gran problema para el sector aeroespacial. Por una parte, se tiene que las colisiones de desechos espaciales con naves espaciales en funcionamiento pueden dañar o destruir el hardware de la nave espacial, o bien afectar su órbita y por ende la misión, pudiendo reducir con ello la vida útil operativa [1]. Por otra parte, las colisiones también hacen que los desechos espaciales se multipliquen en órbita, presentando un problema tanto para la comunidad espacial como para la infraestructura de telecomunicaciones global [1, 2, 3]. Desde 1957, se estima que ha habido más de 630 rupturas, explosiones, colisiones o eventos anómalos, que resultaron en fragmentación de tecnología espacial, y que han contribuido a que más de 131 millones de desechos se encuentren actualmente en órbita [4]. Pese a que el volumen que ocupa esta basura es minúsculo en comparación con el vasto espacio ocupado por la órbita terrestre baja, esta cantidad es suficiente para iniciar una cascada de colisiones que podrían en el peor de los casos inutilizar la órbita terrestre baja [5, 6, 7].

Los desechos espaciales además representan un problema para la seguridad de la vida tanto de astronautas a bordo de naves espaciales como de personas comunes en la Tierra. En el primer caso, la basura espacial pone en riesgo la infraestructura de las estaciones espaciales en órbita y naves tripuladas en tránsito que salen de la tierra o vuelven hacia ella. Entre los años 1999 y 2020, la Estación Espacial Internacional ha realizado 29 maniobras para evitar escombros [8]. Afortunadamente, ninguna de estas situaciones terminó en tragedia, pero ponen en alerta sobre el peligro que suscita la basura espacial, y que si no se aborda, situa-

ciones como esta pueden repetirse y con mayor frecuencia. Por otra parte, cada año aproximadamente 100 objetos grandes hechos por el hombre salen de órbita y vuelven a ingresar a la atmósfera terrestre, formando escombros espaciales y a su vez muchos fragmentos de estos escombros, los cuales sobreviven al reingreso e impactan contra la superficie terrestre, presentando un riesgo para la seguridad de los habitantes de la Tierra [9].



Figura 1.1: Distribución de basura espacial en la órbita terrestre. Fuente: ESA.

La órbita terrestre baja, LEO de sus siglas en inglés (Low Earth Orbit), se define como la órbita ubicada entre aproximadamente 160 y 2000 kilómetros de altitud [10]. Esta región es la más densamente poblada por desechos espaciales, como se puede ver en la Figura 1.1, que es una representación de los escombros alrededor de la Tierra. La Figura 1.2 muestra todos los objetos lanzados a la órbita de la Tierra desde el lanzamiento del Sputnik 1 el 4 de octubre de 1957, clasificados según el rango de altitud de su órbita [11]. Se muestra como la mayoría de los lanzamientos han colocado objetos en LEO, y que la cantidad de objetos colocados en órbita solo ha aumentado con el transcurso del tiempo.

Por su parte, la Figura 1.3 muestra los objetos en la órbita de la Tierra, pero clasificado según tipo de objeto, donde los únicos objetos que no son desechos espaciales son el tipo “carga útil” [12]. Por tanto, la mayoría de los objetos en órbita son desechos espaciales.

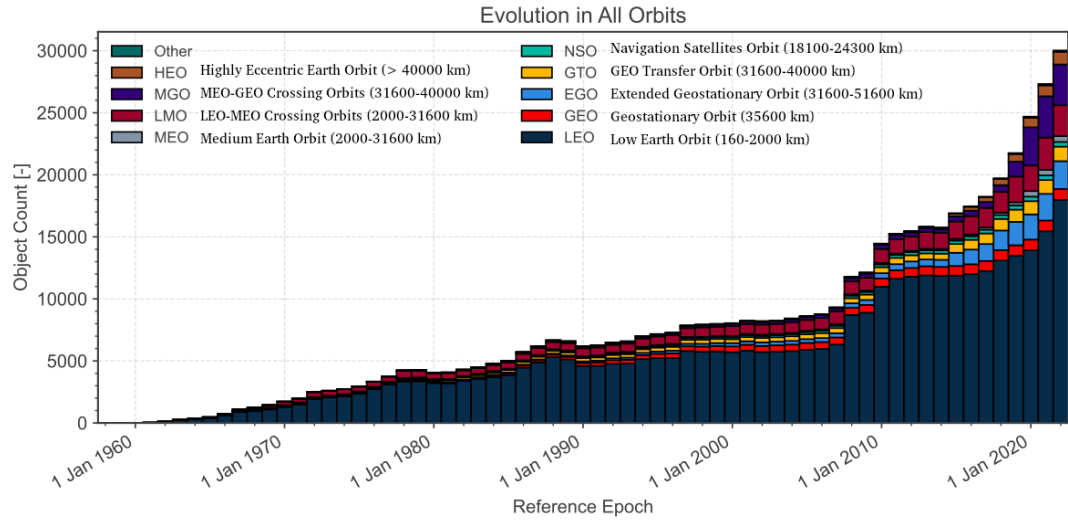


Figura 1.2: Número total de objetos lanzados al espacio según tipo de órbita [11].

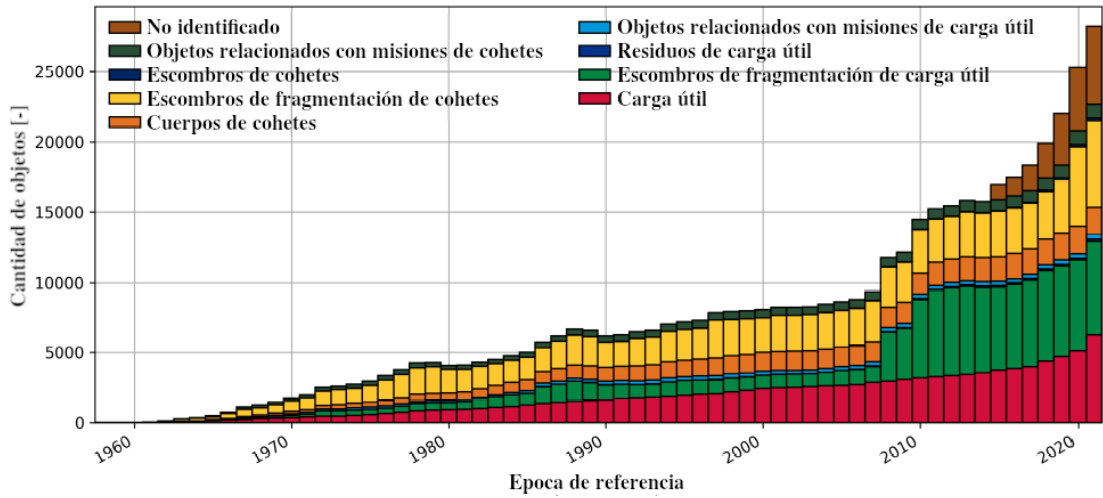


Figura 1.3: Número total de objetos lanzados al espacio según el tipo de objeto [12].

Las últimas cifras relacionadas con desechos espaciales, proporcionadas por la Oficina de Desechos Espaciales de la Agencia Espacial Europea (ESA) [4], al 4 de abril de 2022, estima que desde el comienzo de la era espacial en 1957 se han realizado alrededor de 6200 lanzamientos de cohetes (excluyendo fallas), lo que ha permitido poner en órbita alrededor de 12980 satélites. De estos, cerca de 5400 aún se encuentran en funcionamiento en el espacio, mientras que otros 2900 permanecen en el espacio sin funcionamiento. Por lo tanto, aproximadamente el

35% de los satélites actualmente en órbita son considerados desechos espaciales. Si bien LEO está lo suficientemente cerca de la Tierra para que el arrastre atmosférico produzca la descomposición de objetos espaciales en órbita con el transcurso del tiempo, solo el 36% de los satélites lanzados en la historia espacial han vuelto a entrar a la Tierra [4]. A esto se le suma que la cantidad de satélites en órbita se acrecentará considerablemente en los próximos años, impulsado por el abrupto aumento de lanzamientos de constelaciones de múltiples satélites. Uno de los casos más preocupantes en este ámbito es el proyecto de internet satelital de SpaceX, que con su megaconstelación Starlink busca poner en órbita hasta 42000 satélites, con el objetivo de abastecer de internet satelital de bajo costo a zonas remotas del planeta [13].

Los nanosatélites son satélites pequeños con una masa de carga útil de 1 kg a 10 kg. Dentro de esta categoría se encuentran los CubeSats, que son nanosatélites formados por unidades “U” acopladas unas con otras. Cada unidad tiene forma de cubo de 10 *cm* de lado, con una masa inferior a 2 *kg* [14]. Así, por ejemplo, un CubeSat 3U tiene una estructura formada por 3 de estos cubos. Para su construcción se utilizan componentes comerciales listos para ser implementados (COTS). Los CubeSats presentan una alta simplificación, miniaturización y estandarización, con respecto a la tecnología satelital clásica. Esto ha permitido reducir sus costos de implementación y por consiguiente, que universidades, pequeñas y medianas empresas y centros de investigación puedan acceder al espacio [1]. Por otro lado, las misiones de naves espaciales pequeñas generalmente se realizan en LEO, ya que es una órbita más accesible y menos costosa de alcanzar. La proximidad a la Tierra permite relajar las limitaciones de masa, potencia y propulsión de las naves espaciales. Además, el entorno de radiación en LEO es relativamente benigno para altitudes por debajo de los 1000 km [15]. Todo esto ha ocasionado que existan muchas oportunidades de viajes compartidos a LEO a través de varios proveedores de lanzamientos comerciales. Es así como desde el desarrollo de las especificaciones CubeSat en 1999, se han efectuado un gran número de lanzamientos de CubeSats. La Figura 1.4 muestra el número acumulado de nanosatélites lanzados desde la puesta en órbita del primero en 1998 [16]. Se muestra como a partir del año 2013 la cantidad de nanosatélites en órbita ha ido creciendo exponencialmente, y que la mayoría de estos corresponden a la categoría de CubeSats. Con ello, los nanosatélites y en particular los CubeSats se están convirtiendo en una gran fuente de desechos espaciales.

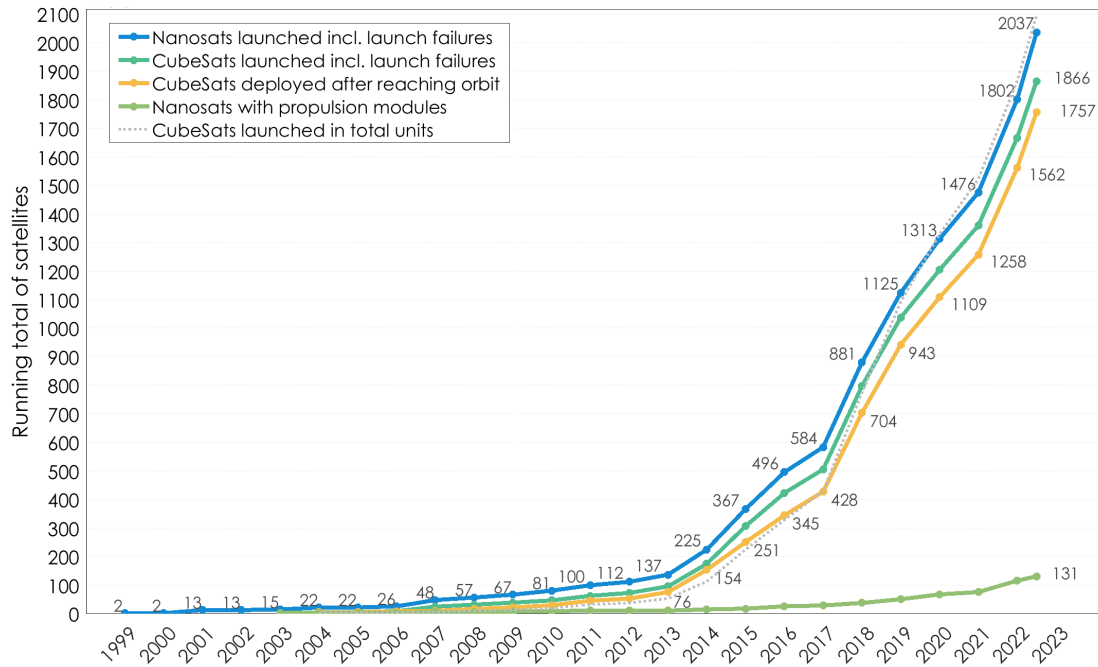


Figura 1.4: Número acumulado de nanosatélites y CubeSats lanzados al espacio [16].

El Programa de Desechos Orbitales de la NASA junto con el Comité de Coordinación de Desechos Espaciales Interinstitucionales (IADC) ha ordenado que todas las naves espaciales deben salir de órbita dentro de un período de tiempo determinado, o moverse a una órbita de cementerio para un almacenamiento seguro [15]. En el caso de naves espaciales en LEO, el requisito de tiempo de desorbitación es de 25 años después de la misión, o 30 años después del lanzamiento si no se puede almacenar en una órbita de cementerio [2, 17]. La mayoría de las naves espaciales pequeñas lanzadas no llevan propulsión a bordo, lo que las hace incapaces de alcanzar órbitas de cementerio para el desmantelamiento. Por lo tanto, deben confiar en técnicas de desorbitación, como aumentar el área de arrastre girando la nave espacial con su módulo de Sistema de Control y Determinación de Actitud (ADCS) si se encuentran en altitudes bajas. Para algunas naves espaciales, su área de arrastre no es suficiente para cumplir con el requisito de 25 años [2, 17]. En las últimas décadas se han propuesto dispositivos de desorbitado como velas de arrastre o contratar servicios de desorbitación externos [15]. La mayoría de los sistemas de desorbitación propuestos solo han considerado la destrucción del satélite durante la reentrada [1, 15].

Basándose en los antecedentes presentados, en esta investigación se busca en-

frentar estos problemas, ocasionados por nanosatélites tipo CubeSat. Se plantea la posibilidad de generar la reentrada de CubeSats una vez que estos finalizan su vida útil, pero impidiendo su destrucción. Esto implica la recuperación del CubeSat, lo que permitiría la reutilización de partes y componentes, y por consiguiente disminuir aún más los costos asociados al desarrollo e implementación de este tipo de tecnologías. A su vez, permitiría sacar de órbita definitivamente al nanosatélite, impidiendo que partes de sus escombros logren sobrevivir y se acumulen como basura espacial en órbita, disminuyendo el peligro de colisiones orbitales.

Para conseguir este cometido, es necesario el desarrollo de una tecnología que permita a un CubeSat ser capaz de sobrevivir a una reentrada atmosférica. Para ello, el CubeSat debe poder desacelerar lo suficiente y disipar la gran carga de calor experimentada al viajar a través de la atmósfera, de forma tal de protegerlo de altos esfuerzos térmicos a los que se vería enfrentado en caso contrario. En misiones comunes de entrada atmosférica, esto generalmente se logra utilizando un sistema de protección térmica rígido (TPS). Ejemplos de estos sistemas son los usados por cápsulas como Apollo y Orion (Figura 1.5a) de la NASA, o la cápsula Crew Dragon de SpaceX, entre otras, las cual han conseguido con éxito traer de regreso astronautas desde el espacio. El acotado volumen y masa de un CubeSat impiden la utilización de abultados sistemas TPS. Además, el tamaño del CubeSat se encuentra limitado por el diámetro del cohete que lo transporta [18, 19]. Una solución alternativa para este problema es aumentar el arrastre mediante desaceleradores aerodinámicos. Históricamente, los desaceleradores aerodinámicos más comunes que han sido empleados son los paracaídas. Sin embargo, las complicaciones en el inflado del paracaídas supersónico y su incapacidad para sobrevivir a las condiciones extremas de calentamiento hipersónico, hacen inviable su utilización [20, 21].

Una de las tecnologías más prometedoras para este propósito es el Desacelerador Aerodinámico Inflable, IAD de sus siglas en ingles (Inflatable Aerodynamic Decelerator) [18]. En la comunidad aeroespacial se han realizado esfuerzos para investigar los sistemas inflables o desplegables para reentrada atmósfera, esto se revisa en detalle en el capítulo 2, correspondiente al estado del arte. Los IAD son de interés para esta clase de misión porque se inflan a su tamaño completo en el espacio y no son directamente limitados por el diámetro del compartimiento de carga útil del vehículo de lanzamiento [19]. Cuando se despliegan, presentan un



(a) Cápsula Orion protegida por su TPS. (b) Proyecto de IAD de NASA.

Figura 1.5: Representaciones de naves espaciales durante la reentrada atmosférica, haciendo uso de sistemas de protección (a) rígido e (b) inflable.

coeficiente balístico bajo (es decir, la división entre la masa de la cápsula, y el producto del área frontal con el coeficiente de arrastre $BC = M/(C_d \cdot A)$), lo que implica una mayor desaceleración en la parte superior de la atmósfera terrestre, ofreciendo como ventaja la reducción de las cargas térmicas y mecánicas y, en consecuencia, una fiabilidad mucho mayor de la fase de reingreso [1, 22, 23, 24]. Las razones para el uso de estructuras inflables van desde su bajo costo hasta una eficiencia de empaque excepcional, confiabilidad de implementación, bajo volumen de almacenamiento y bajo peso [1]. El aspecto de los bajos costos de fabricación hace que los IAD sean un campo especialmente apetecido para investigación y desarrollo de proyectos universitarios, o de misiones de pequeños satélites. En la Figura 1.5b se muestra un desarrollo de IAD llevado a cabo por la NASA para misiones de entrada atmosférica en Marte.

El IAD consta de un cuerpo cúbico (CubeSat 1U) que contiene todos los componentes necesarios para la fase de reingreso, unido a un CubeSat 1U con los sistemas necesarios para su misión en órbita. Para el desarrollo de la IAD se requieren telas flexibles y resistentes a altas temperaturas, con las cuales se construye el sistema inflable que posteriormente es empaquetado en el CubeSat [22]. Los materiales para sistemas de protección térmica flexibles propuestos para aplicaciones en IADs tienen límites de calentamiento relativamente bajos, cercanos a los 500 kW/m^2 [19, 25, 26]. Por ello, es necesario un estudio preciso sobre las condiciones de reentrada asociado al calor generado sobre la superficie de los IAD, al igual que la determinación de las fuerzas aerodinámicas.

1.1 Regímenes de flujo en reentrada atmosférica

Durante la reentrada atmosférica de vehículos espaciales se experimentan fuerzas aerodinámicas que son el resultado del flujo atmosférico que impacta e interactúa con la superficie del vehículo. Debido a la atracción gravitacional de la Tierra, la densidad de la atmosférica aumenta durante la reentrada, y en consecuencia lo mismo hace la presión atmosférica. El flujo atmosférico, entonces, no actúa de igual forma a distintas altitudes de la atmósfera, de hecho, existen diferentes regímenes con los que se describe. Estos regímenes de flujo caracterizan las interacciones físicas entre el vehículo y sus alrededores, y por ende deben considerarse durante el diseño aerotermodinámico del vehículo [27, 28].

A grandes altitudes se encuentra el régimen de flujo molecular libre, que se caracteriza por una atmósfera altamente enrarecida (muy poco densa), y por ende, con un recorrido libre medio (distancia promedio recorrida por cada partícula entre colisiones sucesivas) muy grande. Una vez que el vehículo de reentrada atraviesa la zona atmosférica de gran altitud caracterizada por un régimen de flujo molecular libre, se encuentra con el régimen de flujo en transición. En este régimen el nivel de rarefacción de la atmósfera disminuye, con la correspondiente disminución del recorrido libre medio. En este régimen, la contribución de las fuerzas aerodinámicas y el flujo de calor a la superficie del vehículo comienza a aumentar rápidamente con la disminución de la altitud, causando grandes cambios en las características aerodinámicas del vehículo. Se forman fuertes ondas de choque frente al vehículo y la aparición de desequilibrio termodinámico y en algunos casos también de un desequilibrio químico. Finalmente, durante la entrada atmosférica se alcanzan menores altitudes, caracterizado por un régimen de flujo continuo, con una atmósfera densa y un recorrido libre medio pequeño [27, 28].

Como veremos en el capítulo 3, las colisiones intermoleculares proporcionan el mecanismo físico que empuja un gas hacia el equilibrio. Un número insuficiente de colisiones conduce al desequilibrio. Por tanto, cuanto más enrarecido es un gas, mayor es el desequilibrio termodinámico debido a la falta de colisiones moleculares. Para cuantificar el nivel de rarefacción de un gas se utiliza el número de Knudsen (Kn), que es un número adimensional definido como la relación entre el recorrido libre medio (λ) y una longitud característica del cuerpo en el flujo (L), como se expresa a continuación:

$$Kn = \frac{\lambda}{L} \quad (1.1)$$

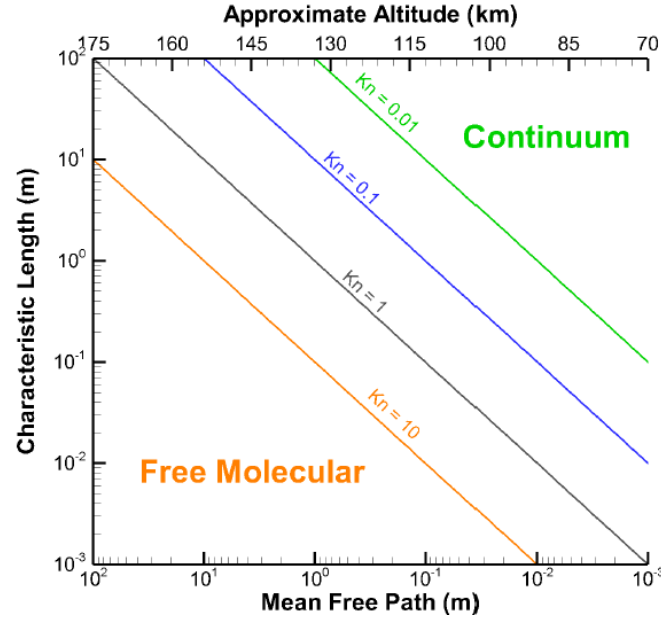


Figura 1.6: Números de Knudsen y regímenes de flujo en función de la altitud y de la longitud característica [29].

El número de Knudsen determina si se espera que un flujo de gas muestre un comportamiento que requiera un enfoque de modelado molecular, o un comportamiento cercano al equilibrio en el que los métodos de la dinámica de gases continua proporcionan un modelo preciso. Por tanto, el número de Knudsen permite delimitar cuantitativamente los regímenes de flujo [27, 28]. Estos límites se muestran en la Figura 1.6, donde se presenta el número de Knudsen en función del recorrido libre medio (y de la altitud) en el eje horizontal y de la longitud característica en eje vertical. En la Figura 1.6, el límite entre modelos moleculares y continuos está marcado por la línea verde, donde $Kn = 0.01$. En tal flujo, una molécula sufriría aproximadamente 100 colisiones a medida que atraviesa la escala de longitud característica de interés, L , y por ende, se esperaría que el gas en esta vecindad esté en estado cercano al equilibrio. Por contraparte, se espera un flujo fuera del equilibrio para condiciones de baja densidad [28]. Para $Kn > 10$ (representado con una línea naranja en la Figura 1.6), el flujo es aproximadamente molecular libre donde ocurren muy pocas colisiones dentro del volumen de interés. En este régimen, las moléculas de aire chocan e interactúan con la superficie del vehículo, sin embargo, es muy poco probable que ocurran colisiones de partículas reflejadas desde la superficie con partículas del flujo libre. La región donde $0.01 < Kn < 10$ se encuentran en el régimen de transición. En este

régimen de flujo, las colisiones entre las partículas reflejadas desde la superficie del vehículo y las partículas de flujo libre entrantes ya no se pueden ignorar, sin embargo, tampoco se puede recurrir a las ecuaciones del continuo dado que estas se vuelven inexactas [27, 28].

A menudo, definir el número de Knudsen usando el tamaño del vehículo como L y las condiciones de flujo libre para el valor de λ , da una buena indicación de sí el flujo requiere de un enfoque de modelado molecular o continuo. Si además se requiere conocer el comportamiento local del flujo, o en alguna zona específica, se puede utilizar un número de Knudsen local. El número de Knudsen local se define por la relación entre el recorrido libre medio λ , y una longitud característica definida por el gradiente de una cantidad macroscópica φ , como la densidad, la velocidad o la temperatura [27, 28], por lo tanto,

$$L = \frac{\varphi}{\nabla \varphi} \quad (1.2)$$

Como se mencionó anteriormente, para resolver problemas en distintos regímenes de flujo, son requeridas distintas formulaciones matemáticas. La Figura 1.7 presenta los límites de los modelos matemáticos típicos empleados, expresados en términos del número de Knudsen local.

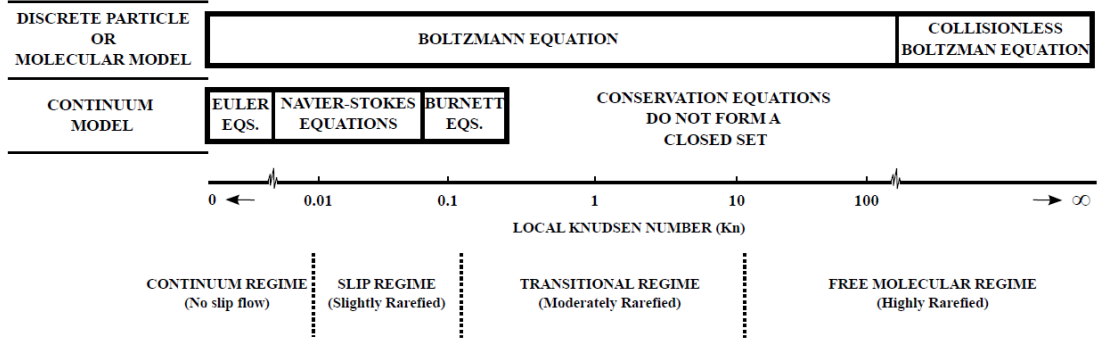


Figura 1.7: Clasificación de regímenes de flujo y sus formulaciones matemáticas [30].

En el modelo macroscópico o continuo, las ecuaciones de conservación del movimiento de los gases son válidas para todos los regímenes de flujo. Sin embargo, estas expresiones no forman un sistema de ecuaciones cerrado cuando el flujo se torna enrarecido. La aplicación de las ecuaciones de conservación requiere información adicional sobre el tensor de esfuerzo cortante y el vector de flujo de calor [28]. Cuando el número de Knudsen tiende a cero, se pueden usar las ecua-

ciones de Euler para flujo no viscosos. Estas ecuaciones suponen que el flujo está en equilibrio termodinámico local y, por tanto, es válida la función de distribución de velocidad de Maxwell en cualquier punto del flujo [27]. Cuando el número de Knudsen es relativamente pequeño, el modelo continuo expresado por las ecuaciones de Navier-Stokes es válido. En este caso, la función de distribución de velocidad puede desviarse ligeramente de la función de distribución de Maxwell, y los coeficientes de transporte obtenidos de la teoría Chapman-Enskog son válidos [31]. Cuando el número Knudsen local crece por sobre 0.05, se alcanzan niveles altos de desequilibrio termodinámico, y por ende las ecuaciones de Navier-Stokes ya no son válidas. Se recurre así a las ecuaciones de Burnett, las cuales se obtienen a partir de la expansión Chapman-Enskog a un orden alto. Las ecuaciones de Burnett aumentan el orden de las ecuaciones diferenciales que gobiernan el momento y el transporte de energía en el gas. Estas ecuaciones son más difíciles de resolver numéricamente y fallan cuando el grado de rarefacción es suficientemente alto [30].

En el modelo microscópico o molecular, el gas se trata como una colección de partículas donde la posición y la velocidad de estas partículas se describen individualmente. Tal sistema requiere la solución de la ecuación de Boltzmann. La ecuación de Boltzmann es una ecuación íntegro-diferencial con la función de distribución de velocidad como la única variable dependiente. Cuando el número de Knudsen tiende a infinito, el flujo se considera sin colisión y, por tanto, la ecuación de Boltzmann se puede resolver en forma analítica. Las soluciones analíticas de la ecuación de Boltzmann generalmente involucran modelos moleculares simples, una variable macroscópica independiente y flujos con pequeñas perturbaciones. Para números de Knudsen altos, la solución directa de la ecuación de Boltzmann no es posible, por lo que se han desarrollado métodos numéricos basados en la física. Las técnicas más utilizadas en la actualidad son el método Molecular Dynamics (MD) y el método Direct Simulation Monte Carlo (DSMC) [27, 28].

El método DSMC es uno de los métodos más usados en el sector aeroespacial para resolver problemas de aerotermodinámica de vehículos espaciales en regímenes de flujo molecular libre y de transición. El método DSMC aproxima probabilísticamente la ecuación de Boltzmann empleando partículas de referencia, cada una de las cuales representa una gran cantidad de moléculas reales. Estos métodos de partículas son relativamente costosos computacionalmente en comparación con simulaciones típicas de Computational Fluid Dynamics (CFD),

y especialmente costosos computacionalmente en comparación con las soluciones analíticas. El método DSMC será abordado en profundidad en el capítulo 3, correspondiente al marco teórico.

1.2 Objetivos del proyecto

La comprensión de las fuerzas aerodinámicas y el flujo de calor tienen un impacto directo en el desarrollo de los Desaceleradores Aerodinámicos Inflables (IAD). El objetivo principal de este proyecto es investigar el efecto de la variación de la altitud durante la etapa de reentrada atmosférica en IAD aplicados a CubeSats. Se realiza un estudio detallado de la estructura del campo de flujo, la estructura de la onda de choque, la región de estela formada aguas abajo del vehículo, así como de las propiedades sobre la superficie. En este trabajo, la estructura del campo de flujo se define por la distribución de las propiedades primarias, como la velocidad, la densidad, la presión y la temperatura, adyacentes a la superficie de la nave espacial. Las propiedades sobre la superficie se identifican por el flujo de calor, y las fuerzas normales y tangenciales que actúan sobre la superficie del vehículo.

Para evaluar el efecto de la altitud, se realizaron simulaciones numéricas del flujo embistiendo la geometría del IAD-CubeSat en diferentes puntos de reentrada. Estos puntos corresponden a cinco altitudes diferentes durante el régimen de transición, las cuales corresponden a 115, 110, 105, 100 y 95 km. Las simulaciones computacionales se ejecutan empleando el método Direct Simulation Monte Carlo (DSMC). En el régimen de flujo de transición, el calentamiento aerodinámico y las fuerzas que actúan sobre las superficies del vehículo son muy sensibles al grado de rarefacción. Por ello, se busca obtener resultados detallados de estas propiedades sobre la superficie.

Los principales objetivos de esta tesis se presentan a continuación:

- Verificación y validación del código `dsmcFoam+` para flujos hipersónicos enrarecidos y no reactivos, sobre una geometría propia de reentradas atmosféricas, como es un cuerpo de tipo cono-romo.
- Estudio del efecto de la altitud en IAD aplicados a CubeSat en el régimen de transición.

- Determinar el flujo de calor y las fuerzas aerodinámicas sobre los IAD.
- Determinar la estructura del campo de flujo que envuelve al IAD-CubeSat.
- Se espera que los datos obtenidos de esta investigación sean de utilidad para el desarrollo de tecnología IAD, como el diseño estructural y la selección de materiales, la descripción de la actitud de vuelo, entre otras.

1.3 Esquema de tesis

En el Capítulo 2 se presenta el estado del arte concerniente a desaceleradores aerodinámicos inflables y desplegables. Primero se aborda desde una perspectiva histórica, abarcando sistemas desplegables y posteriormente inflables, para finalmente enfocarse en aplicaciones de estos sistemas a CubeSats.

En el Capítulo 3 se presentan en una primera instancia los fundamentos que subyacen el método computacional utilizado, mientras que posteriormente se muestra el método computacional y el código computacional utilizados para realizar las simulaciones de esta investigación. Así, se describen los fundamentos de la mecánica estadística y de la teoría cinética de los gases, el algoritmo básico del método DSMC y los modelos físicos implementados. Finalmente, se presenta el código `dsmcFoam+`.

En el Capítulo 4 se aborda la verificación y validación del código `dsmcFoam+` para el propósito de investigación previsto. En el proceso de verificación, se efectúan simulaciones para certificar que se respetan los procedimientos DSMC correctos. Para el procedimiento de validación, los resultados obtenidos con el código `dsmcFoam+` para un flujo hipersónico enrarecido y no reactivo sobre una geometría de cono romo, se comparan con los resultados experimentales y numéricos disponibles en la literatura.

En el Capítulo 5 se presentan y analizan los resultados de la estructura del campo de flujo y las cantidades aerotermodinámicas de la superficie del desacelerador aerodinámico inflable del CubeSat en forma desplegada, al variar la altitud de reentrada atmosférica desde los 115 a los 95 km.

Las conclusiones más relevantes de esta investigación se presentan en el Capítulo 6 junto con una discusión sobre trabajos futuros.

Capítulo 2

Estado del arte

En este capítulo se presenta una revisión bibliográfica detallada de proyectos de desaceleradores aerodinámicos inflables y desplegables desarrollados a lo largo de la historia. Estos proyectos se han aplicado tanto a grandes cargas útiles como a pequeños satélites. Dentro de sus aplicaciones en CubeSat, destacan cuatro proyectos que serán presentados. Finalmente, se abordan distintas formas de abordar investigaciones de reentrada atmosférica, y sus ventajas y desventajas.

2.1 Sistemas desplegables e inflables

El primer concepto de un escudo térmico desplegable fue desarrollado por estudiantes de la clase de diseño de sistemas espaciales avanzados en el Massachusetts Institute of Technology en 1988 [32]. Posteriormente, en 1989, el Space Systems Laboratory del Department of Aerospace Engineering de la University of Maryland, introdujo el concepto de "ParaShield" para describir un escudo térmico que además actuaba como paracaídas de aterrizaje. Este primer proyecto se llamó Skidbladnir [32], y tenía como objetivo el desplegarse y brindar protección térmica para la entrada hipersónica, y a su vez, actuar como desacelerador aerodinámico durante las etapas tanto hipersónica como subsónica. Skidbladnir iba a probarse en un vuelo suborbital del cohete Amroc-SET, pero el lanzamiento fracasó y el experimento fue destruido [33]. Esta experiencia sentó las bases de posteriores experimentos con escudos térmicos de tipo ParaShield. En la Figura 2.1 se muestran tanto la estructura interna desplegable 2.1a, como las configuraciones retraída 2.1b y desplegada 2.1c con el escudo térmico puesto.

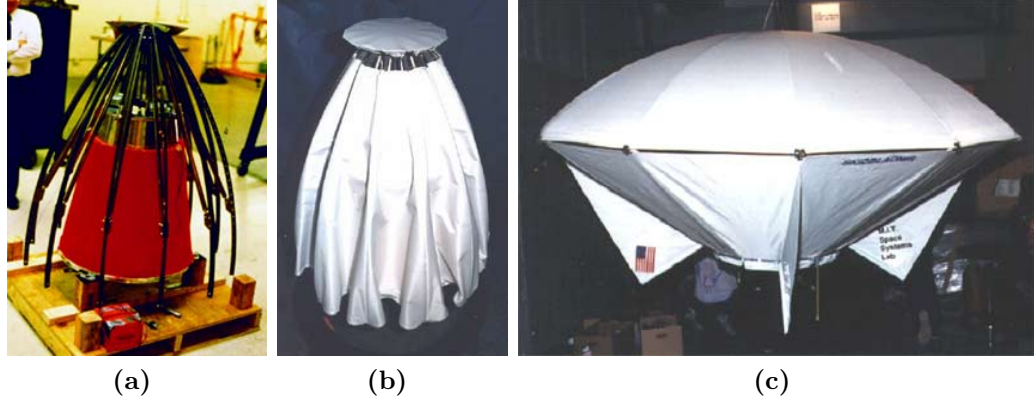


Figura 2.1: Cápsula espacial Skidbladnir. (a) Esqueleto interno desplegable. Configuraciones (b) retraída y (c) desplegada [32, 33].

Luego, en 1996, el Centro de Tecnología Espacial Aplicada y Microgravedad (ZARM) de la Universität Bremen, bajo el patrocinio de la Agencia Espacial Alemana (DLR), desarrollo el proyecto BREM-SAT 2 [34] (Figura 2.2). Este proyecto representaba una continuación de BREM-SAT 1 [35], misión que desarrollo experimentos en entorno de microgravedad, investigación del entorno de órbita terrestre baja, y mediciones de presión y temperatura suborbitales, entre los años 1994 y 1995. A diferencia de su antecesor, BREM-SAT 2 contaba con un escudo térmico desplegable con el objetivo de regresar a la Tierra, y recuperar datos científicos de su reingreso y las muestras de material de un experimento en microgravedad. El escudo térmico utilizado fue de tipo ParaShield, y fue construido de un tejido de silicona y brazos de titanio desplegables. El diámetro inicial era de 0.65 m y luego del despliegue alcanzaba los 2.24 m . Se desconoce el éxito o fracaso de la misión, dado que no se hicieron publicaciones posteriores.

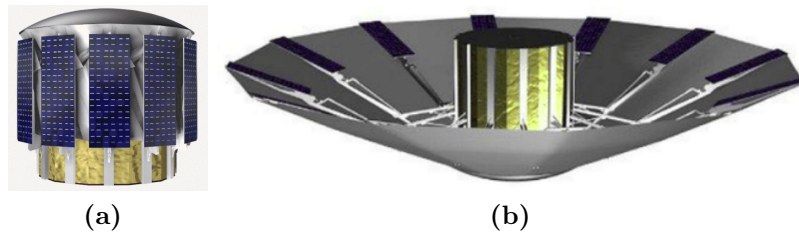


Figura 2.2: BREM-SAT 2. Configuraciones (a) retraída y (b) desplegada [34].

En febrero de 2000 se desarrolló un primer vuelo de prueba de un protector térmico inflable, el Inflatable Reentry and Descent Technology (IRDT) [36]. Esta

tecnología fue desarrollada originalmente por Lavochkin/Babakin Space Center para la misión Mars-96. Posteriormente, junto con la Agencia Espacial Europea, Astrium y el International Science and Technology Center, se desarrolló una primera misión de prueba de reentrada en la Tierra. El escudo térmico se conformó por dos secciones inflables en forma independiente (Figura 2.3b), el primero enfocado en la gran altitud, mientras que el segundo se implementó para aumentar el área de la sección transversal y servir como paracaídas. Durante la prueba de vuelo, el primer escudo térmico se infló exitosamente, pero su segundo escudo aerodinámico no se infló correctamente, lo que provocó un impacto más fuerte de lo previsto. Misiones posteriores (años 2002 y 2005) tampoco tuvieron éxito.

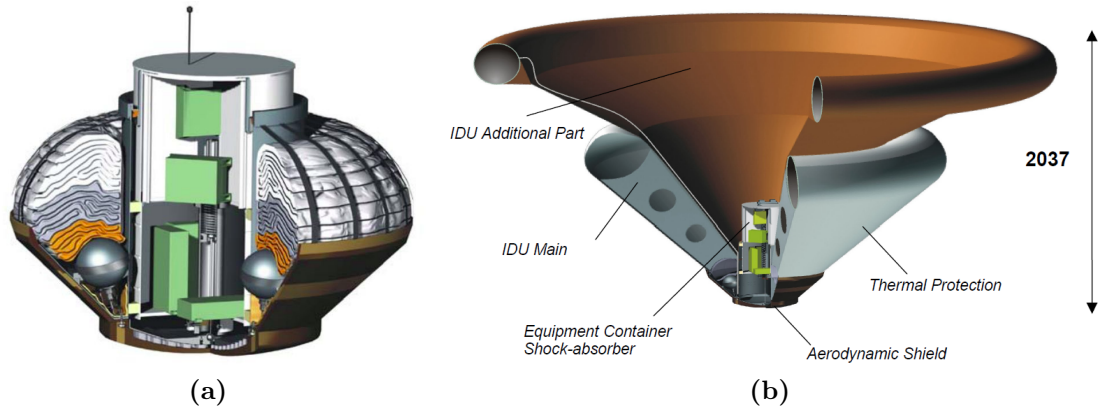


Figura 2.3: Escudo térmico IRDT. Configuraciones (a) guardado e (b) inflado [36].

A partir del año 2006, NASA desarrolló los proyectos Inflatable Reentry Vehicle Experiment IRVE I, II y III [37, 38, 39], los cuales fueron experimentos de vuelo enfocados en probar y validar sistemas de aeroshell inflables. Los vehículos de reingreso IRVE consistieron en un aeroshell cónico formado por toroides inflables (Figura 2.4). En la configuración de lanzamiento, el aeroshell desinflado se empaqueta alrededor del cuerpo central. Después de la separación del vehículo de lanzamiento, el aeroshell se infla a su configuración de reentrada con un ángulo de semi-cono de 60 grados, y un diámetro exterior de 3 m. IRVE-I fue lanzado el 6 de septiembre de 2007, con los objetivos de evaluar el rendimiento térmico y de arrastre, y recopilar datos de vuelo para compararlos con las técnicas de análisis y diseño utilizadas en el desarrollo del vehículo [37]. Lamentablemente, el lanzador no pudo liberar el vehículo de reingreso de la cubierta de lanzamiento. IRVE-II se construyó de forma muy similar a su antecesor, tenía una masa de 124.6 kg, y se

lanz  el 17 de agosto de 2009. El lanzamiento fue exitoso, el veh culo alcanzo un apogeo de 218 *km*, para posteriormente desplegar el IAD y descender [38]. Ante el  xito de la misi n IRVE-II, la NASA puso en marcha el programa Hypersonic Inflatable Aerodynamic Decelerators (HIAD), que ten a como objetivos demostrar el rendimiento del sistema a altitudes relevantes, y demostrar controlabilidad en la atm sfera. As , el IRVE-3 fue lanzado el 23 de julio de 2012, alcanz  un apogeo de 469 *km* de altitud y cumpli  con  xito su misi n, demostrando la capacidad de supervivencia de un HIAD en el entorno de reentrada. IRVE-III estaba equipado con un mecanismo capaz de modular la ubicaci n del centro de masa durante el reingreso y, por lo tanto, proporcionan control del vector de elevaci n. Con ello, se demostr  que era posible dirigir el veh culo inflable y controlar su descenso como se hace con c psulas r gidas de reentrada [39].

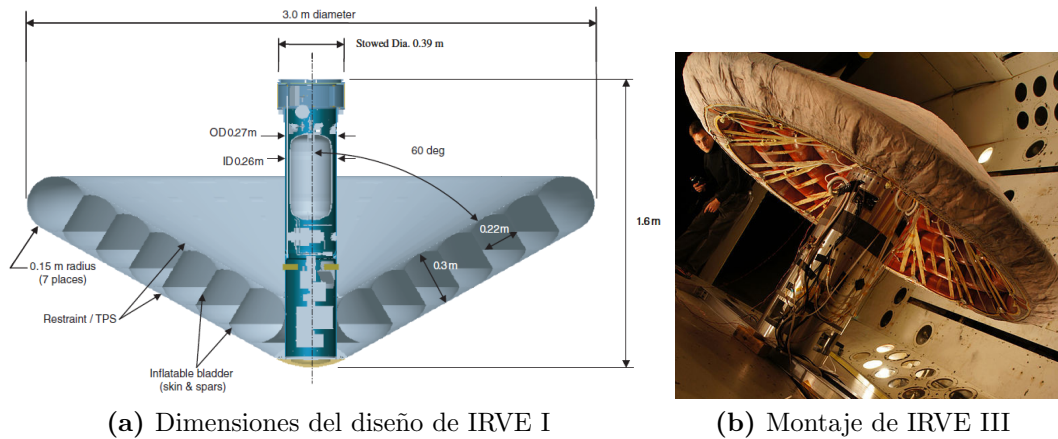


Figura 2.4: Aeroshell inflable IRVE de la NASA.

El 7 de agosto de 2012, la Japan Aerospace Exploration Agency (JAXA) prob  un escudo t rmico inflable llamado Membrane Aeroshell for Atmospheric-entry Capsule (MAAC) [40] en un vuelo suborbital (Figura 2.5a). El veh culo estaba equipado con una membrana aerodin mica flexible desplegada por una estructura de toro inflable, con dimensiones que se muestran en la Figura 2.5b. En el vuelo, la cubierta del aeroshell del veh culo se abri  a una altitud de 100 *km* y el toro inflable se presuriz  a 106 *km* para desplegar la membrana aeroshell. Posteriormente, el veh culo se separ  del cohete a una altitud de 111 *km* y comenz  a reingresar desde una altitud de 150 *km*. Durante la reentrada suborbital se midieron las temperaturas superficiales, lo que permiti  estimar el calentamiento aerodin mico y compararlo con predicciones num ricas utilizando t cnicas CFD.

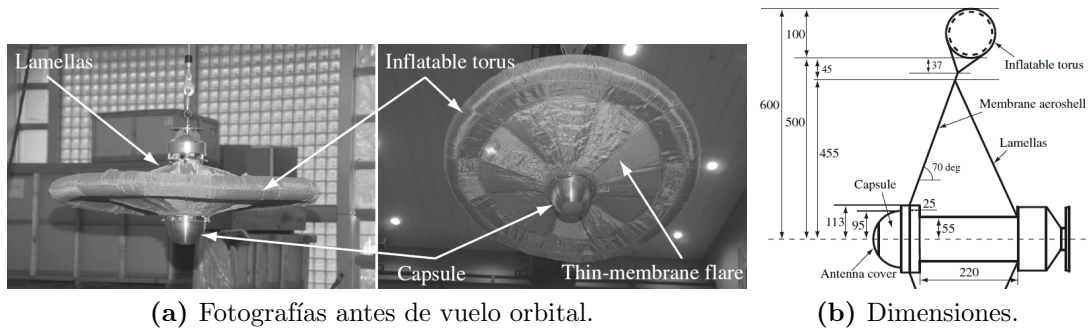


Figura 2.5: Escudo térmico MAAC de JAXA.

La Agenzia Spaziale Italiana (ASI) en conjunto con el Aerospace Laboratory for Innovative components (ALI) y la Università degli Studi di Napoli Federico II, se encuentran desarrollando el proyecto IRENE, que consiste en un sistema de reentrada desplegable basado en un escudo térmico de ángulo de medio cono de 45 grados [41]. Su objetivo es crear un módulo de reingreso recuperable y reutilizable, con una masa de reentrada de 120 kg y con gran capacidad de carga útil (hasta el 40% de su masa). Para ello, en 2011 desarrollaron un demostrador a pequeña escala (Figura 2.6a), con el cual se efectuaron pruebas en el túnel de viento hipersónico SPES, y en el Túnel de Viento de Plasma SCIROCCO. Posteriormente, se desarrolló un Demostrador de Vuelo (FD) de IRENE, llamado MINI-IRENE [42], y que corresponde a un prototipo reducido para vuelo suborbital (Figura 2.6c). Se realizaron pruebas en el túnel de viento de plasma SCIROCCO. La fase actual del programa busca poner en vuelo suborbital a MINI-IRENE a bordo de un cohete VSB-30, y alcanzar un apogeo de 250 km de altitud.

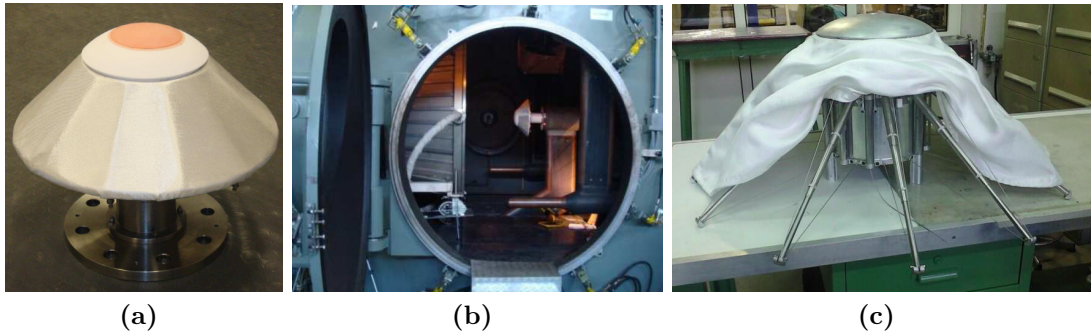


Figura 2.6: Proyecto IRENE. (a) Demostrador de IRENE [43], (b) prueba en túnel de viento de plasma SCIROCCO de CIRA [43] y (c) diseño de MINI-IRENE [42]

2.2 Aplicaciones en CubeSats

Como se mostró en la sección anterior, la tecnología de desaceleradores aerodinámicos inflables y desplegables se ha desarrollado desde fines de la década de los 80, pero no fue hasta el año 2010 cuando se aplicó por primera vez a nanosatélites tipo CubeSat. A continuación, se presentan proyectos que están presentes en la literatura y que van en esta línea.

En el año 2010, Andrews Space (actualmente Spaceflight Industries) desarrolló y presentó el CubeSat Deorbit and Recovery System (DRS) [44], dispositivo independiente que utiliza tecnología inflable para acortar la vida útil de una nave espacial en un factor de diez, o permitir el reingreso controlado y la recuperación segura de naves espaciales de clase NanoSat y CubeSat. El CubeSat DRS es un módulo de 1U que se conecta a un CubeSat de 2U estándar, como se muestra en la Figura 2.7a. Una señal de la nave espacial desencadena el despliegue de cuatro paredes articuladas del módulo y el inflado de un desacelerador con forma toroidal en el borde y de un tejido flexible en el centro, como se muestra en las Figuras 2.7b y 2.7c. Su diámetro es de 1.2 metros y el ángulo de medio cono es de 60 grados. Para el caso de misiones cuyo objetivo es salir de órbita sin recuperación, el cono de tensión debía provocar un decaimiento acelerado de la órbita y los materiales que componen el sistema se quemarían en la atmósfera. Alternativamente, si el objetivo era la recuperación del satélite, el sistema protegería la carga útil del entorno de reingreso.



Figura 2.7: Diseño y estructura del CubeSat Deorbit and Recovery System (DRS) [44].

Posteriormente, desde 2011 a la fecha, la Università degli Studi di Napoli Federico II, por medio de su división aeroespacial, ha estudiado una serie de configuraciones de desaceleradores aerodinámicos desplegables. En primera instancia,

estos fueron aplicados a los proyectos IRENE y MINI-IRENE, para posteriormente ser aplicados a nanosatélites [1, 45, 46, 47]. Dentro de estas investigaciones, se han desarrollado nuevos conceptos de módulos de salida y reentrada para CubeSats [1]. Es así como en 2013 se presenta un análisis de viabilidad de dos conceptos, en relación con aspectos críticos como las trayectorias de reingreso, las cargas aerotérmicas y mecánicas, y las posibles estrategias de control de las trayectorias de salida de órbita. Se utilizó una configuración desplegable con ángulo de semi cono de 45 grados, con una estructura CubeSat 3U, 2U para carga útil y 1U para los sistemas necesarios para el despliegue del escudo térmico. El primer diseño es el CubeSat End-of-Life System (CELS), cuyo objetivo es simplemente salir de órbita sin recuperación, con lo que el sistema desplegable está destinado a quemarse en la atmósfera (Figura 2.8a). Por tanto, los requisitos de material no son restrictivos y se pueden realizar estructuras sencillas y ligeras. El segundo concepto planteado es el CubeSat De-orbit and Recovery System (CDRS), que busca proteger el CubeSat durante el reingreso a la atmósfera, de forma tal de poder recuperarlos (Figura 2.8b). A diferencia de CELS, CDRS requiere una punta esférica de materiales cerámicos para resistir las cargas térmicas y mecánicas que actúan alrededor del punto de estancamiento y un material flexible de alta temperatura para el escudo térmico. En ambos conceptos, la superficie del sistema desplegable se puede modular, lo que permite cambiar el ángulo de medio cono para controlar la trayectoria y apuntar la carga útil a un área despoblada para el aterrizaje y la recuperación.

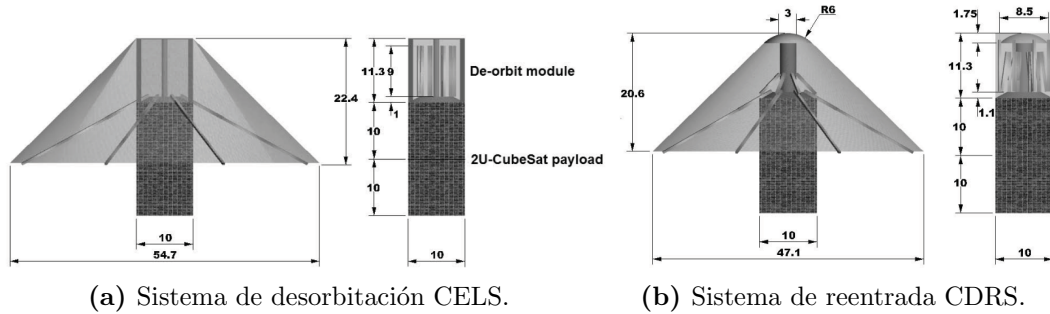


Figura 2.8: Concepto de sistemas desplegables para CubeSat propuestos por la Universidad de Nápoles Federico II [1].

Más recientemente, en 2017, como una continuación del proyecto MAAC, JAXA llevo a cabo una misión de despliegue orbital de su nanosatélite con sistema

inflable [48]. El nanosatélite se encontraba equipado con un aeroshell inflable con forma toroidal, además de 4 paneles solares desplegables (Figura 2.9a). En su configuración empaquetada, el nanosatélite tenía una estructura tipo CubeSat 3U (Figura 2.9b), con dimensiones de $11\text{ cm} \times 11\text{ cm} \times 34\text{ cm}$ y una masa de aproximadamente 4 kg. El diámetro del aeroshell era de aproximadamente 80 cm y el ángulo de apertura era de 60 grados. La misión consistió en el lanzamiento de EGG desde la Estación Espacial Internacional (ISS), a una altitud de aproximadamente 400 km (Figura 2.9c). El nano satélite permaneció 26 días en órbita hasta que se expandió el aeroshell por medio del inyectado de gas en el toro inflable, para luego iniciar un vuelo de bajo coeficiente balístico durante 94 días que finalizaron con la entrada atmosférica. El aeroshell estaba equipado con 7 termocuplas, lo que permitió medir su temperatura superficial y estimar el calentamiento aerodinámico. Además, contaba con sensores de actitud y de presión, lo que permitió estimar las fuerzas aerodinámicas y los comportamientos de actitud durante el vuelo. Estas mediciones se compararon con simulaciones numéricas utilizando el método DSMC, a una altitud de 120 km. Para el análisis numérico del campo de flujo alrededor de EGG se consideró una velocidad de entrada fija de 7800 m/s. Se encontró que el flujo de calor en el toro inflable alcanzó un valor máximo de 4.0 kW/m^2 a la altitud de 120 km, resultado muy similar a las simulaciones. Por otra parte, se determinó que a partir de los 150 km y hasta los 100 km de altitud el coeficiente de arrastre disminuía con una menor altitud. La misión fue exitosa, pero se encontró que la membrana del aeroshell estaba deformada después del vuelo de entrada.

Finalmente, la NASA ha estado desarrollando el proyecto Adaptable Deployable Entry Placement Technology (ADEPT) [49], cuyo objetivo es crear sistemas de entrada atmosférica desplegables mecánicamente, para realizar funciones de entrada, descenso y aterrizaje (EDL) para misiones planetarias. Las investigaciones incluyeron desde análisis y diseño de un sistema de gran diámetro (aproximadamente 23 m) para aterrizar masas pesadas en Marte, pasando por un sistema de 6 m para entrar en Venus, hasta el desarrollo del nano-ADEPT (0.7 m de diámetro) para la entrada de pequeñas cargas útiles [50]. El sistema desplegable de ADEPT se confeccionó de un tejido de carbono de alto rendimiento para actuar como protector térmico. La geometría de nano-ADEPT es muy aproximada a un CubeSat 3U, con su respectivo sistema aeroshell desplegable a un ángulo de semi-cono de 70 grados. El 12 de septiembre de 2018 se efectuó la prueba de

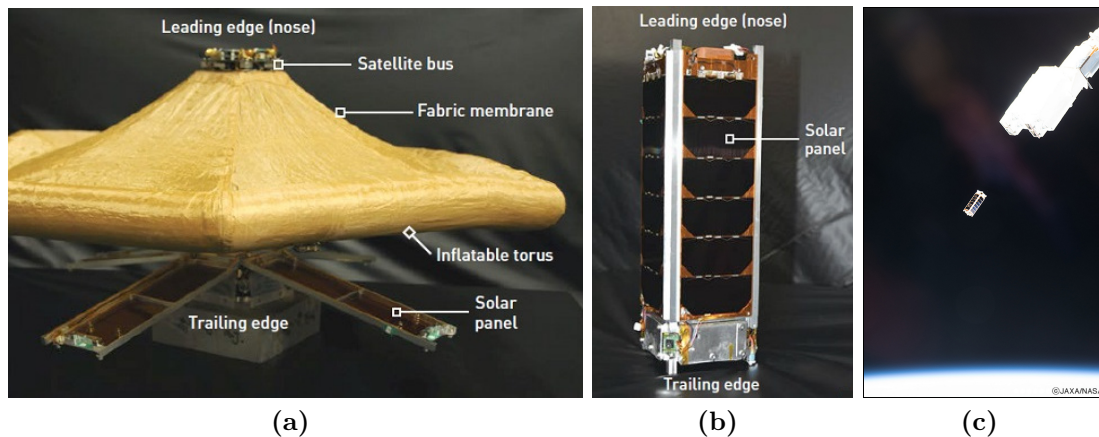


Figura 2.9: Nano satélite de reentrada EGG de la JAXA. **(a)** Aeroshell desplegado y expandido. **(b)** Estructura tipo CubeSat 3U con el aeroshell guardado. **(c)** Fotografía durante el lanzamiento de EGG desde el brazo robótico Kibo de la ISS. Fuente: JAXA.

vuelo suborbital Sounding Rocket One (SR-1) de nano-ADEPT, con el objetivo de recopilar datos de vuelo críticos para evaluar el desempeño del despliegue en el espacio y la estabilidad supersónica del vehículo. En la Figura 2.10 se presentan brevemente las distintas etapas del vuelo, e incluye fotografías de la misión. La misión demostró la capacidad del sistema para lograr una configuración completamente implementada antes de alcanzar los 80 km de altitud en el descenso, pero sufrió de inestabilidades dinámicas y comenzó a dar vueltas durante la última fase de la trayectoria de reingreso.

Es de esperar que en los próximos años aparezcan nuevos proyectos de sistemas de protección inflables y desplegables aplicados a CubeSat. Los proyectos presentados han demostrado la factibilidad del uso del desacelerador aerodinámico inflable (IAD), con misiones exitosas como IRVE II y III de NASA, o los proyectos MAAC y EGG de JAXA. A diferencia del concepto de IAD, los sistemas desplegables todavía tienen que demostrar su capacidad de reentrada desde un entorno de órbita terrestre baja y recuperarse con éxito. Como se ha podido apreciar en esta revisión bibliográfica, los IAD tienen un potencial enorme para ser una alternativa de solución al problema de la basura espacial, ya sea por medio de la implementación de sistemas simples de desorbitación o con sistemas más complejos de reentrada y recuperación. Para su aplicación es CubeSat, es necesario realizar una serie de investigaciones como son el análisis de las trayectorias durante el decaimiento orbital y la reentrada, determinación de cargas aerotérmicas

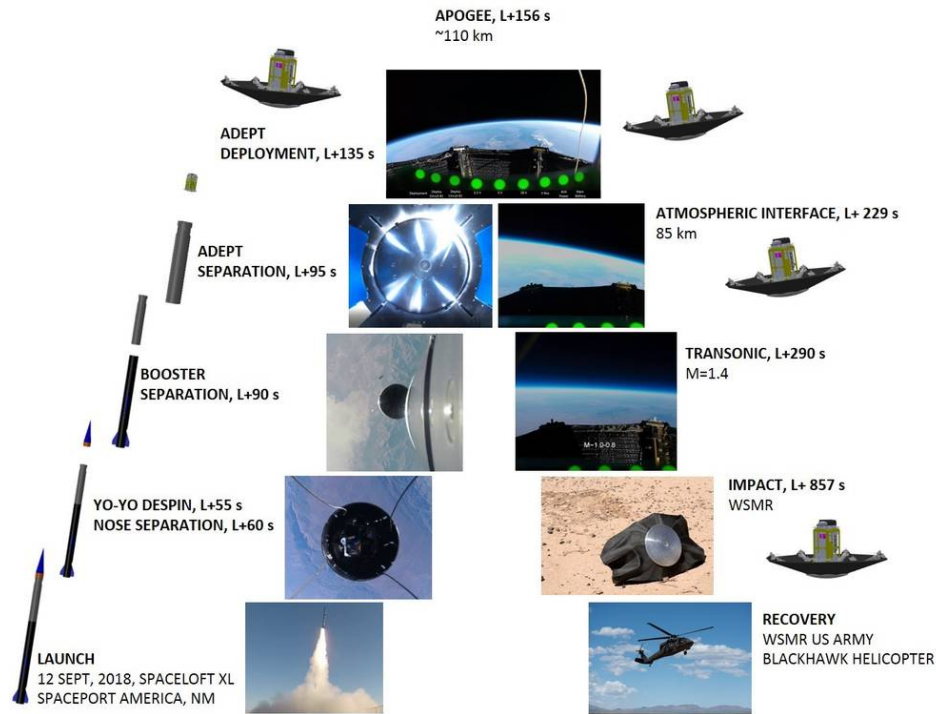


Figura 2.10: Etapas del vuelo de prueba de nano-ADEPT, SR-1. Fuente: NASA.

y de los flujos sobre el vehículo espacial, el impacto sobre la estructura y los materiales seleccionados, entre muchos otros estudios. Como se mostró en los casos presentados, esto se puede abordar de diferentes maneras. Las investigaciones más sofisticadas contemplan directamente la determinación de trayectorias y propiedades del vuelo por medio de la realización de vuelos orbitales. Estos han sido desarrollados por agencias espaciales, como el experimento EGG de JAXA, que consistió en lanzar directamente el CubeSat desde la estación espacial internacional, y los casos IRVE II y III de NASA, que consistieron en el lanzamiento de los vehículos espaciales abordo de cohetes con capacidad de alcance orbital. Tanto para EGG como IRVE se hicieron mediciones durante el vuelo orbital y de reentrada, además de pruebas de trayectoria y control de actitud. Pese a que los vuelos orbitales pueden parecer suficientes para obtener la información necesaria para el desarrollo de este tipo de proyectos, por si solos no son suficientes, dado que las mediciones durante la reentrada son difíciles de implementar y solo pueden realizarse en posiciones puntuales.

Otras investigaciones han considerado pruebas de vuelo suborbitales, como son los casos exitosos MAAC de JAXA y nano-ADEPT de NASA. A diferencia de las

pruebas de vuelo orbitales, las pruebas suborbitales no logran reproducir las condiciones reales propias de una reentrada atmosférica de un vehículo en órbita. Estas condiciones incluyen el período de desorbitación y el vuelo en régimen hipersónico y altamente enrarecido, que influye en los niveles de desaceleración alcanzados producto del despliegue del escudo térmico a gran altitud, y por consiguiente, la determinación correcta de las tasas de calentamiento, fuerzas aerodinámicas y estructura del flujo a diferentes altitudes.

Como complemento a los tipos de investigaciones presentadas, los estudios de laboratorio suelen intentar reproducir las condiciones de vuelo orbital y reentrada, por medio de experimentos desarrollados en túneles de viento de baja densidad e hipersónicos. Es el caso de los experimentos desarrollados para los proyectos IRENE y MINI-IRENE en el túnel de viento de plasma SCIROCCO de CIRA y el túnel de viento hipersónico SPES, o experimentos con nano-ADEPT de NASA en forma previa a la realización de su vuelo suborbital. Este tipo de estudios permite determinar propiedades sobre la superficie de la nave espacial y de la estructura del flujo, por lo que es una buena alternativa a vuelos suborbitales y un buen complemento a vuelos orbitales. Sin embargo, túneles de viento de estas características se encuentran presentes solo en algunos centros de investigación aeroespacial.

Otro tipo de enfoques basados en estudios analíticos permiten realizar estimaciones de la trayectoria durante el decaimiento orbital y la reentrada, por medio de modelos dinámicos y la resolución de las ecuaciones del movimiento del vehículo espacial. Además, las formulaciones analíticas como la fórmula de Tauber, permiten obtener una aproximación del flujo de calor en el punto de estancamiento. Para estos análisis se suelen considerar constantes los coeficientes de arrastre y de presión. Los estudios conceptuales de sistemas desplegables para CubeSat propuestos por la Universidad de Nápoles fueron abordados de esta forma, al igual que los proyectos de vuelo orbital y suborbital, que estimaron trayectorias utilizando estas técnicas. Si bien este tipo de análisis son útiles en una etapa temprana del estudio de viabilidad de un proyecto aeroespacial, resultan ser bastante aproximados y sin un nivel importante de detalle en las propiedades aerotermodinámicas.

Por último, también es común realizar investigaciones por medio de simulaciones computacionales, buscando predecir adecuadamente el comportamiento aerotermodinámico de la nave espacial que embiste a la atmósfera. Para ello se utilizan técnicas de Computational Fluid Dynamics (CFD) para el régimen

de flujo continuo, y el método Direct Simulation Monte Carlo (DSMC) para el régimen de transición y molecular libre. Previo a los vuelos orbitales de IRVE II y III de NASA se efectuaron simulaciones computacionales haciendo uso tanto de técnicas CFD como DSMC, para posteriormente ser comparados con los resultados de vuelo. A su vez, como parte del proyecto MAAC de JAXA, se presentaron resultados de simulaciones CFD posteriores al vuelo suborbital, mientras que para el proyecto de vuelo orbital EGG se presentaron resultados DSMC a 120 km de altitud. La Universidad de Nápoles ha desarrollado simulaciones tanto DSMC como CFD de la cápsula IRENE. Las simulaciones computacionales suelen ser la forma más ampliamente empleada para resolver problemas de aerotermodinámica, dado que ofrecen gran precisión en sus resultados a la vez que son asequibles para universidades y centros de investigación de menores recursos. Las principales dificultades de su uso consisten en conseguir acceso a una supercomputadora, en el caso de que las simulaciones requieran una gran capacidad de cómputo, como suele ocurrir con simulaciones DSMC. Pese a ello, a partir de la información expuesta se demuestra la importancia que han tenido las simulaciones computacionales para el desarrollo de los diversos proyectos de reentrada y recuperación con vuelos exitosos.

Se ha mostrado que existen proyectos de IAD aplicados a CubeSat para reentrada y recuperación. Estos proyectos se encuentran en distintas etapas de desarrollo. CDRS de la Universidad de Nápoles se encuentra en etapa de diseño conceptual, EGG de JAXA se encuentra en etapa avanzada con una reentrada orbital exitosa, y DRS de Andrews Space se encuentra en etapa desconocida. Se ha podido comprobar que no existen investigaciones detalladas del comportamiento aerotermodinámico para proyectos de IAD aplicados a CubeSat. Esto implicaría contar con una descripción minuciosa de la estructura del flujo que rodea al vehículo tanto en la parte frontal como en la zona de formación de la estela, una descripción del comportamiento de la onda de choque y de la zona de expansión del flujo, y como este flujo influye en las propiedades aerodinámicas y aerotérmicas sobre la superficie. Pese a ello, se debe tener presente que cada uno de los proyectos presentados cuenta con una geometría diferente, por lo sus características aerodinámicas y aerotérmicas deben ser distintas, al igual que su actitud, estabilidad, etc. Finalmente, en esta investigación se plantea el análisis aerotermodinámico de una geometría de IAD particular, a distintas altitudes dentro del régimen de transición.

Capítulo 3

Marco Teórico

Un metro cúbico de aire al nivel del mar contiene más de 10^{25} partículas, y cada una de estas partículas experimenta alrededor de 10^{10} colisiones cada segundo. Cada una de estas partículas tiene posición, velocidad y energía interna. Estas propiedades cambian continuamente en el tiempo y el espacio a través de las colisiones. Incluso con supercomputadoras modernas, existe demasiada información como para rastrear el comportamiento de cada partícula utilizando enfoques de modelado determinista y, por lo tanto, se debe considerar un enfoque estadístico [28].

El método Direct Simulation Monte Carlo (DSMC) busca reproducir el comportamiento macroscópico de gases, por medio de la simulación y muestreo de moléculas y sus propiedades a nivel microscópico. Para ello emplea una serie de conceptos teóricos como son la energía individual de las moléculas, las funciones de distribución del comportamiento macroscópico, desde la mecánica cuántica, mecánica estadística y cinética de gases [28].

En una primera etapa, este capítulo describe los fundamentos teóricos sobre los que posteriormente, en una segunda etapa, se construye el método DSMC. Finalmente, en una tercera etapa se presenta el código computacional empleado en esta investigación, y sus principales características.

3.1 Fundamentos de Termodinámica Estadística

A medida que la temperatura de un gas diatómico o poliatómico aumenta por encima de las condiciones estándar, el modo de vibración de las moléculas se vuelve importante, absorbiendo parte de la energía que de otro modo entraría en los modos de traslación y rotación. A medida que la temperatura del gas aumenta aún más, las moléculas comienzan a disociarse e incluso a ionizarse [51].

La mecánica estadística hace uso de los estados de energía cuantificados permitidos que las partículas ocupan, para relacionar el comportamiento molecular con las propiedades macroscópicas [28].

3.1.1 Descripción microscópica de gases

Una molécula es una colección de átomos unidos por una fuerza intramolecular bastante compleja. Un modelo simple de molécula diatómica es el modelo de “pesa” (Figura 3.1), con el cual se determinan los modos de energía [51], como sigue:

- (a) Energía de traslación (ϵ'_{tr}): La fuente de esta energía es la energía cinética de traslación del centro de masa de la molécula [51]. Considerando una partícula de masa m en movimiento dentro de un cubo de lado L en ausencia de fuerzas de campo, se tiene

$$\epsilon'_{tr} = \frac{h^2}{8mL^2}(n_1^2 + n_2^2 + n_3^2) \quad (3.1)$$

donde h denota la constante de Planck ($h = 6.626 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$), $\hbar = h/2\pi$, y los enteros $\{n_1, n_2, n_3\}$ son los números cuánticos de traslación en las direcciones x , y , z , respectivamente, y son todos mayores que cero ($n_i = 1, 2, 3, \dots$) [28].

- (b) Energía de rotación (ϵ'_{rot}): La fuente de esta energía es la energía cinética rotacional asociada con la velocidad rotacional de la molécula y su momento de inercia. La energía cinética de rotación con respecto al eje z es despreciable en moléculas diatómicas y poliatómica lineal [51].

Se considera el modelo de “rotor rígido”, en el cual los dos átomos están separados por una distancia de equilibrio fija, r_e . Basándose en esto, la energía rotacional equivale a

$$\epsilon'_{rot} = \frac{\hbar^2}{2\mu r_e^2} J(J+1) \quad (3.2)$$

donde $J = 0, 1, \dots$, es el número cuántico rotacional y μ es la masa reducida [28].

- (c) Energía de vibración (ϵ'_{vib}): Hay dos fuentes, la energía cinética del movimiento lineal de los átomos, y la energía potencial asociada con la fuerza intramolecular [51]. Para una molécula diatómica, se utiliza un modelo de oscilador armónico para el potencial, es decir, $V(r) = \frac{k(r-r_e)^2}{2}$, donde k es la constante de resorte, $k = 4\pi^2\mu\nu^2$, con ν la frecuencia de oscilación. Así, se obtiene la expresión

$$\epsilon'_{vib} = \left(v + \frac{1}{2}\right) h\nu \quad (3.3)$$

donde $v = 0, 1, 2, \dots$, es el número cuántico vibracional [28].

- (d) Energía electrónica (ϵ'_{el}): Hay dos fuentes de energía electrónica asociadas con cada electrón, energía cinética debido a su movimiento de traslación a lo largo de su órbita alrededor del núcleo, y energía potencial debido a su ubicación en el campo de fuerza electromagnética establecido principalmente por el núcleo [51]. Más que una ecuación que defina ϵ_{el} , se suelen utilizar datos espectroscópicos para definir los niveles de energía electrónica [28].

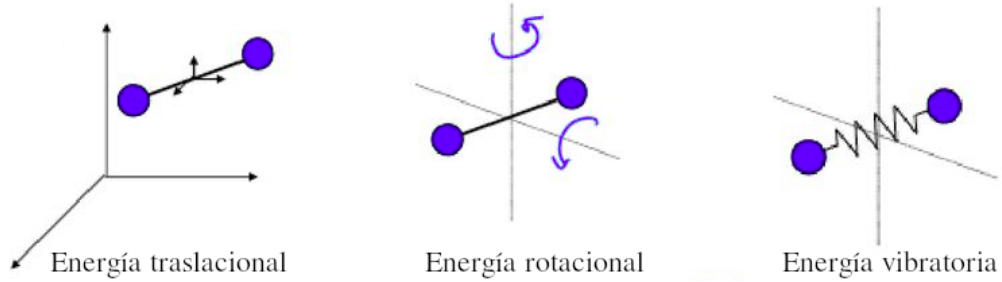


Figura 3.1: Modelos de los modos de energía molecular.

Por tanto, la energía total de una molécula es

$$\epsilon' = \epsilon'_{tr} + \epsilon'_{rot} + \epsilon'_{vib} + \epsilon'_{el} \quad (3.4)$$

y se puede expresar como la suma de la energía por sobre el nivel fundamental ϵ , más la energía de los modos fundamentales ϵ_0 :

$$\epsilon' = \epsilon + \epsilon_0 = (\epsilon_{tr} + \epsilon_{rot} + \epsilon_{vib} + \epsilon_{el}) + (\epsilon_{tr,0} + \epsilon_{vib,0} + \epsilon_{el,0}) \quad (3.5)$$

donde el nivel fundamental de la energía rotacional es nulo [28].

3.1.2 Distribución de estados energéticos

Considere un sistema que consta de N moléculas idénticas, y la energía total del sistema es E . Sea N_j el número de moléculas en un nivel de energía dado ϵ'_j . El valor N_j se define como la población del nivel de energía, tal que

$$N = \sum_j N_j \quad (3.6)$$

con j cada uno de los niveles de energía. Por su parte, la energía total del sistema E equivale a

$$E = \sum_j \epsilon'_j N_j \quad (3.7)$$

Para cualquier nivel de energía dado ϵ'_j , puede haber varios estados diferentes que tienen la misma energía. Este número de estados se denomina degeneración del nivel dado, y se denota por g_j [51].

En un instante en el tiempo el sistema de moléculas (definido por N y E) tiene un conjunto de niveles de energía, cada uno con un N_j dado. A esto se le conoce como macroestado, y corresponde a una cierta distribución de población sobre los niveles de energía. El macroestado puede estar formado por diferentes formas en las que las N partículas se pueden distribuir entre sus estados de energía cuánticos permisibles sin cambiar E . Cada combinación de partículas que satisface esta condición es un microestado del sistema [28].

Durante un período de tiempo, un macroestado particular, es decir, una cierta distribución de los N_j 's, ocurrirá con mucha más frecuencia que cualquier otra. Este macroestado se denomina macroestado más probable, y es aquel que se produce cuando el sistema está en equilibrio termodinámico. Una suposición central de la termodinámica estadística es que cada microestado de un sistema ocurre con la misma probabilidad. Bajo este supuesto, el macroestado más probable es el macroestado que tiene el número máximo de microestados [51].

A partir de un análisis estadístico se puede demostrar que la distribución más probable de partículas sobre los niveles de energía ϵ'_j , denotada como N_j^* , corresponde a

$$N_j^* = \frac{g_j}{e^{\alpha} e^{\beta \epsilon'_j} \mp 1} \quad (3.8)$$

donde el resultado con signo $(-)$ en el denominador corresponde al de bosones, mientras que el signo $(+)$ es para fermiones. Es decir, el conjunto de valores $\{N_0^*, N_1^*, N_2^*, \dots, N_j^*\}$ obtenidos de la ecuación 3.8 para todos los niveles de energía es el macroestado más probable [51].

El caso límite: Distribución de Boltzmann

A temperaturas muy bajas (menos de 5 K), las moléculas del sistema se juntan cerca de los niveles de energía fundamentales y, por lo tanto, los estados degenerados de estos niveles bajos están muy poblados. Por el contrario, a temperaturas más altas, las moléculas del sistema se distribuyen en muchos niveles de energía y, en consecuencia, los estados generalmente están escasamente poblados, es decir, el número de estados de energía es mucho mayor que el número de partículas que contienen ($g_j \gg N_j$). Para este caso, el denominador de la ecuación 3.8 debe ser muy grande y, por tanto,

$$N_j^* = g_j e^{-\alpha} e^{-\beta \epsilon'_j} \quad (3.9)$$

Este caso límite se denomina límite de Boltzmann y la ecuación 3.9 se denomina distribución de Boltzmann [51]. Determinando las constantes α y β , y sabiendo que $\epsilon'_j = \epsilon_j + \epsilon_0$, se tiene que

$$N_j^* = N \frac{g_j e^{-\epsilon_j/kT}}{Q} \quad (3.10)$$

donde k es la constante de Boltzmann y equivale a $1.38 \times 10^{-23} \text{ J/K}$, T es la temperatura del sistema, y Q es la función de partición que se define como

$$Q = \sum_j g_j e^{-\epsilon_j/kT} \quad (3.11)$$

La ecuación 3.10 nos dice cuántas moléculas o átomos, N_j^* , hay en cada nivel de energía ϵ_j cuando el sistema está en equilibrio termodinámico [51].

Se puede demostrar que

$$Q = Q_{tr} \times Q_{rot} \times Q_{vib} \times Q_{el} \quad (3.12)$$

Por lo que para evaluar Q se reemplazan las expresiones de los niveles de energía,

dadas por las ecuaciones 3.1 a 3.3. Primero, se considera Q_{tr} :

$$Q_{tr} = \sum_i (g_{tr})_i \exp \left[-\frac{(\epsilon_{tr})_i}{kT} \right] = \sum_j \exp \left[-\frac{(\epsilon_{tr})_j}{kT} \right] \quad (3.13)$$

donde la primera suma es sobre los niveles de energía, cada uno con g_i estados, mientras que la segunda suma es sobre todos los estados de energía. Debido a los estrechos espacios entre las energías de traslación, la expresión es casi continua y las sumatorias se pueden reemplazar por integrales sobre los números cuánticos de traslación. Con ello, la función de partición traslacional equivale a

$$Q_{tr} = V \left(\frac{2\pi m k T}{h^2} \right)^{3/2} \quad (3.14)$$

De igual forma, la función de partición rotacional corresponde a

$$Q_{rot} = \frac{T}{\theta_{rot}} \quad (3.15)$$

donde $\theta_{rot} = \frac{8\pi^2 I k}{h^2}$ es la temperatura característica rotacional [51, 52].

Para evaluar la función de partición vibratoria, los resultados de la mecánica cuántica dan $g = 1$ para todos los niveles de energía de una molécula diatómica. Por lo tanto,

$$Q_{vib} = \frac{1}{1 - \exp \left(-\frac{\theta_{vib}}{T} \right)} \quad (3.16)$$

donde $\theta_{vib} = h\nu/k$ es la temperatura característica vibracional [51, 52].

Para evaluar la función de partición electrónica, no es posible una expresión de forma cerrada. Más bien, se utiliza la definición,

$$Q_{el} \equiv \sum_{l=0}^{\infty} g_l e^{-\epsilon_l/kT} = g_0 + g_1 e^{-\epsilon_1/kT} + g_2 e^{-\epsilon_2/kT} + \dots \quad (3.17)$$

donde los datos espectroscópicos para los niveles de energía electrónica ϵ_1 , ϵ_2 , etc., se insertan directamente en los términos anteriores. Por lo general, ϵ_l para los niveles de energía electrónica más altos es tan grande, que los términos más allá de los tres primeros de la sumatoria pueden pasarse por alto para $T \leq 15000$ K [51].

3.1.3 Evaluación de las propiedades termodinámicas

Las propiedades termodinámicas prácticas de un gas a alta temperatura, se pueden expresar en términos de la función de partición.

La energía interna E para un sistema en equilibrio, se puede expresar a partir de la ecuación 3.7 como

$$E = \sum_j \epsilon_j N_j^* \quad (3.18)$$

donde E se mide por encima de la energía del punto cero. Combinando la ecuación 3.18 con la distribución de Boltzmann dada por la ecuación 3.10, tenemos

$$e = RT^2 \left(\frac{\partial \ln Q}{\partial T} \right)_V \quad (3.19)$$

donde se ha expresado la energía interna por unidad de masa $e = E/M$, con M la masa del sistema de N moléculas, y $R = k/m$ es la constante específica de los gases [28].

Reemplazando las expresiones de las funciones de partición para cada modo de energía (ecuaciones 3.14 a 3.16), se obtienen las expresiones finales para la energía de los distintos modos [52]. Así, las energías traslacional, rotacional y vibracional equivalen respectivamente a

$$e_{tr} = RT^2 \left(\frac{\partial \ln Q_{tr}}{\partial T} \right)_V = \frac{3}{2} RT \quad (3.20)$$

$$e_{rot} = RT^2 \left(\frac{\partial \ln Q_{rot}}{\partial T} \right)_V = RT \quad (3.21)$$

$$e_{vib} = RT^2 \left(\frac{\partial \ln Q_{vib}}{\partial T} \right)_V = \frac{R\theta_{vib}}{\exp\left(\frac{\theta_{vib}}{T}\right) - 1} \quad (3.22)$$

La presión p se puede obtener a partir de la definición de la energía libre de Helmholtz

$$F \equiv E - TS = -NkT \left(1 + \ln \frac{Q}{N} \right) \quad (3.23)$$

donde S es la entropía del sistema. Con esto, la presión equivale a

$$p = - \left(\frac{\partial F}{\partial V} \right)_{T,N} = NkT \left(\frac{\partial \ln Q}{\partial V} \right)_T \quad (3.24)$$

Reemplazando $Q = Q_{tr}Q_{rot}Q_{vib}Q_{el}$ se observa que solo Q_{tr} es función del volumen,

con lo que

$$p = NkT/V \quad (3.25)$$

Considerando ahora la distribución de la energía traslacional. Para un grupo de energía j con niveles de energía en el rango $\epsilon \rightarrow \epsilon + d\epsilon$, asumiendo una función de distribución continua, $f(\epsilon)$, el número de partículas en un grupo es

$$N_j^* = Nf(\epsilon)d\epsilon \quad (3.26)$$

Como se mostró en la ecuación 3.10, la distribución de energía de Boltzmann es

$$\frac{N_j^*}{N} = \frac{C_j e^{-\epsilon_j/kT}}{Q} = f(\epsilon)d\epsilon \quad (3.27)$$

donde el número de estados de energía de traslación en un grupo es

$$C_j = \frac{d\Gamma}{d\epsilon} d\epsilon = 2\pi \frac{V}{h^3} (2m)^{3/2} \epsilon^{1/2} d\epsilon \quad (3.28)$$

Sustituyendo la ecuación 3.28 y Q_{tr} en la ecuación 3.27, se tiene

$$f(\epsilon)d\epsilon = \frac{2}{\pi^{1/2}} \exp\left(-\frac{\epsilon}{kT}\right) d\left(\frac{\epsilon}{kT}\right) \quad (3.29)$$

Esta es la distribución continua de energía en equilibrio para tres grados de libertad. El resultado correspondiente para ζ grados de libertad es

$$f_s(\epsilon)d\epsilon = \frac{1}{\Gamma(\zeta/2)} \left(\frac{\epsilon}{kT}\right)^{\frac{\zeta}{2}-1} \exp\left(-\frac{\epsilon}{kT}\right) d\left(\frac{\epsilon}{kT}\right) \quad (3.30)$$

Sustituyendo $\epsilon = \frac{1}{2}mC^2$ en la ecuación 3.29, se obtiene la distribución de velocidad de Maxwell:

$$\chi(C)dC = 4\pi \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2} C^2 \exp\left(-\frac{mC^2}{2kT}\right) dC \quad (3.31)$$

La característica definitoria de un flujo fuera de equilibrio es la desviación local (dentro de un pequeño volumen de gas) de las funciones de distribución de equilibrio de Maxwell-Boltzmann para la velocidad molecular y la energía interna [28].

3.2 Fundamentos de la Teórica Cinética de Gases

Considerando el caso simple de un gas en reposo. A nivel macroscópico todas las propiedades del gas, como la densidad, presión y temperatura, son constantes. Sin embargo, a nivel molecular existe una gran actividad con partículas que se mueven individualmente a una velocidad relativamente alta y sufren colisiones con otras partículas. El objetivo principal de la teoría cinética es relacionar el comportamiento a nivel molecular con la dinámica macroscópica de los gases [28]. A continuación se detallan conceptos y definiciones para conseguir este objetivo.

3.2.1 Modelo de partículas

Cada partícula (átomos y moléculas) tiene masa (alrededor de 10^{-26} a 10^{-25} kg), tamaño (en torno a 10^{-10} m), posición, velocidad y energía interna. La masa de una partícula es simplemente la suma de las masas de sus átomos constituyentes, la posición es la ubicación del centro de masa de los átomos constituyentes y la velocidad es la velocidad del centro de masa de esos átomos. Para las moléculas, el movimiento atómico relativo al centro de masa (es decir, rotación y vibración) contribuye a la energía interna de la partícula [28].

Considerando un gas simple, o sea uno en que todas las partículas que lo componen son de la misma especie. En colisiones reales, las partículas interactúan a través del campo que se forma como resultado de las fuerzas electrostáticas de Coulomb que actúan entre las cargas elementales, los protones y electrones, de los cuerpos que interactúan. La energía potencial que actúa entre dos partículas es función de su distancia de separación. A grandes distancias de separación hay una fuerza de atracción débil que acerca las partículas, y a pequeñas distancias de separación existen fuertes fuerzas repulsivas que separan las partículas. Las fuerzas débiles de atracción son importantes solo a temperaturas de gas muy bajas, por lo que puede ignorarse. Así, se presentan dos modelos para el campo potencial [28].

(i) Modelo de esfera dura o elástica rígida

Asume que la dinámica de las partículas se asemeja a la de dos bolas de billar chocando, o sea que la colisión ocurre cuando la superficie de una partícula está en contacto con la superficie de otra. Por tanto, la función de potencial

interatómico es

$$\Psi(r) = \begin{cases} 0 & \text{si } r > d \\ +\infty & \text{si } r \leq d \end{cases} \quad (3.32)$$

donde r es la distancia de aproximación durante la colisión y $d = \frac{d_1+d_2}{2}$ con d_1 y d_2 los diámetros de cada partícula (Figura 3.2a) [27].

(ii) Ley de potencias inversas

Busca mejorar el supuesto del modelo anterior, representando mejor la parte repulsiva del potencial real utilizando un potencial de ley de potencia inversa

$$\Psi(r) = \frac{a}{r^{\eta-1}} = \frac{a}{r^\alpha} \quad (3.33)$$

con $\alpha \equiv \eta - 1$, lo que resulta en una fuerza interatómica

$$F(r) = -\frac{d}{dr} \left(\frac{a}{r^{\eta-1}} \right) \propto -\frac{1}{r^\eta} \quad (3.34)$$

Los parámetros a y η se puede determinar mediante comparaciones con mediciones de viscosidad [27].

3.2.2 Colisiones moleculares

Las colisiones proporcionan el mecanismo físico que empuja un gas hacia el equilibrio. Un número insuficiente de colisiones conduce al desequilibrio. Considerando un gas diluido, caracterizado por un gran espacio molecular medio δ (distancia media de separación entre las moléculas del gas) en comparación con el tamaño molecular d_i (la extensión de sus fuerzas interatómicas), las colisiones intermoleculares son predominantemente de naturaleza binaria [28].

Considerando una colisión binaria de partículas de esfera dura con diámetros d_1 y d_2 . Por tanto, la colisión ocurre siempre que la distancia a lo largo de la línea que une los centros de las dos partículas sea igual a $d = \frac{d_1+d_2}{2}$. La sección transversal de colisión equivale a

$$\sigma = \pi d^2 \quad (3.35)$$

como se observa en la Figura 3.2a. Durante una fracción de tiempo Δt , una colisión se produce siempre que las moléculas se encuentren dentro del volumen

generado por la sección transversal de colisión multiplicado por $g\Delta t$, donde g es la velocidad relativa entre las moléculas, como se observa en la Figura 3.2b [27].

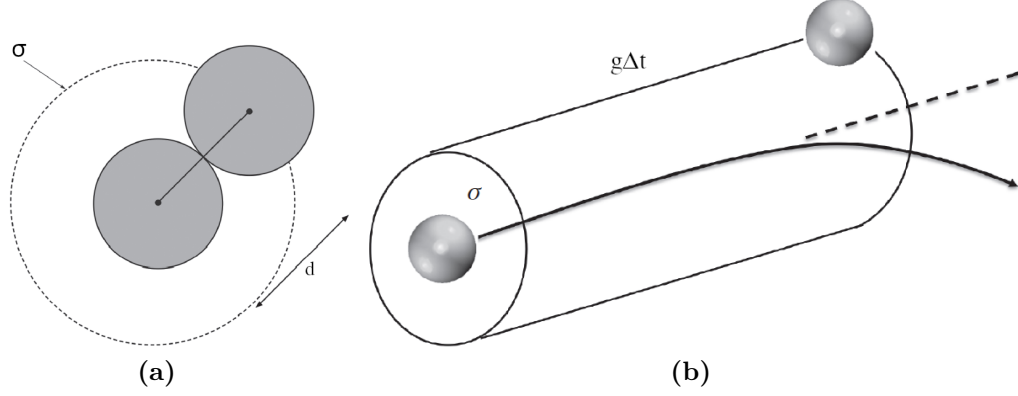


Figura 3.2: (a) Sección transversal de colisión, y (b) Volumen barrido durante la interacción de dos moléculas [28].

Otras definiciones importantes son: el recorrido libre medio (λ), que corresponde a la distancia promedio recorrida por cada partícula entre colisiones sucesivas. Por su parte, la frecuencia de colisión (ϕ) es el número de colisiones por unidad de tiempo experimentadas por cada partícula.

A continuación se analiza la colisión entre una partícula de prueba de velocidad \vec{C} y masa m_1 con alguna otra partícula con velocidad \vec{Z} y masa m_2 que, luego de colisionar, cambian las velocidades de cada una a \vec{C}' y \vec{Z}' . Dado que tanto el momento lineal como la energía se conservan, se puede demostrar que las velocidades previas a la colisión equivalen a

$$\vec{C} = \vec{W} + \frac{m_2}{m_1 + m_2} \vec{g} \quad \vec{Z} = \vec{W} - \frac{m_1}{m_1 + m_2} \vec{g} \quad (3.36)$$

mientras que las velocidades posteriores a la colisión corresponden a

$$\vec{C}' = \vec{W} + \frac{m_2}{m_1 + m_2} \vec{g}' \quad \vec{Z}' = \vec{W} - \frac{m_1}{m_1 + m_2} \vec{g}' \quad (3.37)$$

donde \vec{W} es la velocidad del centro de masa de las dos partículas, y \vec{g} es la velocidad relativa entre las partículas, dada por $\vec{g} = \vec{C} - \vec{Z}$. Con estas expresiones y de la conservación de la energía, es posible demostrar que la magnitud de velocidad

relativa no cambia con la colisión, es decir,

$$g = g' \quad (3.38)$$

La dinámica de una colisión se puede observar de tres maneras diferentes, desde el marco de referencia del laboratorio, desde el del centro de masa y desde el de la velocidad relativa. Por lo general, se analizan las colisiones en el marco de referencia de la velocidad relativa (Figura 3.3a), en el que la colisión de la partícula de prueba se modela como una partícula que se mueve a una velocidad $\vec{C} = \vec{g}$ en un campo de partículas estacionarias (con $\vec{Z} = \vec{0}$) [27].

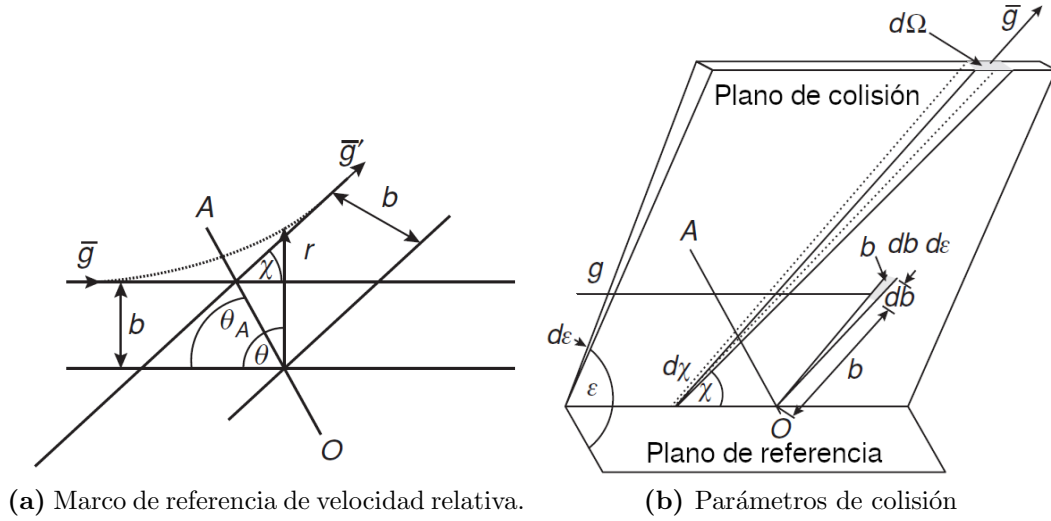


Figura 3.3: Dispersión de partículas en una colisión intermolecular [27].

En la Figura 3.3b se muestran los parámetros de colisión. El parámetro de impacto b corresponde a la distancia de aproximación más cercana de las trayectorias no perturbadas. El ángulo entre el plano de colisión y un plano de referencia se define como ε . Ahora, considerando el plano normal a \vec{g} y que contiene O , se define la sección transversal diferencial como

$$\sigma d\Omega \equiv b \cdot db \cdot d\varepsilon \quad (3.39)$$

donde $d\Omega$ es la unidad de ángulo sólido sobre \vec{g} y la sección transversal de colisión total se define como

$$\sigma_T = \int_0^{4\pi} \sigma d\Omega \quad (3.40)$$

A partir de estas definiciones se puede derivar el término de colisión de la ecuación de Boltzmann (lado derecho de la igualdad en la ecuación 3.43).

En análisis anteriores de colisiones para esferas duras, la sección transversal de colisión estaba definida por $\sigma = \pi d^2$. Las colisiones reales involucran consideraciones de ángulo sólido y se requieren dos variables [27]. Esto se aborda en la sección 3.2.4.

3.2.3 Función de distribución de velocidad y ecuación de Boltzmann

La función de distribución de velocidad (VDF) normalizada es la función de densidad de probabilidad de encontrar una partícula dentro de un rango pequeño de velocidades. Considerando la velocidad de una partícula $\vec{C} = (C_1, C_2, C_3)$ y definiendo un pequeño volumen en el espacio de velocidad $d\vec{C} = (dC_1, dC_2, dC_3)$, tal que todas las partículas con velocidades en el rango $(C_1, C_2, C_3) \rightarrow (C_1 + dC_1, C_2 + dC_2, C_3 + dC_3)$ se encuentran dentro de este volumen. Así, el número de partículas dentro de $d\vec{C}$ equivale a

$$dN \equiv F(\vec{C})d\vec{C} = Nf(\vec{C})d\vec{C} \quad (3.41)$$

donde $F(\vec{C})$ es el VDF, $f(\vec{C}) \equiv F(\vec{C})/N$ es el VDF normalizado con respecto a N , que es el número de partículas en el gas.

La VDF para el espacio de fase, que involucra el número de partículas que se encuentran simultáneamente en una región del espacio de velocidad ($\vec{C} \rightarrow \vec{C} + d\vec{C}$) y en el espacio físico ($\vec{r} \rightarrow \vec{r} + d\vec{r}$), corresponde a

$$dN = nf(\vec{C})d\vec{C}d\vec{r} \quad (3.42)$$

donde n es la concentración molecular [27, 28].

Del análisis de la ecuación 3.42 y de las expresiones de colisiones moleculares, se puede derivar la ecuación de Boltzmann:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(nf)}{\partial t} + \vec{C} \cdot \frac{\partial(nf)}{\partial \vec{r}} + \vec{a} \cdot \frac{\partial(nf)}{\partial \vec{C}} \\ = \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{4\pi} n^2 \{f(\vec{C}')f(\vec{Z}') - f(\vec{C})f(\vec{Z})\} g\sigma d\Omega d\vec{Z} \end{aligned} \quad (3.43)$$

Esta ecuación gobierna la dinámica de gases diluidos [28]. Si se considera un elemento del espacio de fase $d\vec{C}d\vec{r}$ que no cambia de forma ni de tamaño con el tiempo, la ecuación de Boltzmann está compuesta por los siguientes términos (en orden de izquierda a derecha):

1. La tasa de cambio del número de partículas N en el interior de $d\vec{C}d\vec{r}$.
2. La tasa de convección a través de $d\vec{r}$ debido al movimiento de las partículas a velocidad \vec{C} .
3. La tasa de convección a través de $d\vec{C}$ debido a la aceleración de partículas \vec{a} causada por una fuerza externa.
4. Término de colisión, formado por colisiones intermoleculares que cambian las velocidades de las partículas y, por lo tanto, dispersan partículas dentro y fuera de $d\vec{C}$.

La naturaleza integral-diferencial de la ecuación de Boltzmann hace que sea difícil de resolver analíticamente, e incluso computacionalmente representa un desafío. Pese a ello, se puede usar fácilmente para encontrar una condición de equilibrio [27, 28].

Propiedades en el equilibrio

En el equilibrio no existe variación en el VDF en tiempo o espacio, lo que significa que el lado izquierdo de la ecuación 3.43 debe ser cero y, por tanto, el término de colisión también debe serlo. Esto implica que

$$f(\vec{C}')f(\vec{Z}') = f(\vec{C})f(\vec{Z}) \quad (3.44)$$

Por lo tanto, en el equilibrio, la tasa de colisiones que eliminan partículas con velocidad \vec{C} , está exactamente balanceada por la tasa de las colisiones inversas que crean partículas con velocidad \vec{C} . La ecuación 3.44 puede escribirse como

$$\ln |f(\vec{C}')| + \ln |f(\vec{Z}')| = \ln |f(\vec{C})| + \ln |f(\vec{Z})| \quad (3.45)$$

La masa, el momento y la energía cinética son propiedades que no cambian como resultado de una colisión. Por lo tanto, se escoge la siguiente forma general para la

solución de la ecuación 3.45 basado en una combinación lineal de estas propiedades de partículas:

$$\ln |f(\vec{C})| = a_0 m + m(a_1 C_1 + a_2 C_2 + a_3 C_3) + a_4 \frac{m}{2} (C_1^2 + C_2^2 + C_3^2) \quad (3.46)$$

donde a_i son constantes arbitrarias. Esta expresión se puede reescribir como

$$f(\vec{C}) = A \exp \left\{ -\beta \frac{m}{2} [(C_1 - \alpha_1)^2 + (C_2 - \alpha_2)^2 + (C_3 - \alpha_3)^2] \right\} \quad (3.47)$$

donde A , β , α_1 , α_2 y α_3 son contantes. Una vez determinadas las constantes, el resultado final para la VDF de Maxwell para un gas con un vector de velocidad de flujo neto de $\vec{u} = (u_1, u_2, u_3)$, es

$$f(\vec{C}) d\vec{C} = \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} \exp \left\{ -\frac{m}{2kT} [(C_1 - u_1)^2 + (C_2 - u_2)^2 + (C_3 - u_3)^2] \right\} d\vec{C} \quad (3.48)$$

Por tanto, una temperatura más alta produce un VDF más amplio y plano y, por el contrario, una temperatura más baja produce un VDF más estrecho y puntiagudo [28].

Considerando ahora la distribución de la rapidez ($C = |\vec{C}|$) [52]. A partir del VDF de Maxwell para un gas en reposo, se obtiene

$$\chi(C) dC = 4\pi \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} C^2 \exp \left[-\frac{mC^2}{2kT} \right] dC \quad (3.49)$$

que coincide con el resultado obtenido por la mecánica estadística 3.31.

La rapidez más probable C_{mp} se obtiene buscando el máximo de χ por diferenciación, mientras que la rapidez promedio $\langle C \rangle$ se obtiene tomando el primer momento de la distribución:

$$C_{mp} = \sqrt{\frac{2kT}{m}} \quad (3.50)$$

$$\langle C \rangle = \sqrt{\frac{8kT}{\pi m}} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} C_{mp} \quad (3.51)$$

y la raíz cuadrática media de la rapidez $\sqrt{\langle C^2 \rangle}$ se obtiene como

$$\sqrt{\langle C^2 \rangle} = \sqrt{\frac{3kT}{m}} = \sqrt{\frac{3}{2}} C_{mp} \quad (3.52)$$

Sea un gas en equilibrio térmico, con sección transversal de colisión del modelo esfera dura. La tasa de colisión por unidad de volumen de gas entre partículas de la especie A a velocidad \vec{C} y partículas de la especie B a velocidad \vec{Z} , tal que la velocidad relativa corresponde a $\vec{g} \equiv \vec{C} - \vec{Z}$, es

$$\nu_{AB} = \frac{1}{1 + \delta_{AB}} n_A n_B \sigma_{AB} \sqrt{\frac{8kT}{\pi m_{AB}^*}} \quad (3.53)$$

donde $\delta_{AB} = 1$ cuando $A = B$ (gas simple) y $\delta_{AB} = 0$ cuando $A \neq B$. Por otra parte, el recorrido libre medio de la especie A en una mezcla general de gases en condiciones de equilibrio térmico, equivale a

$$\lambda_A = \left(\sum_{i=1}^{N_s} n_i \sigma_{Ai} \sqrt{1 + \frac{m_A}{m_i}} \right)^{-1} \quad (3.54)$$

Para el caso de un gas simple $N_s = 1$, con lo que $\lambda = \frac{1}{\sqrt{2}n\sigma}$ [27, 28].

3.2.4 Análisis de Chapman-Enskog

Chapman y Enskog (1952) determinaron la función de distribución de velocidad que reduce la ecuación de Boltzmann a las ecuaciones de Navier-Stokes en el límite cercano al equilibrio. A partir de ello, Chapman y Enskog obtuvieron expresiones para el tensor de esfuerzo cortante y el vector de flujo de calor, cuyas formas son idénticas a las obtenidas de las ecuaciones de Navier-Stokes, pero con coeficientes de viscosidad, conductividad térmica y difusividad que dependen de parámetros moleculares. Con esto, el análisis de Chapman-Enskog proporciona una conexión matemática rigurosa entre la ecuación de Boltzmann (descripción molecular) y las ecuaciones de Navier-Stokes (descripción continua), y se asegura que las soluciones de las ecuaciones de Boltzmann y Navier-Stokes sean consistentes en el límite del flujo cercano al equilibrio. Además, permite establecer límites cuantitativos en la precisión de los modelos de transporte Newtoniano y de Fourier y, por lo tanto, en la precisión de las ecuaciones de Navier-Stokes para flujos fuera del equilibrio. El detalle de este análisis se puede encontrar en Chapman and Cowling (1970) [31], o en Vincenti and Kruger (1967) [53].

El análisis Chapman-Enskog aplicado a una mezcla de gases entrega las siguientes expresiones para los coeficientes de viscosidad binario μ_{ij} y de difusión

binario D_{ij} , específicos para cada par de especies (i, j) ,

$$\mu_{ij} = \frac{\frac{5}{8}\sqrt{2\pi m_r kT}}{\left(\frac{m_r}{2kT}\right)^4 \int_0^\infty g^7 \sigma_\mu \exp(-m_r g^2/2kT) dg} \quad (3.55)$$

$$D_{ij} = \frac{\frac{3}{16}\sqrt{2\pi kT/m_r}}{\left(\frac{m_r}{2kT}\right)^3 n \int_0^\infty g^5 \sigma_M \exp(-m_r g^2/2kT) dg} \quad (3.56)$$

donde m_r es la masa reducida de cada par de especies, $m_r = (m_i m_j)/(m_i + m_j)$, y σ_μ y σ_M son denominados como sección transversal de viscosidad y sección transversal de momento, respectivamente, y equivalen a

$$\sigma_\mu = \int_0^{4\pi} \sin^2 \chi \sigma d\Omega \quad (3.57)$$

$$\sigma_M = \int_0^{4\pi} (1 - \cos \chi) \sigma d\Omega \quad (3.58)$$

donde χ es el ángulo de dispersión de una colisión definido en el marco de referencia de la velocidad relativa (Figura 3.3a), y es una función del parámetro de impacto, la velocidad relativa y el potencial interatómico, $\chi = \chi(b, g, \Psi)$. Por su parte, $\sigma d\Omega$ es la sección transversal diferencial, definida por la ecuación 3.39, y representa la probabilidad de que una molécula involucrada en una colisión se disperse en un elemento de ángulo sólido específico $d\Omega$ (Figura 3.3b) [28].

Los coeficientes de mezcla se obtienen mediante promedios bien definidos de los coeficientes binarios. Cada sección transversal de colisión, coeficiente de transporte binario y velocidad relativa, son específicos de un par de colisión que involucran a las especies i y j .

La superficie de energía potencial (PES) Ψ que gobierna las fuerzas interatómicas es lo que determina el ángulo de dispersión de colisiones individuales χ . Dado que en un gas diluido los parámetros de impacto y las orientaciones previas a la colisión de las moléculas son completamente aleatorias, no es necesario modelar cada disposición de colisión posible y solo se requiere el resultado integrado, es decir, la sección transversal. La sección transversal de colisión aparece en el término de colisión en la ecuación de Boltzmann y sirve como entrada del modelo principal para el método DSMC [28].

Interacciones de esfera dura

Definir un tipo de interacción molecular conduce a valores específicos de las secciones transversales de colisión y los coeficientes de propiedad de transporte. Para una función potencial interatómica (Ψ) de esfera dura (ecuación 3.32) [27], el ángulo de dispersión de una colisión binaria está dado por

$$\chi(g, b) = \begin{cases} 2 \cos^{-1}(b/d) & \text{si } b < d \\ 0 & \text{si } b \geq d \end{cases} \quad (3.59)$$

Reemplazando $\chi(g, b)$ (ecuación 3.59) y $\sigma d\Omega \equiv b \cdot db \cdot d\varepsilon$ (ecuación 3.39), la sección transversal de la viscosidad equivale a:

$$\sigma_\mu = 2\pi \int_0^\infty \sin^2 \chi b db = \frac{2}{3} \pi d^2 = \frac{2}{3} \sigma_T \quad (3.60)$$

De igual forma, la sección transversal de la cantidad de movimiento equivale a

$$\sigma_M = 2\pi \int_0^\infty (1 - \cos \chi) b db = \pi d^2 = \sigma_T \quad (3.61)$$

Finalmente, se puede obtener el coeficiente de viscosidad para moléculas de esfera dura reemplazando $\sigma_\mu = 2/3 \pi d^2$ en la ecuación 3.55, con lo que se obtiene

$$\mu^{HS} = \frac{5}{16} \frac{1}{\pi d^2} \sqrt{2\pi m_r kT} \quad (3.62)$$

Así, el uso de un potencial interatómico de esfera dura da como resultado una sección transversal de colisión que es independiente de la velocidad relativa (g), y un coeficiente de viscosidad proporcional a \sqrt{T} . Esta dependencia de la temperatura no es precisa para la mayoría de los gases, por ejemplo, el nitrógeno y el oxígeno tienen una viscosidad con una proporcionalidad más cercana a $T^{7/10}$. Otro tipo de potenciales interatómicos pueden entregar resultados mejores, como el caso de interacciones de ley de potencia inversa, que conduce a una viscosidad con una dependencia de la temperatura determinada por el exponente de la ley de potencia α , específicamente $\mu \propto T^{1/2+2/\alpha}$ y, por tanto, la exactitud radica en el exponente, y en el modelo de sección transversal de colisión [28].

3.2.5 Cantidades macroscópicas

A partir de la descripción molecular de un gas es posible determinar propiedades macroscópicas del flujo. Se presentan relaciones para algunas de las propiedades más fundamentales [28]. Para ello se considera que cada partícula i tiene una masa m_i , una posición $\vec{r}_i = (r_1, r_2, r_3)_i$ y una velocidad $\vec{C}_i = (C_1, C_2, C_3)_i$.

(i) Densidad

Considere un pequeño volumen δV que contiene un total de N partículas. La concentración molecular es el número de partículas por unidad de volumen y viene dada por

$$n = \frac{\sum_{i=1}^N 1}{\delta V} = \frac{N}{\delta V} \quad (3.63)$$

La correspondiente densidad está dada por

$$\rho = \frac{\sum_{i=1}^N m_i}{\delta V} \quad (3.64)$$

(ii) Presión

Considerando un gas en estado de reposo dentro de un volumen V . Cada partícula i tiene una velocidad única, \vec{C}_i . Además, se realizan los siguientes supuestos:

- (a) El gas está en un estado de equilibrio térmico.
- (b) Se ignoran las colisiones entre partículas.
- (c) La interacción de las partículas con las paredes es de tipo especular.

Bajo estos supuestos, se puede derivar la siguiente expresión para la presión promedio del gas:

$$p = \frac{1}{3V} \sum_{i=1}^N m_i (C_{1i}^2 + C_{2i}^2 + C_{3i}^2) = \frac{1}{3V} \sum_{i=1}^N m_i C_i^2 \quad (3.65)$$

(iii) Energía y temperatura de traslación

La energía traslacional total del gas debido al movimiento cinético de todas

las partículas que lo componen equivale a:

$$E_{tr} = \sum_{i=1}^N (\epsilon_{tr})_i = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} m_i C_i^2 = \frac{3}{2} pV \quad (3.66)$$

donde $(\epsilon_{tr})_i$ es la energía traslacional de cada partícula i , y en la última igualdad de la ecuación 3.66 se reemplazó la ecuación 3.65. A su vez, la energía de traslación promedio por partícula, considerando un gas ideal, equivale a:

$$\langle \epsilon_{tr} \rangle = \frac{E_{tr}}{N} = \frac{3}{2} kT \quad (3.67)$$

donde k es la constante de Boltzmann. Por su parte, la energía de traslación específica es

$$e_{tr} = \frac{E_{tr}}{\sum_{i=1}^N m_i} = \frac{3}{2} RT \quad (3.68)$$

donde R es la constante de los gases ordinaria, que equivale a $R = \hat{R}/M_w$, \hat{R} es la constante universal de los gases ($8314 \text{ J/kg} \cdot \text{mol} \cdot \text{K}$) y M_w es el peso molecular [28].

A partir de estos resultados, se deriva una expresión para la temperatura de traslación del gas:

$$T = \frac{2}{3R} \frac{E_{tr}}{M} = \frac{2}{3R} \frac{\sum_{i=1}^N \frac{1}{2} m_i C_i^2}{\sum_{i=1}^N m_i} = \frac{\langle C^2 \rangle}{3R} \quad (3.69)$$

(iv) **Velocidad**

El vector de velocidad promedio del gas o velocidad de flujo, equivale a:

$$\vec{u} = \langle \vec{C} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \vec{C}_i \quad (3.70)$$

Por su parte, la velocidad cuadrática media se obtiene directamente de la ecuación 3.69:

$$\langle C^2 \rangle = 3RT \quad (3.71)$$

En términos de su movimiento de traslación, la teoría cinética no requiere considerar los modos de energía internos, por lo que todas las relaciones proporcionadas en esta sección se aplican igualmente bien a átomos y moléculas [28].

3.3 Procesos de tasa finita

Cuando las partículas chocan, pueden resultar en una variedad de procesos intermoleculares que ocurren a una tasa finita, y se puede asociar un tiempo característico (o de relajación), τ , para cada proceso individual. Estos procesos incluyen el intercambio de energía entre los modos de energía molecular, y las reacciones químicas. Dentro de los primeros se tienen los modos traslacional, rotacional, vibratorio y electrónico, con sus respectivos tiempos característicos τ_{tr} , τ_{rot} , τ_{vib} y τ_{el} . Por su parte, dentro de las reacciones químicas se encuentran los procesos de disociación e ionización, con τ_d y τ_i , respectivamente [28].

Los tiempos característicos se pueden expresar como

$$\tau_x = \tau_{tr} \times Z_x \quad (3.72)$$

donde Z_x es el número de colisión del proceso x , es decir, el número de colisiones requeridas para que el proceso x alcance el equilibrio, y $\tau_{tr} = 1/\nu$ es el recíproco de la frecuencia de colisión obtenida en la teoría cinética (ecuación 3.53).

En general, se encuentra que

$$Z_{tr} = 1 < Z_{rot} < Z_{vib} < Z_{el} < Z_d < Z_i \quad (3.73)$$

$$\Rightarrow \tau_{tr} < \tau_{rot} < \tau_{vib} < \tau_{el} < \tau_d < \tau_i \quad (3.74)$$

En un flujo de gas de alta velocidad, las propiedades del gas varían significativamente con la posición, lo que genera gradientes de campo de flujo en las propiedades macroscópicas (p , T , ρ , etc.). En cada punto de un campo de flujo, podemos definir un tiempo de flujo característico:

$$\tau_f \equiv \frac{\Delta}{u} \quad (3.75)$$

donde Δ es una escala de longitud de gradiente adimensional, por ejemplo, $\left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial s}\right)^{-1}$, con s la distancia a lo largo de una línea de corriente. Así, se puede introducir una condición de equilibrio para un proceso x :

$$\tau_x \ll \tau_f \quad (3.76)$$

En este caso, ocurrirá una gran cantidad de colisiones que contribuyen al proceso x antes de que haya cambios significativos en las propiedades del flujo, lo que permitirá que el proceso alcance el equilibrio.

El espaciamiento de energía para los modos de traslación y rotación es tan pequeño que estos modos de energía responden muy rápidamente a los cambios en las variables de estado y, por lo tanto, generalmente están en equilibrio. Normalmente, para las moléculas de aire, el número de colisión rotacional $Z_{rot} \approx 5$. En comparación, el modo vibratorio de las moléculas de aire tiene una mayor separación entre los niveles de energía, y por ende responde más lentamente a los cambios en el campo de flujo, pudiendo estar en un estado de no equilibrio [28].

El proceso por el cual la energía vibratoria cambia en una situación de no equilibrio se llama relajación vibratoria. En tales casos, el tiempo de relajación vibracional

$$\tau_{vib} \gg \tau_{tr} \quad \tau_{vib} \approx \tau_f \quad (3.77)$$

A nivel molecular, la energía vibratoria de las partículas cambia a través de la transferencia de energía entre modos durante una colisión intermolecular. A nivel macroscópico, el proceso se modela utilizando la ecuación de relajación vibratoria de Landau-Teller:

$$\frac{dE_{vib}}{dt} = \frac{E_{vib}^*(T) - E_{vib}(t)}{\tau_{vib}} = \frac{E_{vib}^*(t) - E_{vib}(t)}{\tau_{coll}Z_{vib}} \quad (3.78)$$

donde $E_{vib}^*(T)$ es la energía vibratoria de equilibrio total a la temperatura T , que se puede expresar como la energía de equilibrio instantánea $E_{vib}^*(t)$, y $E_{vib}(t)$ es la energía vibratoria total del sistema en el tiempo t . Se puede expresar una ecuación idéntica para la relajación del modo rotacional, llamada ecuación de Jeans. En la ecuación 3.78 se ha expresado τ como una función del tiempo medio de colisión τ_{coll} y el número de colisión inelástica Z , como sigue:

$$\tau = \tau_{coll}Z \quad (3.79)$$

Por lo tanto, en cálculos continuos se utilizan números de colisión inelástica rotacional y vibracional para especificar las tasas de relajación [28].

Los conceptos discutidos en esta sección son útiles en el método DSMC para formular el modelado de transferencia de la energía interna (sección 3.4.4).

3.4 Método Direct Simulation Monte Carlo

El método Direct Simulation Monte Carlo (DSMC) fue creado por Graeme Bird, profesor de ingeniería aeronáutica en la University of Sydney, Australia. Desde su primera publicación en 1963 [54], Bird ha escrito dos libros sobre el método DSMC [27, 55] y ha surgido todo un campo de investigación sobre el método DSMC y su aplicación a problemas científicos y de ingeniería. El método DSMC se ha convertido en una técnica poderosa y extendida para la simulación de gases fuera del equilibrio donde se debe tener en cuenta la naturaleza molecular del gas.

Gran parte del desarrollo del método DSMC se ha centrado en el vuelo a gran altitud, donde es un método computacional preciso y eficiente para flujos de ingeniería tridimensionales prácticos [27]. Pese a que sus aplicaciones también incluyen flujos a nivel microscópico y de baja velocidad, y flujo molecular libre, nuestro análisis se centrará en flujos hipersónicos dentro del régimen de transición.

3.4.1 Fundamentos del método DSMC

El método DSMC considera tres supuestos con los que se realizan simplificaciones en las simulaciones moleculares, los cuales son:

1. Las moléculas se mueven sin interacción durante escalas de tiempo del orden del tiempo de colisión medio local, lo que implica que la distancia de separación entre las moléculas es mucho mayor que la extensión de las fuerzas intermoleculares y, por tanto, las moléculas se mueven en línea recta a lo largo de sus vectores de velocidad del centro de masa.
2. Los parámetros de impacto y las orientaciones iniciales de las moléculas en colisión son aleatorios, o sea que no existe un sesgo de que todas las moléculas comiencen a interactuar con una cierta distancia de separación (b), o en un ángulo específico (ϵ), o en un punto específico en su órbita de rotación o período de vibración, o cualquier otro parámetro de impacto, por tanto, no requieren una simulación determinista.
3. Hay una enorme cantidad de moléculas por recorrido libre medio cúbico y solo se necesita simular una pequeña fracción para obtener una descripción molecular precisa del flujo. Se pueden obtener funciones de distribución altamente precisas y, como resultado, una descripción molecular completa

del flujo, modelando únicamente una pequeña fracción del número real de moléculas. Así, cada partícula simulada representa un gran número de moléculas reales idénticas, es decir, todas con la misma velocidad y propiedades moleculares. Esto permite modelar las colisiones entre pares de partículas simuladas con exactamente las mismas consideraciones físicas que las colisiones entre pares de moléculas reales.

Estas tres suposiciones son muy precisas para gases diluidos y, combinadas, permiten que el método DSMC simule campos de flujo en desequilibrio macroscópico producidos por el flujo alrededor de geometrías complejas [28].

Dado que el método DSMC no simula todas las moléculas reales del sistema, se pierde la naturaleza determinista del movimiento molecular y las colisiones. Una simulación DSMC no puede determinar con precisión qué moléculas reales chocan realmente y qué parámetros de impacto caracterizan las condiciones iniciales de cada colisión [28].

Las partículas simuladas se emparejan aleatoriamente para las colisiones dentro de cada celda computacional. Si las celdas fueran significativamente más grandes que el recorrido libre medio (λ), las moléculas separadas por grandes distancias podrían seleccionarse al azar para colisionar, transfiriendo masa, cantidad de movimiento y energía a lo largo de distancias físicamente pequeñas. Se produciría el mismo error si las partículas se movieran en línea recta durante intervalos de tiempo mucho mayores que el tiempo medio de colisión. Esto generaría que los gradientes de flujo pronunciados no se resuelvan con precisión y la transferencia de calor y cantidad de movimiento a las superficies también sería incorrecta. Por ello, las celdas de colisión DSMC deben tener un tamaño igual o inferior al recorrido libre medio local, y el paso de tiempo tiene que ser del orden o inferior al tiempo medio de colisión [28, 56, 57, 58, 59].

En la Figura 3.4 se representa una simulación DSMC, donde el dominio computacional se ha dividido en celdas computacionales que rodean una geometría simple. Dentro de cada celda se simulan partículas computacionales, las cuales interactúan entre ellas y con los límites del dominio, así como con la superficie de la geometría. El lado izquierdo representa una entrada de flujo, mientras que el resto de caras del dominio son límites de entrada y salida.

Algoritmo básico del método DSMC

El algoritmo central del método DSMC se puede enumerar de la siguiente manera:

1. Generar partículas en los límites de entrada del flujo.
2. Mover todas las partículas en línea recta a lo largo de sus vectores de velocidad molecular durante un paso de tiempo menor que el tiempo de colisión medio local (t_{mc}).
 - Aplicar condiciones de contorno a las partículas que chocan con una superficie.
 - Eliminar partículas que salen del dominio de simulación.
3. Realizar colisiones estocásticamente dentro de cada celda computacional, suponiendo que los parámetros de impacto para los pares de colisiones sean aleatorios.
 - El tamaño de las celdas de colisión deben ser más pequeños que el recorrido libre medio λ .
4. Muestrear las propiedades de las partículas en cada celda.
5. Regresar al paso (1).

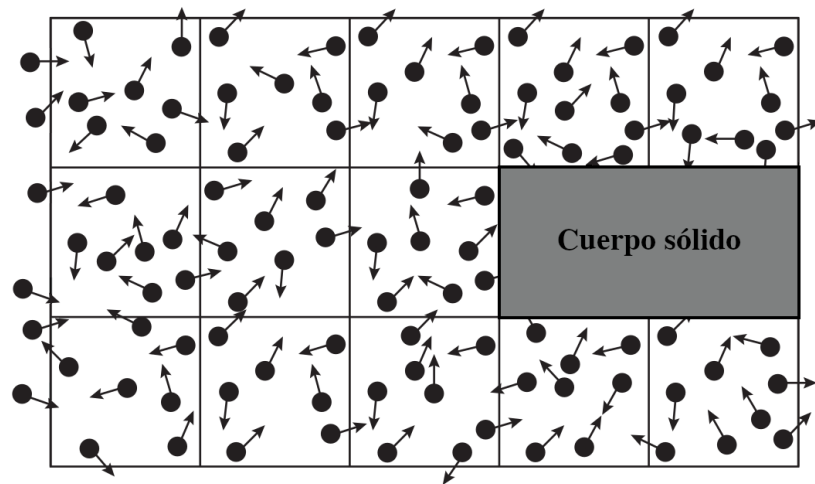


Figura 3.4: Representación visual del dominio computacional empleado en simulaciones utilizando el método DSMC (Adaptado de Ref. [28]).

Las propiedades moleculares se pueden muestrear en cada celda para calcular las funciones de distribución de la velocidad y de la energía interna, así como las cantidades promedio (propiedades macroscópicas) como la densidad, la velocidad media, la temperatura y la presión.

El método DSMC permite la resolución de problemas tanto en estado transiente como en estado estacionario, pero la mayoría de las aplicaciones del método DSMC involucran flujos en estado estacionario. En este caso, una vez que la simulación ha alcanzado el estado estacionario, las propiedades moleculares en cada celda se pueden muestrear continuamente durante muchos pasos de tiempo. Esto permite que un pequeño número de partículas por celda pueda ser muestreada en muchos pasos de tiempo durante el estado estacionario, produciendo cantidades promedio altamente precisas e incluso funciones de distribución. Cabe señalar que también se pueden obtener soluciones de flujo no estacionario utilizando un pequeño número de partículas por celda, siempre que se realice un gran número de simulaciones y se realice un promedio de conjunto de los resultados [27, 28].

3.4.2 Movimiento y clasificación de partículas

Primero se debe definir la malla computacional compuesta por celdas de lado del tamaño del orden de un recorrido libre medio local o más pequeña. Esta malla puede ser estructurada o no estructurada, y pueden estar ajustadas al cuerpo, donde la geometría de un cuerpo sólido o el perímetro del dominio se puede definir exactamente mediante las caras de las celdas (bordes). Cuadrículas cartesianas pueden emplear refinamiento, donde las celdas siempre se dividen por un factor de 2 en cada dirección de coordenadas. Para flujos que no impliquen gradientes significativos de densidad o temperatura (es decir, recorrido libre medio constante), pueden utilizarse cuadrículas cartesianas uniformes [28, 60].

Las partículas de simulación deben clasificarse localmente dentro de las celdas. Un enfoque consiste en mover partículas durante un paso de tiempo completo, determinar sus nuevas coordenadas y luego asignar estas coordenadas a una celda de campo de flujo específica. En una cuadrícula 3D no estructurada arbitraria puede resultar costosa desde el punto de vista computacional. Por el contrario, mapear un conjunto de coordenadas dentro de una cuadrícula cartesiana es más eficiente, especialmente si la cuadrícula es uniforme. Si la nueva posición de la partícula se encuentra dentro de un cuerpo sólido o fuera del dominio computacional, se

deben aplicar las condiciones de contorno apropiadas.

Un segundo enfoque consiste en clasificar continuamente las partículas en celdas durante el movimiento; lo que se conoce como “trazado de rayos”. Una forma para el trazado de rayos de una partícula es calcular el tiempo para golpear cada cara de la celda actual. Dado que, para la mayoría de las cuadrículas, se conoce la conectividad celda/cara, después de este movimiento parcial, la partícula puede reasignarse inmediatamente a la celda vecina correcta en caso de que el tiempo para golpear la cara sea menor que el paso de tiempo. Este procedimiento es generalmente aplicable a cualquier topología de cuadrícula.

Finalmente, dado que los límites de descomposición del dominio están vinculados a los límites de las celdas, el movimiento de trazado de rayos detecta naturalmente cuando una partícula se mueve entre particiones paralelas. Por lo tanto, el mismo algoritmo de trazado de rayos se puede usar para mover cualquier partícula dentro de cualquier celda (incluidas las celdas cortadas que contienen geometría de superficie) dentro de cualquier tipo de cuadrícula computacional.

Después de que todas las partículas se mueven y clasifican localmente en celdas, todos los modelos físicos restantes operan solo en la lista de partículas contenidas dentro de cada celda. Por lo tanto, los algoritmos presentados en las secciones siguientes (como los algoritmos de colisión e intercambio energético) se aplicarán a las partículas dentro de una sola celda, independientemente de cualquier otra celda [28].

3.4.3 Colisiones moleculares

En general, para cada celda computacional, durante cada paso de tiempo de simulación, se debe determinar el número de colisiones entre clases de moléculas, determinar si estas colisiones son de tipo elásticas o inelásticas (sin transferencia de energía interna o con transferencia, respectivamente), y los resultados que implican esas colisiones.

La probabilidad de que dos moléculas ubicadas dentro de un volumen de gas V , choquen durante el intervalo de tiempo Δt , es proporcional al volumen barrido por su interacción (Figura 3.2b) normalizado por el volumen de gas en consideración,

$$P \propto \sigma g \Delta t / V \quad (3.80)$$

donde g es la velocidad relativa del centro de masa de las dos moléculas, y σ es la sección transversal de colisión del par de moléculas, que generalmente es función de su velocidad relativa ($\sigma = \sigma(d, g)$). Si el volumen V contiene N moléculas reales, la probabilidad se aplica a los $N(N-1)/2$ posibles pares de colisión. Dado que cada una de las N_p partícula DSMC representa un número W_p de moléculas reales idénticas, se debe aplicar la probabilidad a los $N_p(N_p-1)/2$ posibles pares de colisiones de partículas DSMC, dentro de la celda computacional:

$$P_{DSMC} = \sigma(d, g)gW_p\Delta t_{DSMC}/V_{DSMC} \quad (3.81)$$

donde V_{DSMC} es el volumen de la celda computacional, Δt_{DSMC} es el paso de tiempo de la simulación, y $N = W_p N_p$. De esta manera, el número total de colisiones que se realizarán dentro de una celda DSMC durante un solo paso de tiempo equivale a:

$$N_{coll} = \frac{1}{2}N_p(N_p-1)\frac{\langle\sigma(d, g)g\rangle W_p\Delta t_{DSMC}}{V_{DSMC}} \quad (3.82)$$

donde $\langle\sigma(d, g)g\rangle$ representa el promedio de todos los pares de partículas probadas para colisión en la celda computacional [28].

La forma funcional de $\sigma(d, g)$ se puede configurar arbitrariamente dentro de una simulación DSMC, lo que permite una flexibilidad significativa en el modelado físico. El modelo más utilizado para la sección transversal en colisiones elásticas es el modelo “Variable Hard-Sphere” (VHS) [61], que se describe en la sección 3.4.3.

Una vez que se especifica una forma funcional para $\sigma(d, g)$, como la que se obtiene con el modelo VHS, es requerido un algoritmo para seleccionar pares de moléculas para que colisionen realmente dentro de una celda. Se han formulado y aplicado varios esquemas de tasa de colisión diferentes, pero el algoritmo No-Time-Counter (NTC) [62] desarrollado por Bird es el dominante en el enfoque DSMC, dado que ha demostrado ser un algoritmo muy preciso y eficiente en este tipo de simulaciones [28].

Método No-Time-Counter (NTC)

Los algoritmos de tasa de colisión como NTC, buscan hacer más eficiente el método DSMC desde un punto de vista computacional. Para ello se analizan las proba-

bilidades de colisión aplicadas a cada uno de los $N_p(N_p - 1)/2$ pares de partículas, observando que estas suelen ser pequeñas. Es común encontrar que menos del 20% de las partículas dentro de una celda DSMC chocan durante un solo paso de tiempo. Así, en lugar de aplicar una probabilidad pequeña de colisión a todos los pares de partículas dentro de la celda, se puede obtener un resultado idéntico aplicando una probabilidad mayor de colisión a un número menor de pares de partículas, consiguiendo así el objetivo del algoritmo. Para ello se requiere determinar el número máximo de pares de partículas que se espera que colisionen dentro de una celda y durante un paso de tiempo, lo que se expresa como:

$$N_{coll-max} = \frac{1}{2}N_p(N_p - 1) \frac{[\langle \sigma(d, g)g \rangle]_{max} W_p \Delta t_{DSMC}}{V_{DSMC}} \quad (3.83)$$

donde $[\langle \sigma(d, g)g \rangle]_{max}$ es una estimación del valor máximo esperado de $\sigma(d, g)g$ dentro de la celda. Dado que solo se puede hacer colisionar un número entero de pares en una celda DSMC dentro de un solo paso de tiempo, y suponiendo que cada partícula puede chocar solo una vez por paso de tiempo, el número de pares de partículas que se probarán para colisión se establece como:

$$N_{pairs-tested} = [N_{coll-max} + 0.5] \quad (3.84)$$

donde, en este caso, $[\bullet]$ denota la función parte entera de \bullet .

Por lo tanto, $N_{coll-max}$ es un límite superior estimado del número de pares de colisiones aplicado a todos los pares de partículas, mientras que $N_{pairs-tested}$ es el número correspondiente de pares de colisión que realmente se probarán en la celda DSMC, debido a la naturaleza discreta de la simulación. La división de ambos valores se conoce como factor de corrección y debe tenerse en cuenta en cada paso de tiempo:

$$F_{correction} = N_{coll-max} / N_{pairs-tested} \quad (3.85)$$

A continuación, se simula la verdadera tasa de colisión seleccionando aleatoriamente $N_{pairs-tested}$ pares de partículas (donde una partícula no se puede incluir en múltiples pares), y aceptar cada par para una colisión real con probabilidad

$$P_{DSMC} = F_{correction} \frac{\sigma(d, g)g}{[\langle \sigma(d, g)g \rangle]_{max}} \quad (3.86)$$

El valor de $[\langle \sigma(d, g)g \rangle]_{max}$ se actualiza dentro de cada celda a medida que avanza la simulación, y su valor solo altera la eficiencia numérica del algoritmo (el número de pares probados) [27, 28].

Una ventaja del método NTC, es que permanece inalterado para simulaciones de mezclas de gases de múltiples especies. Considerando una mezcla de gases compuesta por N_A partículas de especie A y N_B de la especie B , mientras que N_p se mantiene como el número total de partículas dentro de la celda, tal que:

$$N_p = N_A + N_B \quad (3.87)$$

El número de parejas totales y específicos para cada combinación de especies está dado por

$$\underbrace{\frac{N_p(N_p - 1)}{2}}_{\text{pares totales}} = \underbrace{\frac{N_A(N_A - 1)}{2}}_{\text{pares } A-A} + \underbrace{\frac{N_B(N_B - 1)}{2}}_{\text{pares } B-B} + \underbrace{N_A N_B}_{\text{pares } A-B} \quad (3.88)$$

Así, dado que el comportamiento estadístico de N_A y N_B son los mismos que para N_p , el método NTC aplicado a una mezcla de especies en estado estacionario también será preciso para valores pequeños de N_A y N_B . Por otro lado, al igual que en el caso de una sola especie, en lugar de probar todos los pares de partículas posibles para una colisión, es certero y más eficiente computacionalmente probar solo un número máximo esperado de pares. Además, se tiene que la sección transversal máxima esperada, $[\langle \sigma(d, g)g \rangle]_{max}$, es ahora el máximo encontrado para cualquier par de especies dentro de la celda. Finalmente, las colisiones entre los distintos pares de especies se seleccionarán a la velocidad correcta en función de la sección transversal $\sigma(d, g)$ asociado con cada par de especies [28].

Modelo Variable Hard-Sphere (VHS)

El modelo de sección transversal de colisión DSMC más utilizado para colisiones elásticas (sin transferencia de energía interna) es el modelo “Variable Hard-Sphere” (VHS) [61]. El modelo VHS considera que la sección transversal total (σ_T^{VHS}) de una interacción dependa de la velocidad relativa del par de colisiones, lo que permite modelar la dependencia de la temperatura del coeficiente de viscosidad, establecida a través de mediciones experimentales. Como su nombre lo

indica, el modelo VHS considera diámetros variables, tal que:

$$d = d_{ref} \left(\frac{g_{ref}}{g} \right)^\nu \quad (3.89)$$

donde d_{ref} y g_{ref} son valores constantes de un diámetro de referencia y una velocidad relativa de referencia, respectivamente, y ν es el valor del exponente de la ley de potencia (ecuación 3.33). Con esto, la sección transversal total se expresa como:

$$\sigma_T^{VHS} = \pi d_{ref}^2 \left(\frac{g_{ref}}{g} \right)^{2\nu} \quad (3.90)$$

Esta expresión se puede ver como un ajuste de curva a las secciones transversales integradas obtenidas de un PES (Ψ). Sin embargo, no se dispone de datos precisos de PES ni de secciones transversales para muchas especies de gas de interés, mientras que los datos de viscosidad experimental están disponibles para la mayoría de los gases. Por ello, la mayoría de los modelos de colisión DSMC se han desarrollado eligiendo los parámetros del modelo de colisión en función de datos de viscosidad.

El modelo VHS recurre al análisis de Chapman-Enskog (sección 3.2.4) para derivar expresiones para los coeficientes de viscosidad y difusión [27]. A partir de los resultados de las ecuaciones 3.60 y 3.61, se expresan las secciones transversales de viscosidad y difusividad para el modelo VHS, como

$$\sigma_\mu^{VHS} = \frac{2}{3} \sigma_T^{VHS} \quad \sigma_M^{VHS} = \sigma_T^{VHS} \quad (3.91)$$

Sustituyendo σ_T^{VHS} (ecuación 3.90) en la expresión $\sigma_\mu^{VHS} = 2/3 \sigma_T^{VHS}$, y reemplazando esta expresión en la ecuación 3.55 correspondiente al coeficiente de viscosidad binario μ_{ij} en el límite cercano al equilibrio, se obtiene

$$\mu^{VHS} = \frac{\frac{15}{8} \sqrt{2\pi m_r k} \left(\frac{2k}{m_r} \right)^\nu T^{1/2+\nu}}{\Gamma(4-\nu) \pi d_{ref}^2 g_{ref}^{2\nu}} \quad (3.92)$$

Así, dado que los valores de referencia son constantes, el modelo VHS simula una viscosidad que depende de la temperatura del gas según la misma forma que la ley de potencia inversa, esto es $\mu^{VHS} \propto T^{1/2+\nu} \equiv T^{1/2+2/\alpha}$ [28].

El modelo VHS requiere tanto de un diámetro de referencia (idéntico al del

modelo HS) como de una velocidad relativa de referencia. Como propone Bird [27], un valor de referencia razonable sería el valor medio de g encontrada en las colisiones que ocurren en un gas en equilibrio a una temperatura de referencia T_{ref} , ya que el valor medio de g se puede expresar en términos de la temperatura del gas en equilibrio T . Expresando la media de velocidad relativa elevada a un exponente en términos de una VDF de Maxwell, es posible obtener la siguiente expresión

$$g_{ref}^{2\nu} \equiv \langle g^{2\nu} \rangle_{collisions}^{VHS} = (2kT_{ref}m_r)^\nu \frac{1}{\Gamma(2-\nu)} \quad (3.93)$$

Esto conduce a la expresión final para la viscosidad simulada por el modelo VHS

$$\mu^{VHS} = \mu_{ref}^{VHS} \left(\frac{T}{T_{ref}} \right)^\omega \quad (3.94)$$

donde T_{ref} es una temperatura de referencia del gas [28], y

$$\mu_{ref}^{VHS} = \frac{15\sqrt{2\pi m_r k T_{ref}}}{2(5-2\omega)(7-2\omega)\pi d_{ref}^2} \quad (3.95)$$

con

$$\omega \equiv \nu + 1/2 = 2/\alpha + 1/2 \quad (3.96)$$

Se puede hacer un desarrollo similar para el coeficiente de difusión simulado por el modelo de colisión VHS, con lo que se obtiene

$$D^{VHS} = D_{ref}^{VHS} \left(\frac{T}{T_{ref}} \right)^\omega \quad (3.97)$$

donde

$$D_{ref}^{VHS} = \frac{3\sqrt{2\pi k T_{ref}/m_r}}{4(5-2\omega)n\pi d_{ref}^2} \quad (3.98)$$

El valor de ω se elige para que coincida con la dependencia de la temperatura de μ o D , pero no ambos de forma independiente.

Por otra parte, la tasa de colisión para el modelo VHS, o sea el número de colisiones experimentadas por la especie A con la especie B, por cantidad de partículas de la especie A y por unidad de tiempo [28], es:

$$\nu_{AB}^{VHS} = \frac{n_B \pi d_{ref}^2}{1 + \delta_{AB}} \sqrt{\frac{8kT_{ref}}{\pi m_r}} \left(\frac{T}{T_{ref}} \right)^{1-\omega} \quad (3.99)$$

A continuación se describen brevemente otros modelos de sección transversal de colisión presentes en la literatura. El modelo “Variable Soft Sphere” (VSS) fue propuesto por Koura y Matsumoto (1991, 1992) [63, 64], e incluye un modelo de dispersión más realista en comparación con la dispersión isotrópica de esfera dura utilizada en el modelo VHS. El modelo VSS considera la dispersión post-colisión anisotrópica, y como resultado, puede reproducir correctamente la viscosidad real y los coeficientes de difusión de los gases. Hash y Hassan (1993) [65] introdujeron el modelo de “Generalized Hard-Sphere” (GHS), el cual tiene un exponente de ley de potencia no constante para las propiedades de transporte. Así, el modelo GHS tiene en cuenta tanto las partes atractivas como las repulsivas de la interacción partícula-partícula, lo que le permite simular flujos de baja temperatura que están dominados por colisiones atractivas. El modelo GHS se amplió aún más para incluir la dispersión de esferas blandas, por medio del modelo “Generalized Soft-Sphere” (GSS) desarrollado por Fan (2002) [66]. El modelo GSS introduce un parámetro adicional al modelo GHS, que se utiliza para calcular un ángulo de dispersión no isotrópico de igual forma que el modelo VSS.

3.4.4 Modelado de transferencia de energía interna

El esquema NTC combinado con el modelo VHS, determina con precisión las tasas de colisión entre cada par de especies. Por lo tanto, para simular la relajación de energía interna en DSMC, una vez que se ha seleccionado un par de partículas de simulación para una colisión, cada partícula involucrada en la colisión se considera además para el intercambio de energía interna con una probabilidad de colisión inelástica.

En esta sección se describe cómo se modelan la energía interna y la transferencia de energía interna en DSMC. Considerando una simulación que ya está en equilibrio, el modelo de relajación de la energía interna debe garantizar que el sistema permanezca en equilibrio. El modelo de relajación solo se aplica a pares de colisión, por lo que debe formularse basándose en las propiedades de las moléculas en colisiones dentro del gas en equilibrio [28].

Redistribución de energía posterior a la colisión

Dentro de un cálculo DSMC, el gas puede encontrarse localmente en un estado de desequilibrio térmico en el que la energía no se distribuye por igual entre los

modos de traslación, rotación y vibración. Sin embargo, sobre colisiones sucesivas, y en el límite de equilibrio, las energías moleculares y las funciones de distribución deberían relajarse hacia un estado de equilibrio que satisfaga la equipartición de energía.

Uno de los modelos DSMC más utilizados y efectivos para lograr esto es el método de redistribución de energía de Borgnakke y Larsen (BL) [67]. Esencialmente, para colisiones que involucran transferencia de energía interna, las energías posteriores a la colisión (traslación, rotación y vibración) se muestrean a partir de una distribución de equilibrio que corresponde a la energía de colisión. Por tanto, el procedimiento opera sobre las energías de colisión de las colisiones individuales, mientras que al mismo tiempo asegura la relajación a un estado de equilibrio después de muchas colisiones.

Modelo de Borgnakke-Larsen

Considerando como ejemplo el intercambio de energía traslacional-rotacional, en un gas donde todas las moléculas tienen el mismo número de grados de libertad rotacional. En relación con el movimiento del centro de masa del par de colisión, la energía de traslación relativa del par es

$$\epsilon_{tr} = \frac{1}{2}m_r g^2 \quad (3.100)$$

donde m_r y g son la masa reducida y la velocidad relativa del par de colisión, respectivamente. Por su parte, la energía de rotación total asociada con un par aleatorio de moléculas, equivale a la suma de la energía de rotación ($\epsilon_{rot,j}$) de cada una de las partículas j ;

$$\epsilon_{rot} = \epsilon_{rot,1} + \epsilon_{rot,2} \quad (3.101)$$

Como se vio en la sección 3.1.3 (ecuación 3.30), la función de distribución para un modo de energía (ϵ_i) con ζ_i grados de libertad, en un gas en equilibrio con temperatura asociada T_i , puede escribirse como

$$f(\epsilon_i; T_i) = \frac{1}{\Gamma(\zeta_i/2kT_i)} \left(\frac{\epsilon_i}{kT_i} \right)^{\zeta_i/2-1} e^{-\epsilon_i/kT_i} = A\epsilon_i^{\zeta_i/2-1} e^{-\epsilon_i/kT_i} \quad (3.102)$$

donde A es una constante que se cancela en muchas de las próximas ecuaciones. La distribución general de la ecuación 3.102 se puede aplicar a la energía de rotación

de una molécula como

$$f(\epsilon_{rot,j}; T_{rot}) \propto \epsilon_{rot,j}^{\zeta_{rot}/2-1} e^{-\epsilon_{rot,j}/kT_{rot}} \quad (3.103)$$

A partir de estas expresiones, se puede demostrar que la función de distribución de la energía de rotación total entre pares de moléculas que se encuentran en un gas en equilibrio equivale a

$$f(\epsilon_{rot}; T_{rot}) \propto \epsilon_{rot}^{\zeta_{rot}-1} e^{-\epsilon_{rot}/kT_{rot}} \quad (3.104)$$

Una restricción adicional introducida en esta derivación es que la energía de rotación de un par de moléculas no sesga su selección para una colisión elástica o inelástica. Esta restricción implica que la ecuación 3.104 es también la función de distribución de la energía interna total de los pares moleculares en colisiones en un gas en equilibrio [27, 28].

El método BL utiliza la distribución de equilibrio conjunto (en este caso traslacional-rotacional) que corresponde a la energía de colisión, ϵ_{coll} , que equivale

$$\epsilon_{coll} = \epsilon_{tr} + \epsilon_{rot} \quad (3.105)$$

Para una energía de colisión total específica (fija), se pueden escribir expresiones equivalentes para la distribución conjunta como

$$f(\epsilon_{tr}; T_{coll}) f(\epsilon_{rot}; T_{coll}) \propto \epsilon_{tr}^{3/2-\omega} \epsilon_{rot}^{\zeta_{rot}-1} e^{-(\epsilon_{tr}+\epsilon_{rot})/kT_{coll}} \quad (3.106)$$

$$f(\epsilon_{tr}; T_{coll}) f(\epsilon_{coll} - \epsilon_{tr}; T_{coll}) \propto \epsilon_{tr}^{3/2-\omega} (\epsilon_{coll} - \epsilon_{tr})^{\zeta_{rot}-1} e^{-\epsilon_{coll}/kT_{coll}} \quad (3.107)$$

$$f(\epsilon_{coll} - \epsilon_{rot}; T_{coll}) f(\epsilon_{rot}; T_{coll}) \propto (\epsilon_{coll} - \epsilon_{rot})^{3/2-\omega} \epsilon_{rot}^{\zeta_{rot}-1} e^{-\epsilon_{coll}/kT_{coll}} \quad (3.108)$$

donde T_{coll} es la temperatura de equilibrio para la distribución, pero en realidad no se requiere en ninguna ecuación final.

A partir de la ecuación 3.107, se determina que para una colisión dada con energía total ϵ_{coll} , la probabilidad de un valor particular de la energía de traslación es

$$P = C \epsilon_{tr}^{3/2-\omega} (\epsilon_{coll} - \epsilon_{tr})^{\zeta_{rot}-1} \quad (3.109)$$

donde C es una constante. El valor máximo de esta probabilidad ocurre para

$$\frac{\epsilon_{tr}}{\epsilon_{coll}} = \frac{3/2 - \omega}{\zeta_{rot} + 1/2 - \omega} \quad (3.110)$$

y equivale a

$$P_{max} = C(3/2 - \omega)^{3/2-\omega} (\zeta_{rot} - 1)^{\epsilon_{rot}-1} [(\zeta_{rot} + 1/2 - \omega)\epsilon_{coll}]^{\zeta_{rot}-1} \quad (3.111)$$

y finalmente, la razón de probabilidad con la probabilidad máxima se puede escribir como

$$\frac{P}{P_{max}} = \left\{ \frac{\zeta_{rot} + 1/2 - \omega}{3/2 - \omega} \left(\frac{\epsilon_{tr}}{\epsilon_{coll}} \right) \right\}^{3/2-\omega} \left\{ \frac{\zeta_{rot} + 1/2 - \omega}{\zeta_{rot} - 1} \left(1 - \frac{\epsilon_{tr}}{\epsilon_{coll}} \right) \right\}^{\zeta_{rot}-1} \quad (3.112)$$

Esta ecuación se puede incorporar en un procedimiento simple de aceptación-rechazo. Específicamente, para una colisión dada (con energía de colisión ϵ_{coll}), se genera una energía de traslación aleatoria utilizando un número aleatorio, $\epsilon_{tr}/\epsilon_{coll} = R_1$ ($0 \leq R_1 \leq 1$). Así, la ecuación 3.112 se evalúa como

$$\frac{P}{P_{max}} = a^a b^{-b} c^{-c} R_1^b (1 - R_1)^c \quad (3.113)$$

donde $a = \zeta_{rot} + 1/2 - \omega$, $b = 3/2 - \omega$, y $c = \zeta_{rot} - 1$. El valor resultante se compara con un segundo número aleatorio ($0 \leq R_2 \leq 1$), y si $P/P_{max} \geq R_2$ entonces el valor de ϵ_{tr} se acepta como la energía de traslación posterior a la colisión del par de colisión. Si el valor de ϵ_{tr} no es aceptado, se genera aleatoriamente otro valor R_1 y el proceso se repite hasta que se acepta un valor, llamado ϵ'_{tr} [27, 28].

Dado que la energía total de colisión se conserva, la energía interna posterior a la colisión es

$$\epsilon'_{rot} = \epsilon_{coll} - \epsilon'_{tr} \quad (3.114)$$

que debe dividirse entre las dos partículas involucradas en la colisión. Dada la energía de rotación total asociada con el par de moléculas (ϵ'_{rot}), la probabilidad de que una molécula tenga energía de rotación $\epsilon'_{rot,1}$ es

$$P = D(\epsilon'_{rot,1})^{\zeta_{rot}/2-1} (\epsilon'_{rot} - \epsilon'_{rot,1})^{\zeta_{rot}/2-1} \quad (3.115)$$

donde D es una constante. La probabilidad máxima ocurre cuando la energía interna se divide por igual entre las dos moléculas que chocan, lo que da como

resultado

$$\frac{P}{P_{max}} = 2^{\zeta_{rot}-2} \left(\frac{\epsilon'_{rot,1}}{\epsilon'_{rot}} \right) \left(1 - \frac{\epsilon'_{rot,1}}{\epsilon'_{rot}} \right) \quad (3.116)$$

Así, un valor de $\epsilon'_{rot,1}$ puede determinarse aplicando un método de aceptación-rechazo a la ecuación 3.116 (análogo al procedimiento aplicado a la ecuación 3.112). La energía interna restante se le asigna a la otra molécula involucrada en la colisión, $\epsilon'_{rot,2} = \epsilon'_{rot} - \epsilon'_{rot,1}$ [27, 28].

Número de colisión y probabilidad de colisión

Considerando el intercambio de energía traslacional-rotacional como ejemplo, y suponiendo que el sistema está en un estado de no equilibrio ($T_{tr} \neq T_{rot}$) asociado con ζ_{tr} y ζ_{rot} grados de libertad y se relaja hacia el equilibrio. Si en el momento t las energías de traslación relativa y de rotación promedio del sistema son $\langle \epsilon_{tr} \rangle(t)$ y $\langle \epsilon_{rot} \rangle(t)$, respectivamente. Durante un paso de tiempo de simulación, Δt , la fracción de partículas que sufrirán una colisión es $\Delta t / \tau_{coll}$, donde τ_{coll} es el tiempo medio de colisión. Para cada par de colisiones seleccionado, la probabilidad de que sufran una colisión inelástica durante Δt es

$$P_{inelastic} = \frac{\Delta t}{\tau_{coll}} p_{rot} \quad (3.117)$$

y, por tanto, la probabilidad de que esta colisión sea elástica es

$$P_{elastic} = 1 - \frac{\Delta t}{\tau_{coll}} p_{rot} \quad (3.118)$$

Por otra parte, a partir de la función de distribución posterior a la colisión dada en la ecuación 3.108, se puede determinar el valor esperado de la energía de rotación total posterior a la colisión (indicada como $\langle \epsilon'_{rot} \rangle$) para una energía de colisión total dada (ϵ_{col})

$$\langle \epsilon'_{rot} \rangle = \frac{\zeta_{rot}}{\zeta_{tr} + \zeta_{rot}} \epsilon_{col} \quad (3.119)$$

Este resultado se utiliza para determinar la cantidad de intercambio de energía durante un paso de tiempo DSMC. Para un par de colisión con energía ($\epsilon_{tr}, \epsilon_{rot}$) en el tiempo t , la energía de rotación del par de colisión en el tiempo $t + \Delta t$ se

obtiene combinando las ecuaciones 3.117, 3.118 y 3.119, como sigue:

$$\varepsilon_{rot}(t + \Delta t) = P_{inelastic} \langle \varepsilon'_{rot} \rangle + P_{elastic} \varepsilon_{rot} \quad (3.120)$$

Tomando la media de la energía de rotación del par de colisión en $t + \Delta t$, sobre todas las colisiones (a la ecuación 3.120) y reemplazando $\frac{d\langle \varepsilon_{rot} \rangle}{dt}$ por una aproximación de primer orden, se obtiene

$$\frac{dE_{rot}}{dt} = \frac{1}{\tau_{coll}} \frac{\zeta_{tr}}{\zeta_{tr} + \zeta_{rot}} (E_{rot}^*(t) - E_{rot}(t)) p_{rot} \quad (3.121)$$

donde $E_{rot} \equiv \langle \varepsilon_{rot} \rangle$. Comparando este resultado con las ecuaciones de relajación vibratoria de Landau-Teller y de relajación rotacional de Jeans (ecuación 3.78), presentado en la sección 3.3, se obtiene que

$$p_{rot} = \frac{C}{Z_{rot}} \quad (3.122)$$

donde $C = \frac{\zeta_{tr} + \zeta_{rot}}{\zeta_{tr}}$, y Z_{rot} es el número de colisión que representa el número promedio de colisiones requeridas para equilibrar el modo de energía rotacional, es decir que $\tau_{rot} = \tau_{col} Z_{rot}$. Así, para que una simulación DSMC usando el método BL sea consistente con las ecuaciones continuas de relajación en el límite cercano al equilibrio (ecuación 3.78), las colisiones inelásticas deben realizarse con la probabilidad p_{rot} dada en la ecuación 3.122. Las propiedades posteriores a la colisión (energías de traslación y rotación) deben muestrearse utilizando las expresiones de probabilidad BL (distribuciones) dadas en las ecuaciones 3.112 y 3.116 [27, 28].

Velocidades posteriores a la colisión

La determinación de las velocidades posteriores a la colisión es el último paso del algoritmo de colisión general, y se realiza después que se asignan las energías internas posteriores a la colisión. Después de este proceso, la energía de colisión restante se distribuye a los modos de traslación de las partículas posteriores a la colisión y, en última instancia, se asignan vectores de velocidad posteriores a la colisión a cada partícula. Para una colisión elástica, la velocidad relativa g (y, por lo tanto, ϵ_{tr}) permanece constante durante la colisión, como se mostró en la ecuación 3.38. Por el contrario, en las colisiones inelásticas, una vez completada la redistribución de energía, habrá cierta cantidad de energía de traslación (ϵ_{tr}).

En este caso, la velocidad relativa posterior a la colisión es

$$g = \sqrt{\frac{2\epsilon_{tr}}{m_r}} \quad (3.123)$$

En cualquier caso, elástico o inelástico, la velocidad relativa posterior a la colisión g se conoce, y se procede a elegir un ángulo de dispersión y calcular los vectores de velocidad final.

Los modelos de colisión HS, VHS, y GHS utilizan la dispersión de esfera dura para elegir un ángulo de dispersión aleatorio. En estos se emplea la conservación del momento lineal para calcular la velocidad del centro de masa (W_i) del par de colisión, que permanece invariante durante la colisión [28]. Si las dos partículas se denotan con subíndices 1 y 2, y sus velocidades previas a la colisión se denotan por $C_{i,1}^{pre}$ y $C_{i,2}^{pre}$, se tiene

$$W_i = \frac{m_1}{m_1 + m_2} C_{i,1}^{pre} + \frac{m_2}{m_1 + m_2} C_{i,2}^{pre} \quad (3.124)$$

donde $i = x, y, z$. Por otra parte, el ángulo de dispersión se determina a partir de la ecuación 3.59 como

$$\cos \chi = 2 \left(\frac{b}{d} \right)^2 - 1 \quad (3.125)$$

donde b es el parámetro de impacto y d es el diámetro que define la sección transversal total. Los parámetros de impacto son aleatorios en gases diluidos, donde la cantidad $(b/d)^2$ se distribuye aleatoriamente en el rango $[0, 1]$. Esto nos permite calcular los ángulos de dispersión aleatorios, χ y θ como

$$\begin{aligned} \cos \chi &= 2R_1 - 1 \\ \sin \chi &= \sqrt{1 - \cos^2 \chi} \\ \theta &= 2\pi R_2 \end{aligned} \quad (3.126)$$

donde R_1 y R_2 son números aleatorios en el rango $[0, 1]$. Esto permite determinar nuevos componentes de velocidad relativa como

$$\begin{aligned} g'_x &= g \cos \chi \\ g'_y &= g \sin \chi \cos \theta \\ g'_z &= g \sin \chi \sin \theta \end{aligned} \quad (3.127)$$

Finalmente, se asignan los vectores de velocidad post-colisión de las partículas, de forma análoga a las ecuaciones 3.37, como

$$C_{i,1} = W_i + \frac{m_2}{m_1 + m_2} g'_i \quad C_{i,2} = W_i - \frac{m_1}{m_1 + m_2} g'_i \quad (3.128)$$

donde $i = x, y, z$. Esto completa la colisión, y las partículas se encuentran listas para el siguiente paso de movimiento del algoritmo DSMC [27, 28].

3.4.5 Propiedades macroscópicas

Para calcular cantidades macroscópicas, se deben tomar promedios de un número suficiente de muestras (es decir, partículas y sus propiedades moleculares). Para las simulaciones de estado estacionario, las muestras se acumulan dentro de cada celda computacional durante muchos pasos de tiempo durante el estado estacionario. Luego, dentro de cada celda se toman promedios sobre estas muestras para obtener cantidades macroscópicas.

Cantidades de una sola especie

En general, primero se calculan las propiedades de los gases de cada especie en la mezcla y luego se promedian para obtener las propiedades de la mezcla de gases.

La concentración molecular de cada especie se determina a partir de la ecuación 3.63:

$$n_s = \frac{N_{p,s} W_p}{N_{samp} V_c} \quad (3.129)$$

donde $N_{p,s}$ es el número de partículas DSMC de la especie s simuladas dentro de la celda de muestreo, durante N_{samp} pasos de tiempo de muestreo, V_c es el volumen de la celda, y W_p es la cantidad de moléculas reales que representa cada partícula DSMC (asumiendo que todas las partículas dentro de la celda tienen el mismo W_p). La densidad es entonces

$$\rho_s = n_s m_s = \frac{N_{p,s} m_s W_p}{N_{samp} V_c} \quad (3.130)$$

donde m_s es la masa de las moléculas de la especie s .

Las componentes $i = x, y, z$ de la velocidad del flujo para cada especie se

calculan a partir de 3.70

$$\langle C_i \rangle_s = \frac{1}{N_{p,s}} \sum_{j=1}^{N_{p,s}} (C_{i,s})_j \quad (3.131)$$

donde j es cada una de las $N_{p,s}$ partículas simuladas de la especie s presentes en la celda de muestreo durante el número total de pasos de tiempo de muestreo N_{samp} , y $C_{i,s}$ son las componentes i de la velocidad de cada partícula [28].

La temperatura de traslación para cada dirección de coordenadas i se obtiene en base a la ecuación 3.69:

$$T_{i,s} = \frac{m_s}{k} \left[\frac{1}{N_{p,s}} \sum_{j=1}^{N_{p,s}} (C_{i,s})_j^2 - \langle C_i \rangle_s^2 \right] \quad (3.132)$$

donde k es la constante de Boltzmann, y $(C_{i,s})_j^2$ es el cuadrado de la componente i de la velocidad de la partícula j , para cada una de las $N_{p,s}$ partículas de especie s dentro de la celda de muestreo. Las componentes $T_{i,s}$ se pueden promediar para obtener la temperatura de traslación general para cada especie en el gas,

$$T_{tr,s} = (T_{x,s} + T_{y,s} + T_{z,s})/3 \quad (3.133)$$

La temperatura de rotación para cada especie se obtiene de la ecuación 3.21:

$$T_{rot,s} = \frac{2}{k\zeta_{rot,s}N_{p,s}} \sum_{j=1}^{N_{p,s}} (\epsilon_{rot,s})_j \quad (3.134)$$

donde $(\epsilon_{rot,s})_j$ es la energía de rotación de la partícula j de la especie s dentro de la celda de muestreo, y $\zeta_{rot,s}$ son los grados de libertad de rotación correspondiente a la especie s . Por su parte, la temperatura vibratoria se obtiene de la ecuación 3.22 como

$$T_{vib,s} = \frac{\theta_{vib,s}}{\ln \left(1 + \frac{k\theta_{vib,s}}{\langle \epsilon_{vib} \rangle_s} \right)} = \frac{\theta_{vib,s}}{\ln \left(1 + \frac{k\theta_{vib,s}N_{p,s}}{\sum_{j=1}^{N_{p,s}} (\epsilon_{vib,s})_j} \right)} \quad (3.135)$$

donde θ_{vib} es la temperatura característica de vibración [28]. Se puede calcular una temperatura general como el promedio ponderado de los modos de energía

con sus respectivos grados de libertad, para cada especie

$$T_{ov,s} = \frac{\zeta_{tr,s}T_{tr,s} + \zeta_{rot,s}T_{rot,s} + \zeta_{vib,s}T_{vib,s}}{\zeta_{tr,s} + \zeta_{rot,s} + \zeta_{vib,s}} \quad (3.136)$$

Independiente de la cantidad de átomos de la especie, $\zeta_{tr,s} = 3$. Por su parte, para moléculas monoatómicas $\zeta_{rot,s} = \zeta_{vib,s} = 0$, mientras que para especies diatómicas $\zeta_{rot,s} = 2$, y los grados de libertad vibratorios efectivos ($\zeta_{vib,s}$) de acuerdo al modelo de oscilador armónico simple (sección 3.1.1), equivalen a:

$$\zeta_{vib,s} = \frac{2\theta_{vib,s}/T_{vib}}{e^{\theta_{vib,s}/T_{vib}} - 1} \quad (3.137)$$

donde T_{vib} es la temperatura vibracional de la mezcla del gas (ecuación 3.145).

La presión parcial de cada especie se obtiene a partir de la ecuación 3.25, como sigue

$$p_s = n_s k T_{tr,s} \quad (3.138)$$

Cantidades de mezcla de gases

Las propiedades generales de la mezcla de gases pueden evaluarse promediando las cantidades del número total de especies (N_s) [28].

La concentración molecular de la mezcla y la densidad de la mezcla están dadas por

$$n = \sum_{s=1}^{N_s} n_s \quad (3.139)$$

$$\rho = \sum_{s=1}^{N_s} \rho_s \quad (3.140)$$

Cada componente cartesiana i de la velocidad de la mezcla se evalúa como una ponderación de la fracción de masa de cada especie, como sigue

$$C_{0,i} = \frac{1}{\rho} \sum_{s=1}^{N_s} (\rho_s \langle C_i \rangle_s) \quad (3.141)$$

Tanto las temperaturas de traslación de la mezcla en cada dirección de coordenadas i , como la temperatura de traslación total de la mezcla, se ponderan por

la fracción de masa de cada especie

$$T_i = \frac{1}{\rho} \sum_{s=1}^{N_s} (\rho_s T_{i,s}) \quad (3.142)$$

$$T_{tr} = \frac{1}{\rho} \sum_{s=1}^{N_s} (\rho_s T_{tr,s}) \quad (3.143)$$

De igual modo que las ecuaciones anteriores, las temperaturas de rotación y vibración de la mezcla están dadas por

$$T_{rot} = \frac{1}{\rho_{poly}} \sum_{s=1}^{N_s} (\rho_s T_{rot,s}) \quad (3.144)$$

$$T_{vib} = \frac{1}{\rho_{poly}} \sum_{s=1}^{N_s} (\rho_s T_{vib,s}) \quad (3.145)$$

donde esta vez la ponderación respecto de la fracción de masa solo incluye especies poliatómicas, dado que son aquellas las que contienen energía interna. Por tanto, el termino $\rho_{poly} = \sum_{s=1}^{N_s} \rho_s$, con $s \neq s_{atomic}$.

La temperatura general de la mezcla se puede evaluar mediante

$$T_{ov} = \frac{1}{\rho} \sum_{s=1}^{N_s} (\rho_s T_{ov,s}) \quad (3.146)$$

Finalmente, la presión de la mezcla está dada por

$$p = \sum_{s=1}^{N_s} p_s = nkT_{tr} \quad (3.147)$$

Propiedades de superficie

Las propiedades de la superficie en DSMC se calculan a partir del momento y la energía transferidos hacia/desde la superficie durante cada colisión partícula superficie. Las cantidades muestreadas deben almacenarse para cada elemento de superficie [28].

El flujo numérico, definido como el número de partículas que impactan la

superficie por unidad de tiempo, por unidad de área, se calcula como

$$n_f = \frac{N_{ps} W_p}{A \Delta t N_{samp}} \quad (3.148)$$

donde N_{ps} es el número de partículas DSMC que impactan el elemento de superficie durante el tiempo de muestreo, N_{samp} es el número de pasos de tiempo de muestreo, Δt es el paso de tiempo, y A es el área del elemento de superficie.

El flujo neto de cantidad de movimiento sobre el elemento de superficie, en las direcciones de coordenadas $i = x, y, z$, por unidad de área, se calcula como

$$F_{M_i} = -\frac{W_p}{A \Delta t N_{samp}} \sum_{j=1}^{N_{ps}} m_j (C_i^{post} - C_i^{pre})_j \quad (3.149)$$

donde m_j es la masa de la molécula j , C_i^{pre} y C_i^{post} son las componentes de la velocidad en dirección coordenada i en el instante previo y posterior a la colisión con la superficie, respectivamente. Por su parte, W_p se considera igual para todas las especies moleculares. Estas expresiones se pueden sumar sobre todos los elementos de la superficie (N_e) para obtener la fuerza neta, en cada dirección coordenada i , que actúa sobre la superficie como un todo,

$$F_i^{total} = \sum_{e=1}^{N_e} (F_{M_i} A)_e \quad (3.150)$$

Con las expresiones de flujo neto de cantidad de movimiento se pueden obtener la presión superficial y el esfuerzo cortante, que equivalen respectivamente a

$$p = -\vec{F}_M \cdot \hat{n} = -(F_{M_x} n_x + F_{M_y} n_y + F_{M_z} n_z) \quad (3.151)$$

$$\tau_w = \vec{F}_M \cdot \hat{t} = F_{M_x} t_x + F_{M_y} t_y + F_{M_z} t_z \quad (3.152)$$

donde \hat{n} y \hat{t} son los vectores unitarios normal y tangente a la superficie.

Finalmente, el flujo neto de energía por unidad de área (el flujo de calor superficial) [28] corresponde a

$$q = \frac{W_p}{A \Delta t N_{samp}} \sum_{j=1}^{N_{ps}} \left[\left(\frac{1}{2} m_j C_j^2 + \epsilon_{rot,j} + \epsilon_{vib,j} \right)^{post} - \left(\frac{1}{2} m_j C_j^2 + \epsilon_{rot,j} + \epsilon_{vib,j} \right)^{pre} \right] \quad (3.153)$$

3.5 Código computacional dsmcFoam+

El código DSMC utilizado en esta investigación se llama dsmcFoam+ [68], y es un código mejorado de la versión disponible en OpenFOAM, llamado dsmcFoam. El código dsmcFoam ha sido desarrollado en el marco de la caja de herramientas de dinámica de fluidos computacional de código abierto OpenFOAM [69], y está disponible gratuitamente para su descarga bajo la licencia pública general GNU. Por su parte, el código dsmcFoam+ ha sido desarrollado por investigadores de la University of Glasgow en colaboración con investigadores de diversas universidades, entre ellos de la Universidad Técnica Federico Santa María.

Dentro de las principales características por las que originalmente fue seleccionado OpenFOAM, es su capacidad inherente para ampliarse. Esto, combinado con la escritura del código en C++ orientado a objetos, le brinda un diseño extensible que permite agregar funcionalidades adicionales a dsmcFoam+. OpenFOAM además proporciona potentes herramientas de mallado, como snappyHexMesh, lo que permite al usuario modelar geometrías 2D/3D arbitrarias utilizando mallas estructuradas y no estructuradas complejas. Por otra parte, cuenta con herramientas de medición de fuerza que proporcionan una forma muy útil de calcular las fuerzas externas que actúan sobre un cuerpo embestido por un flujo [68]. El post-procesamiento se lleva a cabo utilizando el software Paraview proporcionado por OpenFOAM, o con una variedad de otros software de postprocesamiento, como Tecplot.

Las características principales del código dsmcFoam+ incluyen:

- Capacidad de realizar simulaciones tanto estacionarias como transientes.
- Simulaciones de un número arbitrario de especies de gas, además de la posibilidad de efectuar simulaciones de flujo reactivo y no reactivo (modelo químico Quantumkinetic), e intercambio de energía interna entre las especies (modos rotacional, vibracional y electrónico).
- Generación automática de 8 sub-celdas por cada celda. Dentro de cada sub-celda se seleccionan los pares a ser probados para colisión, a fin de garantizar colisiones vecinas cercanas.
- Disponibilidad de diferentes condiciones de contorno, como modelos de flujo libre, vacío, cíclico y especular/difuso para interacciones gas-superficie.

- Incorporación de un método de descomposición de dominios para realizar simulaciones DSMC en paralelo. Si bien puede proporcionar un rendimiento notablemente mejorado en comparación con ejecutar el problema en serie en una CPU, la escalabilidad del código tiende a ser específica del problema y limitada. Sin embargo, es suficiente para convertirlo en una herramienta útil para simular problemas complejos de DSMC, del orden de decenas de millones de partículas durante períodos de tiempo razonables [68].
- Cuenta con equilibrio de carga en tiempo de ejecución, lo que permite garantizar que cada procesador tenga aproximadamente el mismo número de partículas DSMC. En cada intervalo de escritura, el número de partículas en cada procesador se compara con el ideal y si cae fuera de una tolerancia establecida por el usuario, la simulación se detiene temporalmente mientras se vuelve a hacer la descomposición del dominio para reequilibrar la carga. Después de esto, la simulación se retoma automáticamente desde la iteración en que se detuvo [68].

Para utilizar el solucionador `dsmcFoam+` en un problema determinado, se deben realizar un procedimiento cuyos principales pasos son:

1. Construir la malla computacional.
2. Configurar las propiedades de flujo libre, las condiciones de contorno y el tamaño del paso de tiempo.
3. Llenar la malla con partículas DSMC utilizando `dsmcInitialise`.
4. Iniciar la simulación usando el comando `dsmcFoamPlus`.
5. Habilitar el proceso de promediado en el tiempo una vez que se haya alcanzado una meseta en la energía total y en la cantidad de partículas del sistema.
6. Realizar el procesamiento posterior empleando el software Paraview u otro.

Capítulo 4

Verificación y validación

La mecánica computacional se entiende, en un sentido amplio, como el desarrollo y aplicación de métodos computacionales para la modelación y simulación de fenómenos y procesos asociados con ciencias de ingeniería mecánica, sobre las que se basan las soluciones a problemas específicos de la ingeniería. Este es un campo en constante crecimiento, y sus aplicaciones trascienden las fronteras de la ingeniería mecánica y se funden interdisciplinariamente con muchas otras especialidades de ingeniería y de las ciencias, teniendo así un impacto importante tanto en los círculos científicos como industriales. La mecánica computacional se sustenta en la computación científica, que ha pasado a ser considerada en las últimas décadas un pilar fundamental de la ciencia. La aplicación novedosa de técnicas computacionales conduce usualmente a la investigación y desarrollo de nuevos métodos en este campo [70].

El desarrollo de nuevos métodos o códigos computacionales requiere de un exhaustivo análisis de confiabilidad y de precisión de sus predicciones, y ha sido el foco de muchos estudios y debates en la comunidad de dinámica de fluidos. El nivel de precisión requerido de las simulaciones depende de los propósitos para los cuales serán utilizadas las simulaciones. Los códigos computacionales solo pueden considerarse confiables si pasan por un riguroso proceso de verificación y validación [71]. La verificación es el proceso de determinar si una simulación computacional representa con precisión el modelo conceptual y la solución al modelo, pero no se afirma la relación de la simulación con el mundo real. Por su parte, la validación se define como el proceso de determinar el grado en que un modelo es una representación precisa del mundo real desde la perspectiva de los usos previstos del

modelo. La verificación determina si el problema se ha resuelto correctamente, mientras que la validación determina si se ha resuelto el problema correcto [71].

En el contexto de DSMC, la verificación del código se basa principalmente en la precisión impuesta por cuatro restricciones:

1. El tamaño de la celda debe ser del orden del recorrido libre medio.
2. El paso de tiempo de simulación debe elegirse de modo que las partículas solo crucen una fracción de la longitud de celda promedio por paso de tiempo.
3. El número de partículas por celda debe ser aproximadamente constante para preservar las estadísticas de colisiones.
4. La dispersión estadística está determinada por el número de muestras.

Por su parte, la estrategia de validación de un código DSMC consiste en comparar los resultados obtenidos con dicho código, con otros resultados numéricos, analíticos o experimentales disponibles en la literatura.

Como ya se ha mencionado en capítulos anteriores, la presente investigación busca resolver la física de flujos de gas en régimen hipersónico enrarecido, con aplicación en reentrada atmosférica, por lo que es requerido que el código `dsmcFoam+` sea verificado y validado para este propósito. Posiblemente, la verificación y validación más deseable es la de realizar las comparaciones con datos reales derivados del vuelo. Una dificultad común al comparar los datos de vuelo en el régimen enrarecido, es la incertidumbre de las condiciones reales de la corriente libre, que afectará directamente la comparación de los resultados [72]. Además, contar con datos de reentrada atmosférica reales es sumamente complejo, y son asequibles casi exclusivamente por grandes agencias espaciales. Por su parte, el entorno hipersónico de baja densidad es difícil de reproducir experimentalmente, pero cuando se consigue, permite controlar las condiciones de la corriente libre y conocer distintos parámetros útiles para el desarrollo de simulaciones computacionales [72].

El diseño conceptual de desacelerador aerodinámico inflable utilizado en esta investigación tiene forma de cono romo, por lo que el proceso de validación y verificación del código computacional `dsmcFoam+` se realizó utilizando este tipo de geometría. El flujo sobre cuerpos romos a altas velocidades y altitudes está

asociado con complejas interacciones de flujo, y la determinación en forma precisa de la tasa de calentamiento, las fuerzas aerodinámicas, y el campo de flujo que rodea al cuerpo. A su vez, la caracterización de la región de estela es un factor clave para el éxito de una misión de reentrada atmosférica. Por estas razones, el modelo de cono romo expuesto a condiciones de régimen de flujo enrarecido e hipersónico, ha sido elegido como caso de estudio en numerosas investigaciones [30, 72, 73, 74, 75, 76, 77, 78, 79, 80]. Así, se usan las investigaciones experimentales efectuadas sobre un cono romo de 70° con geometría idéntica en proporciones a la de la sonda Mars Pathfinder [76, 77] (Figura 5.12a), y cuyas investigaciones se llevaron a cabo en el túnel de viento de baja densidad SR3 del Centre National de la Recherche Scientifique (CNRS), ubicando en Meudon, Francia, y presentados por J. Allègre, D. Bisch, y J. C. Lengrand [81, 82, 83].

Además, se emplearon investigaciones numéricas desarrolladas con un código DSMC de mayor trayectoria y reputación. Específicamente, se utilizaron las investigaciones desarrolladas en el Johnson Space Flight Center de NASA con el código computacional DAC (DSMC Analysis Code), presentados por J. N. Moss, V. K. Dogra y R. G. Wilmoth [73], y cuyas condiciones de simulación reprodujeron los experimentos llevados a cabo en el túnel de viento SR3. El código DAC requiere de la contratación de licencia otorgada por NASA para su uso [84], y cuenta con algunas diferencias con el código `dsmcFoam+`, como son; generar automáticamente la discretización espacial y refinamiento local, por medio de un proceso iterativo donde el preprocesador sondea una cuadrícula inicial y actualiza la discretización, de forma que todas las celdas cuenten con una cantidad similar de partículas; la determinación automática del tamaño del paso de tiempo en cada celda; y que las condiciones de los límites de la superficie soportan temperaturas de pared variables.

El grupo CNRS empleó tres condiciones experimentales diferentes, cada una con el objetivo de determinar propiedades diferentes y cuyos modelos de sonda se encontraron a distintas temperaturas durante las mediciones. En el primer experimento se realizaron mediciones de la distribución de densidad del flujo, las cuales tuvieron una precisión estimada en 10% (excepto en la región que abarca la onda de choque, caracterizada por altos gradientes de densidad y una mayor incertidumbre), y cuyo modelo de sonda fue hecho de latón y se encontró a una temperatura de 290 K [81]. En un segundo experimento se midieron las fuerzas aerodinámicas por medio de una balanza externa, presentándose una incertidum-

bre global máxima de aproximadamente 3%, y cuyo modelo de sonda se estaba hecho de aluminio y se encontró a 350 K [82]. Un tercer experimento se efectuó para determinar la transferencia de calor sobre la superficie, para lo cual se utilizaron termocuplas de cromo-aluminio empotrados en nueve ubicaciones a lo largo de la superficie del modelo. El modelo empleado se construyó de acero, la temperatura superficial se mantuvo en torno a 300 K y las mediciones tuvieron una incertidumbre máxima estimada en 10% [83]. Las dimensiones de los modelos experimentales se muestran en la Figura 5.12a, caracterizados por un diámetro de base de la parte cónica de 0.05 m y de la parte cilíndrica de 0.0125 m .

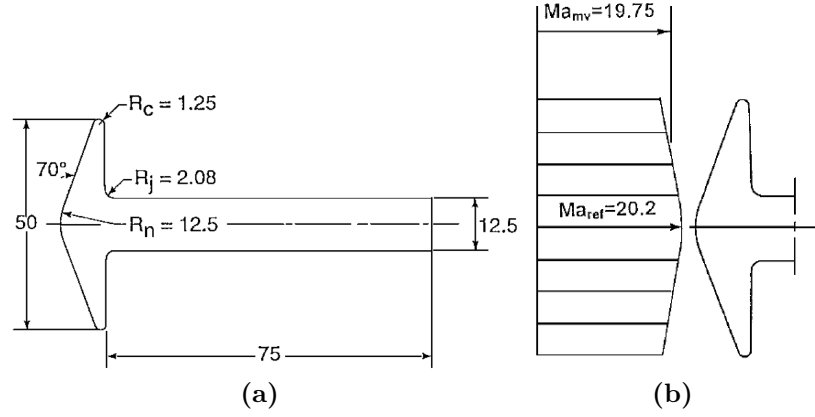


Figura 4.1: (a) Dimensiones del modelo de la sonda Mars Pathfinder (unidades en milímetros). (b) Gradiente de flujo aguas arriba en experimentos realizados en el túnel de viento SR3.

En el túnel de viento de baja densidad SR3 de CNRS se desarrollaron tres casos que se diferenciaron en el nivel de rarefacción del gas. En este trabajo se estudia el primero de estos casos, que consiste en un flujo no reactivo y uniforme de nitrógeno que embiste a los tres modelos de la sonda. El flujo aguas arriba de los modelos de sonda consta de un gradiente de flujo libre transversal, como se muestra en la Figura 5.12. Así, el flujo libre se caracteriza por un número de Mach nominal $Ma_{ref} = 20.2$ y un valor medio $Ma_{mv} = 19.75$. Se considera además, que los modelos de la sonda se encuentran a un ángulo de ataque nulo respecto del flujo libre. En la Tabla 4.1 se presentan las condiciones de flujo libre con las que se experimentó, y que fueron utilizadas en las simulaciones desarrolladas tanto con el código DAC como con el código dsmcFoam+. Cabe mencionar que en las simulaciones DAC se empleó el número de Mach nominal para describir el flujo

libre, con un perfil de velocidad transversal constante, por lo que a fin de realizar simulaciones comparativas se usó el mismo valor en las simulaciones dsmcFoam+.

Tabla 4.1: Condiciones de flujo libre.

Parámetro	Símbolo	Valor	Unidad
Velocidad	V_∞	1502.56	m/s
Temperatura	T_∞	13.316	K
Concentración	n_∞	3.719×10^{20}	m^{-3}
Densidad	ρ_∞	1.73×10^{-5}	kg/m^3
Presión	p_∞	6.833×10^{-2}	Pa
Recorrido libre medio	λ_∞	1.691×10^{-3}	m
Viscosidad dinámica	μ_∞	7.279×10^6	Ns/m ²
Número Knudsen global	Kn_d	0.034	
Número Reynolds global	Re_d	178.6	

Las simulaciones computacionales con dsmcFoam+ fueron realizadas con la implementación del modelo fenomenológico Larsen-Borgnakke [67] que controla el intercambio de energía entre los modos internos. Las colisiones moleculares se modelaron utilizando el modelo de colisión molecular “Variable Hard-Sphere” (VHS) [61], y la técnica de muestreo de colisiones “No-Time-Counter” (NTC) [62]. Además, los parámetros de simulación para N_2 son un diámetro de referencia $d_{ref} = 4.17 \times 10^{10} m$, que corresponde al diámetro molecular VHS a la temperatura de referencia $T_{ref} = 273 K$ y el exponente de temperatura del coeficiente de viscosidad $\omega = 0.74$.

La geometría se posiciona a un ángulo de ataque de cero grados, por lo que es posible usar un cuarto del dominio computacional y aplicar una condición de frontera de simetría en las dos caras de corte I de la Figura 4.2a. La condición de frontera de simetría implica que los gradientes de flujo normales a las superficies I son cero, lo que es equivalente a una interacción gas-superficie de tipo reflexión especular. Por su parte, en la cara II se especifican condiciones de corriente libre, con partículas generadas y eliminadas en esta frontera. Finalmente, en la cara III se define una condición de vacío, en la cual las partículas son eliminadas del dominio computacional dadas las altas velocidades del flujo. La condición límite en la superficie de la geometría (cara IV) se consideró como una interacción gas-superficie de tipo difusa, con acomodación térmica completa a la temperatura superficial, la cual se ajustó en 290 K, 300 K y 350 K para las mediciones de densidad, transferencia de calor y fuerzas aerodinámicas, respectivamente. El

dominio computacional utilizado para el cálculo se hace lo suficientemente grande como para que las perturbaciones generadas por la geometría no alcancen los límites aguas arriba y laterales, donde se especifican las condiciones de la corriente libre. Así, el dominio computacional se extiende 0.02 m aguas arriba de la sonda y 0.08 m en las direcciones y y $-z$, como se observa en la Figura 4.2b.

Por último, en la Figura 4.3 se muestra un sistema de referencia a lo largo de la superficie, que será útil para presentar los resultados de las cantidades sobre la superficie. El sistema de referencia parte en el punto de estancamiento del flujo ($s/R_n = 0$), y recorre las posiciones de la superficie (s) con valores adimensionales respecto del radio de punta (R_n) de la sección cónica.

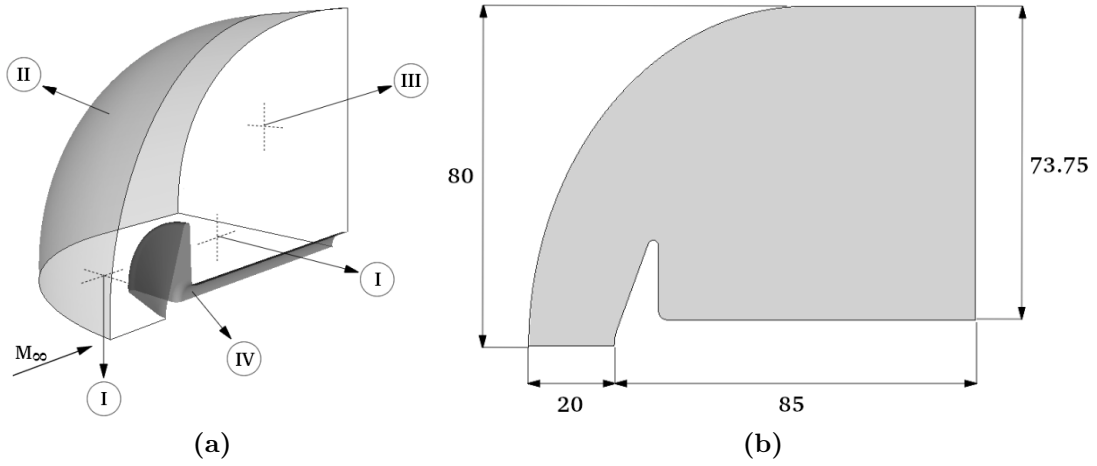


Figura 4.2: Dominio computacional. (a) Condiciones de frontera y (b) dimensiones (unidades en milímetros).

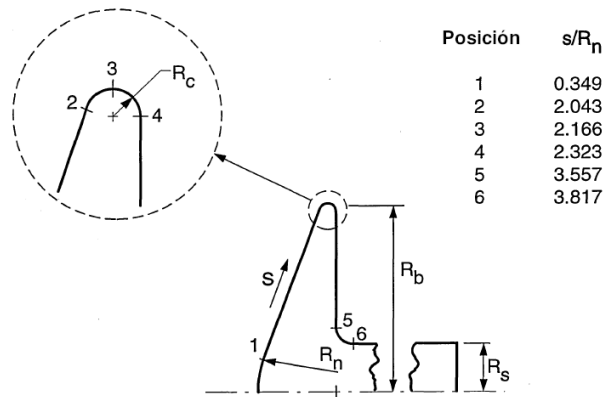


Figura 4.3: Sistema de referencia sobre la superficie (s/R_n).

4.1 Validación del código dsmcFoam+

El proceso consiste en validar el código computacional dsmcFoam+ para su uso en un tipo de geometría de uso común en ingresos atmosféricos, a la vez que se busca generar confianza en el análisis de flujos hipersónicos y enrarecidos. Para ello, se realizan simulaciones de los modelos de sonda Mars Pathfinder, con las mismas dimensiones y condiciones de flujo libre utilizadas en los experimentos desarrollados en el túnel de viento SR3 de CNRS, y reproducidas en forma numérica por NASA con su código DAC. Los resultados obtenidos con el código dsmcFoam+ se comparan con estos datos disponibles en la literatura.

Los parámetros computacionales de las simulaciones del proceso de validación consisten en una malla computacional formada por 3.96 millones de celdas de tipo hexaédricas y poliédricas, con un promedio de 3.23 partículas DSMC simuladas por celda. El mallado es mayoritariamente hexaédrico y uniforme, con un tamaño de celda inferior a un tercio del recorrido libre medio del flujo libre. Por su parte, en las cercanías de la superficie de la geometría se emplean celdas poliédricas para capturar la geometría de la superficie, de igual forma que en el proceso de verificación. El paso de tiempo usado equivale a 1×10^{-8} s, y dependiendo del caso de estudio (mediciones de densidad, fuerzas aerodinámicas y transferencia de calor), se requirieron de distintas cantidades de iteraciones para alcanzar una dispersión tolerable de los resultados. La cantidad de iteraciones, cantidad de procesadores utilizados, y tiempo total de simulación requerido en cada caso de medición, se muestran en la Tabla 4.2.

Tabla 4.2: Parámetros de simulación en cada caso de estudio.

Parámetros de simulación	Densidad	Transferencia de calor	Fuerzas Aerodinámicas
Temperatura superficial [K]	290	300	350
N° de celdas de la malla	3965063	3965063	3965063
Paso de tiempo [s]	1.0×10^{-8}	1.0×10^{-8}	1.0×10^{-8}
N° de partículas por celda	3.23	3.23	3.23
N° de iteraciones	130000	300000	200000
N° de procesadores usados	40	20-40	40
Tiempo de simulación [Hrs]	89.2	178.8	172.0

Los resultados de NASA con el código DAC utilizan una temperatura de pared de 300 K, por lo que para llevar a cabo las comparaciones con estos resultados,

se utilizaron las mismas simulaciones realizadas con el código dsmcFoam+ para comparar los resultados experimentales de la transferencia de calor obtenidos en CNRS. Por tanto, los parámetros de simulación corresponden a los presentes en la tercera columna de la Tabla 4.2.

Como se menciono anteriormente, la precisión de las mediciones del campo de densidad del flujo medidas experimentalmente en SR3, se estima en 10 %, excepto en la región que abarca la onda de choque. Con esto en consideración, en la Figura 4.4 se comparó la distribución de densidad experimental del flujo obtenido en SR3, con el resultado obtenido empleando el código dsmcFoam+. Ambos resultados se encuentran adimensionalizados con respecto a la densidad de flujo libre. Se observa que existe una buena concordancia entre ambos resultados, numérico y experimental.

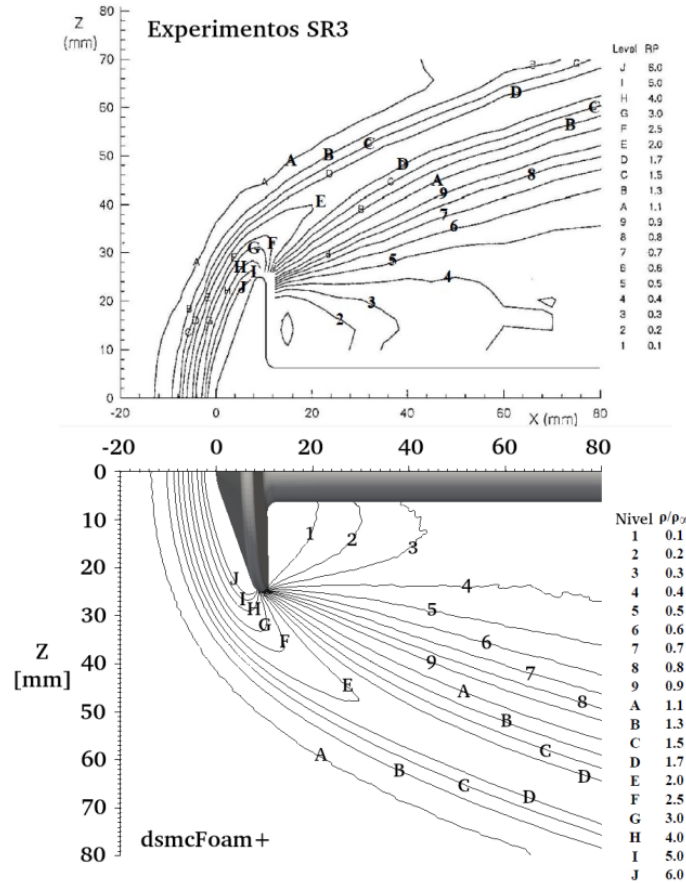


Figura 4.4: Distribución de densidad adimensional (ρ/ρ_∞). Comparación entre resultados con el código dsmcFoam+ y los experimentos en SR3.

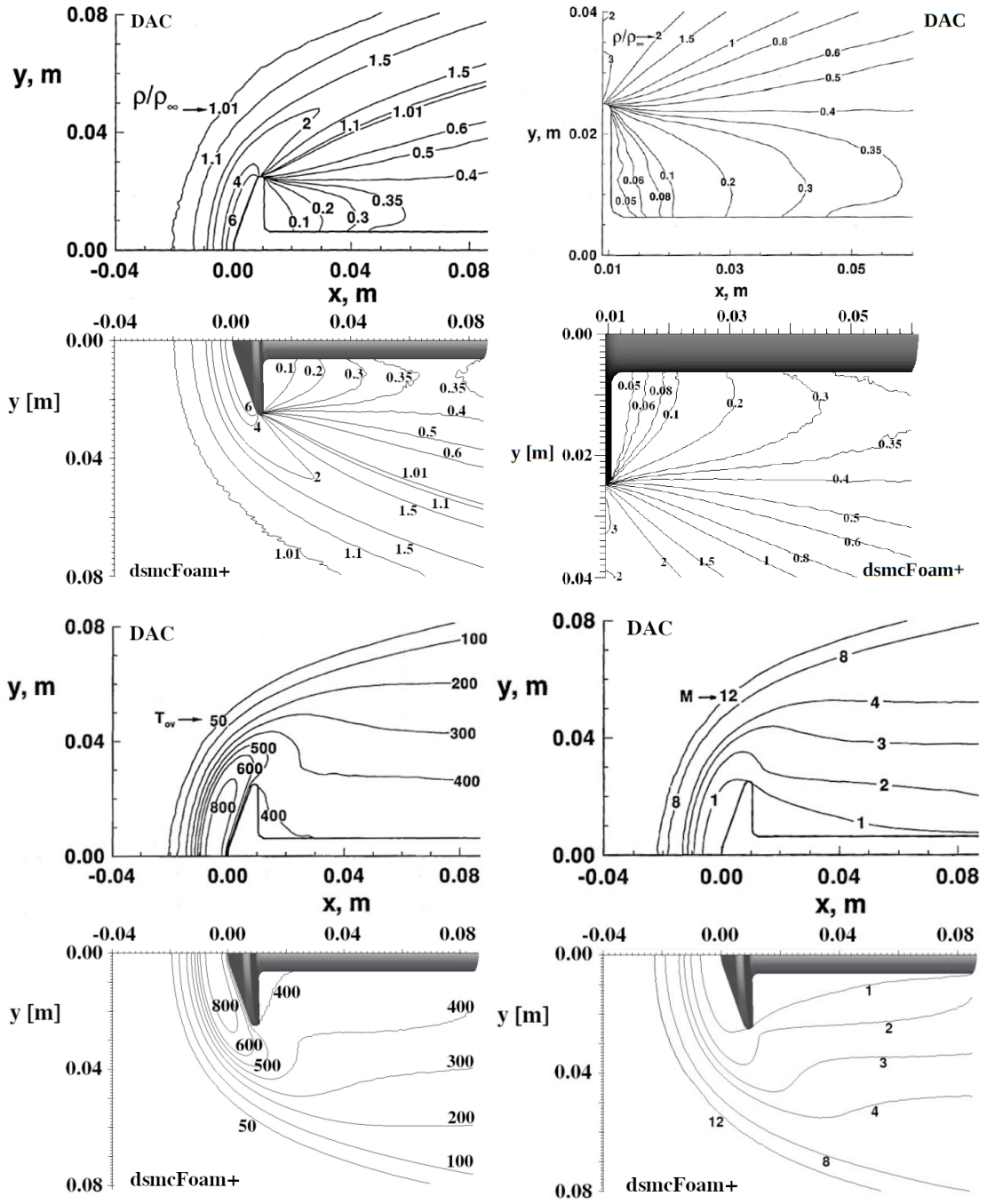


Figura 4.5: Distribuciones de densidad adimensional (ρ/ρ_∞), temperatura total (T_{ov}) y número de Mach (M). Comparación entre las simulaciones dsmcFoam+ y DAC.

En la Figura 5.15 se realiza una comparación de distintas distribuciones de propiedades primarias del flujo, obtenidos con los códigos DAC y dsmcFoam+. Específicamente, en la parte superior se comparan la distribución de densidad adimensional (ρ/ρ_∞), a la izquierda se muestran los resultados en el dominio completo, mientras que a la derecha se presentan los resultados en mayor detalle de la zona posterior al escudo térmico, caracterizado por una alta expansión del flujo. Por su parte, en la parte inferior izquierda de la Figura se compara la distribución de la temperatura total (T_{ov}), mientras que en la parte inferior derecha se compara la distribución del número de Mach del flujo (M). Los resultados muestran un buen acuerdo entre los resultados de ambos códigos computacionales.

En las Figuras 4.7, 4.8 y 4.9, se presentan los perfiles de densidad (ρ/ρ_∞), temperatura (T_{ov}/T_∞) y velocidad (V_x/V_∞), respectivamente (adimensionalizados con respecto a los valores del flujo libre), medidos en forma normal a la superficie en las posiciones X que se muestran en la Figura 4.6a. Se comparan los resultados obtenidos con los códigos DAC y dsmcFoam+. Se observa como existe una buena concordancia entre los resultados obtenidos con ambos códigos, salvo en los valores de la densidad máxima alcanzada en el hombro de la sonda ($X = 0.0095 \text{ m}$), zona caracterizada por una alta expansión del flujo, y la presencia de fuertes gradientes de las propiedades macroscópicas. Es por ello que diferencias en el mallado entre ambas simulaciones pueden tener cierta influencia en la estructura del campo de flujo.

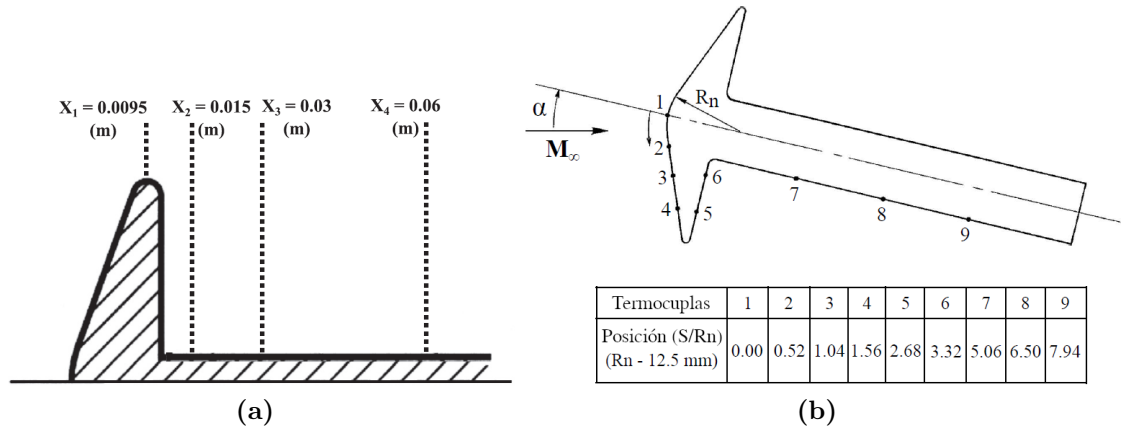


Figura 4.6: (a) Posiciones (X) en dirección normal a la superficie para mediciones de propiedades del flujo. (b) Ubicaciones de termocuplas para las mediciones experimentales de la transferencia de calor.

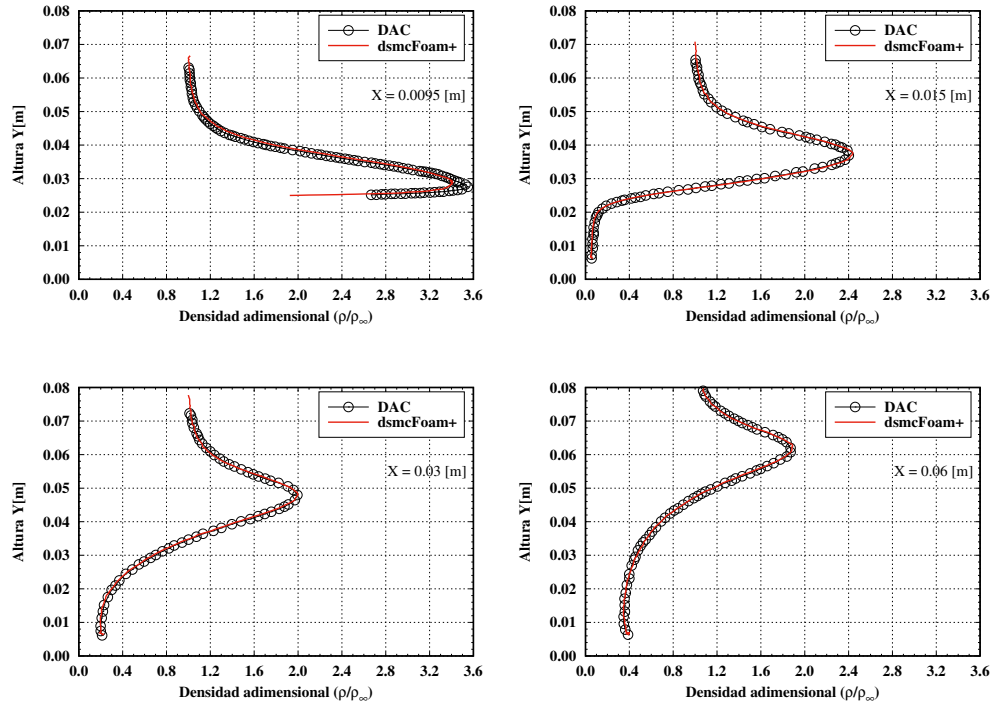


Figura 4.7: Perfiles de densidad (ρ/ρ_∞) de simulaciones DAC y dsmcFoam+.

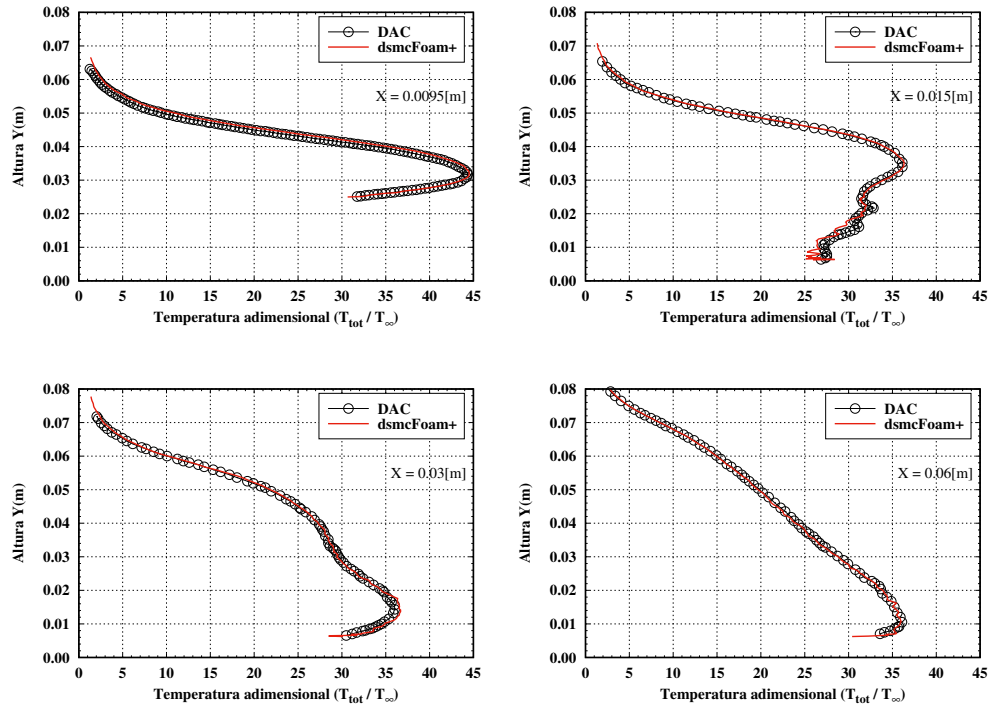


Figura 4.8: Perfiles de temperatura (T_{ov}/T_∞) de simulaciones DAC y dsmcFoam+.

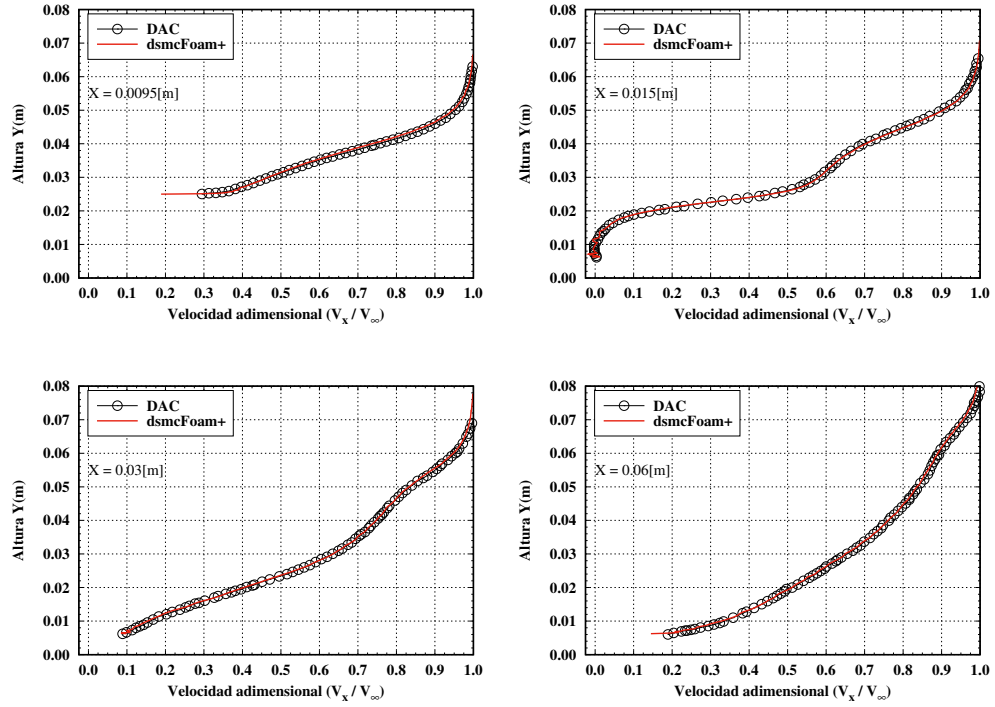


Figura 4.9: Perfiles de velocidad (V_x/V_∞) de simulaciones DAC y dsmcFoam+.

En la Figura 4.10 se comparan las líneas de corriente obtenidas con los códigos DAC y dsmcFoam+. Se observan resultados muy similares para ambas simulaciones, pero difieren en que en los resultados con DAC se ha formado una zona de recirculación del flujo, mientras que en los resultados con dsmcFoam+ esta recirculación no se ha formado del todo. Esto se puede deber a que en esta zona el flujo se expande en forma considerable, pudiendo existir una falta de partículas y por ende de colisiones que generen que se desarrolle por completo la estructura del flujo. Esto se podría solucionar aumentando el número total de iteraciones, aunque pueden llegar a ser necesarias una cantidad importante de iteraciones para conseguir este objetivo.

En la Figura 4.11 se comparan las propiedades aerodinámicas sobre la superficie del modelo de sonda, en el lado izquierdo para la superficie completa ($0 \leq s/R_n \leq 9$), mientras que en el lado derecho se muestra en mayor detalle los resultados de la parte cónica ($0 < s/R_n \leq 2.323$). El coeficiente de transferencia de calor obtenido con el código dsmcFoam+, se compara con los resultados experimentales de CNRS y los resultados numéricos obtenidos por NASA

con el código DAC. Por su parte, el coeficiente de presión y el coeficiente de fricción, se comparan solo con los resultados del código DAC, dado que no existen datos experimentales. Se observa un buen nivel de acuerdo entre los resultados tanto numéricos como experimentales. Existe una diferencia entre los resultados numéricos y la medición experimental de la termocupla 4, ubicada en las cercanías del hombro de la sonda (Figura 5.12b). Esta diferencia supera la incertidumbre máxima de 10% de las mediciones, y puede deberse a que las condiciones de borde no representen a cabalidad las condiciones experimentales reales. Como se mencionó anteriormente, el flujo libre se definió basándose en el número de Mach nominal ($Ma_{ref} = 20.2$ constante), sin reproducir el perfil real de la Figura 5.12, por lo que esta velocidad adicional en las cercanías del hombro de la sonda podría estar sobrevalorando la transferencia de energía en esta zona. Otro factor que podría generar esta diferencia es la consideración de temperatura superficial constante como condición de frontera, siendo que en realidad la temperatura debería ser variable en distintas zonas de la superficie del modelo de sonda.

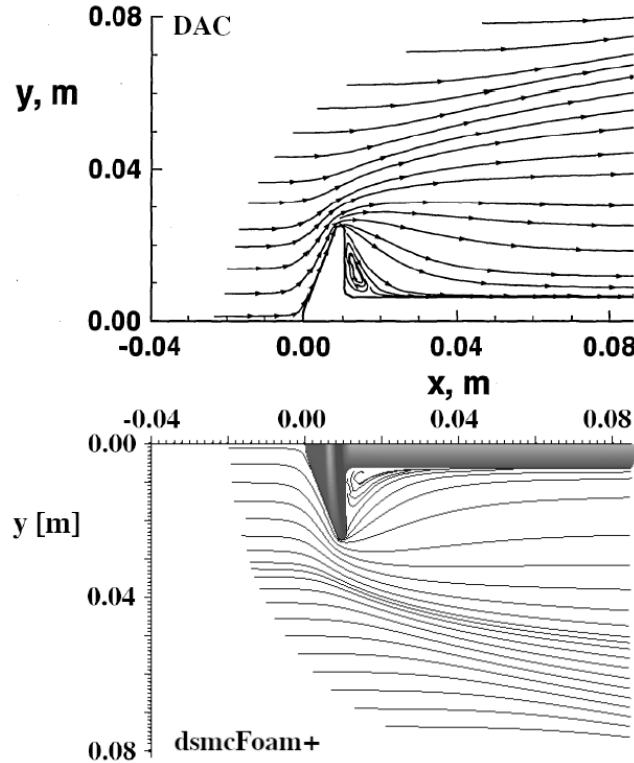


Figura 4.10: Comparación de las líneas de corriente obtenidas con el código dsmcFoam+ y con el código DAC.

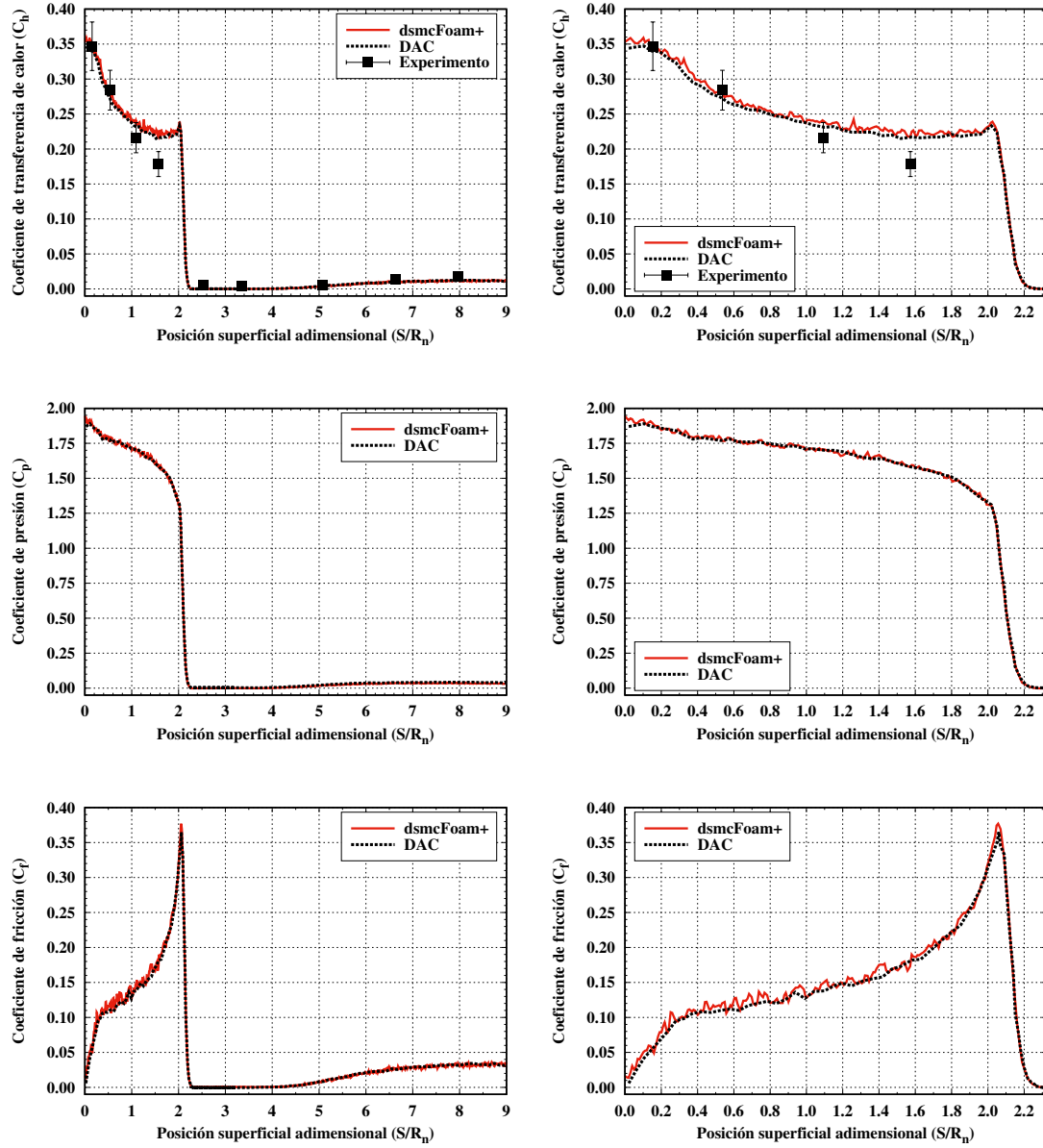


Figura 4.11: Coeficiente de transferencia de calor (C_h) a lo largo de la superficie de la sonda Mars Pathfinder. Comparación entre resultados con el código dsmcFoam+ a distinta cantidad de iteraciones, con resultados del código DAC.

Finalmente, se determinó el coeficiente de arrastre con el código dsmcFoam+, equivalente a 1.658. Las mediciones experimentales desarrolladas en el túnel de viento SR3 arrojaron un valor de 1.657, con una incertidumbre en las mediciones que no superó el $\pm 3\%$. Por lo tanto, la diferencia entre los resultados numérico y experimental fue de 0.07%, que se encuentra muy por debajo del 3%, por lo que la simulación fue bastante precisa.

4.2 Verificación del código dsmcFoam+

Para realizar el proceso de verificación del código dsmcFoam+ se utilizaron mediciones de las propiedades aerotermodinámicas sobre la superficie del modelo de sonda, las cuales corresponden al coeficiente de presión (C_p), al coeficiente de fricción (C_f) y al coeficiente de transferencia de calor (C_h). Este proceso se efectuó comparando los resultados de las propiedades sobre la superficie, al hacer variar distintos parámetros de simulación. Estos parámetros de simulación incluyen la discretización espacial, discretización temporal, cantidad de partículas DSMC por celda, y el número de pasos de tiempo o iteraciones.

Para cada parámetro en estudio se consideran tres casos de análisis, donde se hizo variar el parámetro de estudio y el resto se mantuvo constante. Los valores de los coeficientes C_p , C_f y C_h se miden a lo largo de la superficie del modelo de sonda, según el sistema de referencia presentado en la Figura 4.3.

4.2.1 Efecto de la discretización espacial

Como se mencionó en la sección 3.4 (correspondiente al método DSMC), en las simulaciones DSMC el tamaño de las celdas computacionales deben ser del orden o más pequeño que el recorrido libre medio local en la dirección de los gradientes primarios (temperatura, presión, velocidad). Esto implica que en las proximidades de la superficie del cuerpo, el tamaño de las celdas debe ser lo suficientemente pequeño para capturar adecuadamente los empinados gradientes macroscópicos, y por ende, capturar adecuadamente la física del campo de flujo cerca de la pared.

Para analizar el efecto del tamaño de las celdas sobre los coeficientes de transferencia de calor, de presión y de fricción, se realizan simulaciones utilizando tres niveles de refinamiento de la malla. Se hacen estudios con una malla estándar con celdas hexaédricas de lado de un medio del recorrido libre medio $\lambda/2 = 8.46 \times 10^{-4}$

[m], con una malla fina con celdas de lado de un tercio del recorrido libre medio $\lambda/3 = 5.64 \times 10^{-4}$ [m] y con una malla gruesa con lado de un recorrido libre medio $\lambda = 1.69 \times 10^{-3}$ [m]. Con esto, la malla computacional en la dirección X se compone de 62, 124 y 186 celdas, para la malla gruesa, estándar y fina, respectivamente. Por su parte, en las direcciones Y y $-Z$, la malla se compone de 47, 95 y 142 celdas, respectivamente. En las cercanías de la superficie del modelo de sonda se realiza un refinamiento que reduce el tamaño de las celdas a la mitad que en el resto del dominio computacional, lo que permite reproducir mejor la forma de dicha superficie. En la Figura 4.12 se muestran las tres mallas computacionales utilizadas para el estudio. El total de celdas computacionales y el detalle de los distintos parámetros de simulación se presenta en la Tabla 4.3, donde se muestra como el resto de los parámetros de simulación (tamaño del paso de tiempo, número de partículas DSMC por celda y número de iteraciones) se mantienen constantes para los tres casos de estudio.

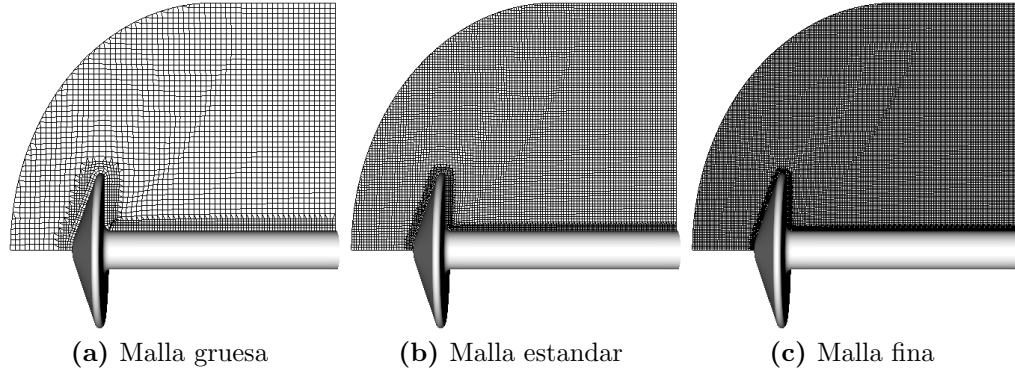


Figura 4.12: Mallas computacionales usadas en el estudio de la discretización espacial.

Tabla 4.3: Parámetros de simulación al variar el nivel de refinamiento de la malla.

Parámetros de simulación	Malla computacional		
	Gruesa	Estandar	Fina
N° de celdas de la malla	98067	741452	2384392
Tamaño del paso de tiempo [s]	6.60×10^{-8}	6.60×10^{-8}	6.60×10^{-8}
N° de partículas por celda	12	12	12
N° de iteraciones	100000	100000	100000
N° de procesadores usados	4	40	40
Tiempo de simulación [Hrs]	60.0	48.4	212.4

El coeficiente de transferencia de calor, el coeficiente de presión y el coeficiente de fricción se presentan en la Figura 4.13. En el lado izquierdo se muestran los resultados hasta $s/R_n = 9$ (o sea, incluyendo gran parte de la sección cilíndrica del modelo de sonda), mientras que en el lado izquierdo se muestran los resultados solo sobre la parte cónica del modelo de sonda, esto es, hasta la posición 4 ($s/R_n = 2.323$) según la Figura 4.3. Esta distinción se hace dado que es en esta zona donde existen diferencias apreciables entre los resultados obtenidos, siendo prácticamente imperceptibles en la zona cilíndrica del modelo.

En la Figura 4.13 se observa como los resultados utilizando la malla estándar y la malla fina son muy similares, pero en el caso de la malla gruesa los valores del coeficiente de transferencia de calor y del coeficiente de fricción son levemente mayores que los obtenidos con las mallas estándar y fina. Esto se debe a que la malla gruesa se forma de celdas de lado del orden del recorrido libre medio del flujo libre, encontrándose en el límite de las buenas prácticas del método DSMC.

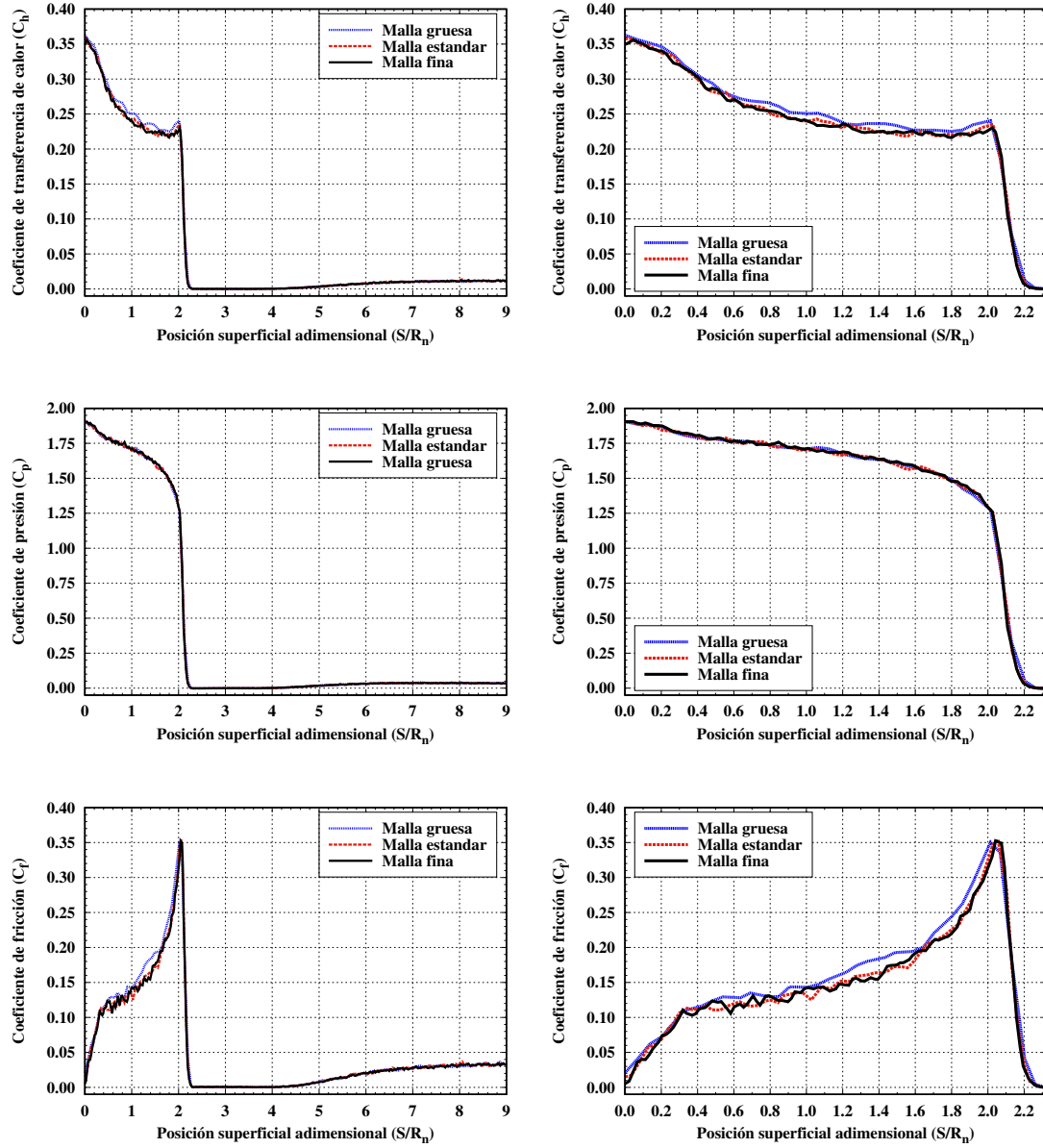


Figura 4.13: Influencia del nivel de refinamiento de la malla computacional en las propiedades aerotermodinámicas sobre la superficie del modelo de sonda (izquierda), y con mayor detalle sobre su parte cónica (derecha).

4.2.2 Efectos de la discretización del tiempo

En simulaciones DSMC el paso de tiempo debe ser menor que el tiempo medio de colisión local, que equivale a $\tau_{coll} = \lambda/V_{mp}$, donde λ es el recorrido libre medio y V_{mp} es la velocidad térmica más probable. Esta condición permite el desacoplamiento entre el movimiento y las colisiones intermoleculares. Además, si Δt es demasiado grande, las partículas pueden atravesar muchas celdas durante este intervalo de tiempo y, en consecuencia, los resultados pueden ser inexactos. Por otro lado, un paso de tiempo demasiado pequeño deriva en un mayor costo computacional.

Se examina la influencia del tamaño del paso de tiempo en las propiedades aerotermodinámicas sobre la superficie del modelo de sonda. Se define como caso estándar un paso de tiempo de 6.6×10^{-8} [s], determinado como una fracción del tiempo de residencia (Δt_{res}) de una partícula dentro de una celda. El tiempo de residencia corresponde a $\Delta t_{res} = \Delta x/V_p$, donde Δx es el tamaño de la celda y V_p es una velocidad característica de las partículas, generalmente expresada como la suma de la velocidad de flujo libre más la velocidad térmica más probable $V_p = V_\infty + V_{mp}$. Por su parte, para el análisis de sensibilidad se definen dos casos de comparación, el primero con un paso de tiempo pequeño equivalente a la mitad del paso de tiempo del caso estándar, o sea de 3.3×10^{-8} [s], y el segundo caso con un paso de tiempo grande equivalente al doble del paso de tiempo estándar, de 1.32×10^{-7} [s]. El resto de los parámetros de simulación permanecen constantes en cada caso y se muestran en detalle en la Tabla 4.4. En ellos, la malla es la del caso estándar, al igual que el número de partículas por celda y el número de iteraciones.

Tabla 4.4: Parámetros de simulación del estudio del tamaño del paso de tiempo.

Parámetros de simulación	Tamaño del paso de tiempo		
	Pequeño	Estandar	Grande
N° de celdas de la malla	741452	741452	741452
<i>Tamaño del paso de tiempo [s]</i>	3.30×10^{-8}	6.60×10^{-8}	1.32×10^{-7}
N° de partículas por celda	12	12	12
N° de iteraciones	100000	100000	100000
N° de procesadores usados	40	40	40
Tiempo de simulación [Hrs]	89.2	48.4	27.0

En la Figura 4.14 se presentan los resultados obtenidos de los coeficientes aerotermodinámicos, a la izquierda sobre la superficie del modelo de sonda, y a la derecha el detalle sobre la parte cónica del modelo. Los resultados son muy similares para los tres pasos de tiempo definidos, por lo que se verifica que las propiedades bajo estudio son independientes del paso de tiempo, siempre que se respetan los requisitos de paso de tiempo y tamaño de celda, propios de las buenas prácticas del método DSMC.

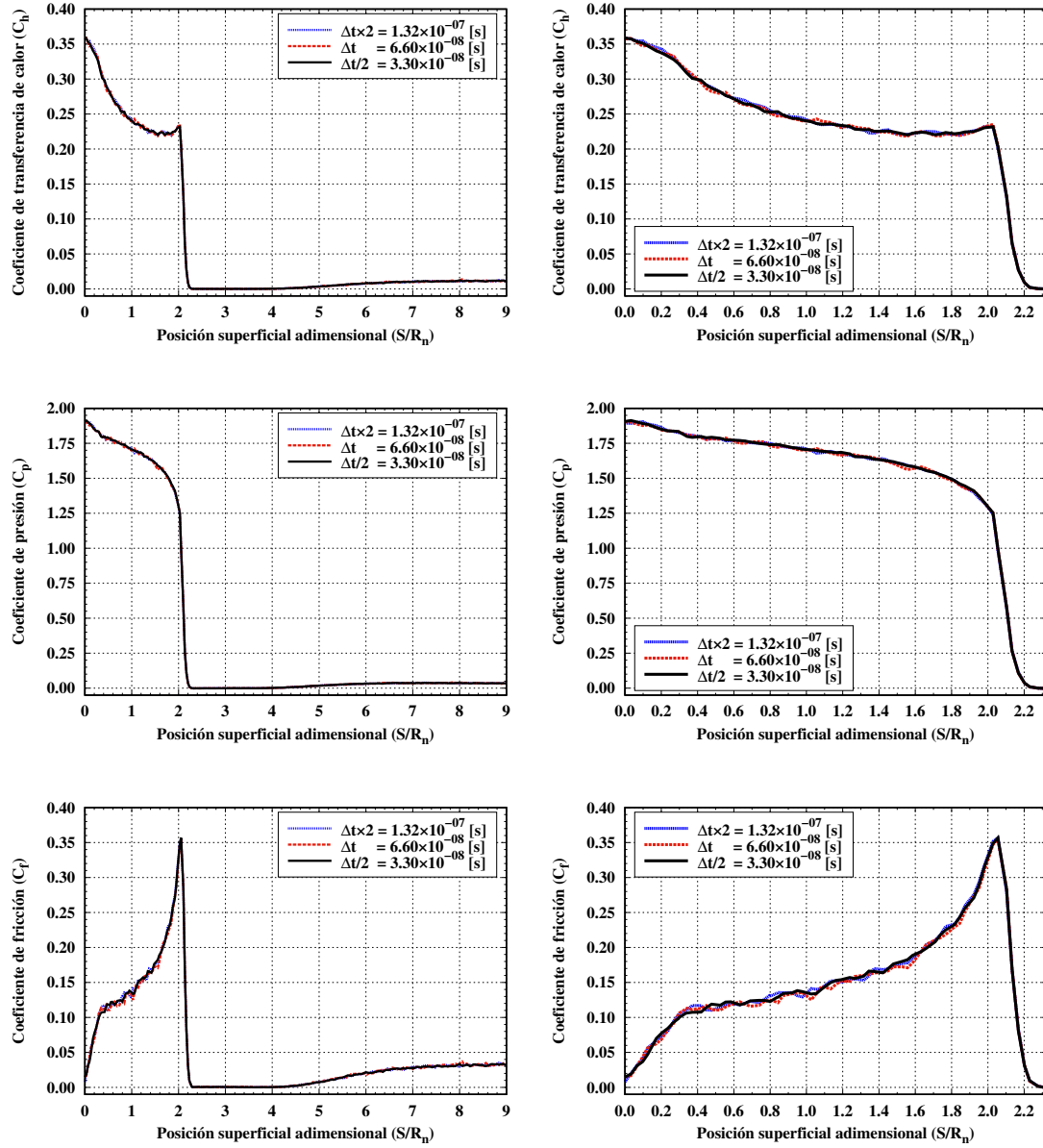


Figura 4.14: Influencia de la variación del paso de tiempo en las propiedades aerodinámicas sobre la superficie del modelo de sonda (izquierda), y con mayor detalle sobre su parte cónica (derecha).

4.2.3 Efecto de la cantidad de partículas por celda

En las simulaciones DSMC, las colisiones intermoleculares ocurren en cada celda computacional y deben emplearse partículas suficientes para reducir el error estadístico durante el proceso de muestreo. Sin embargo, el uso de una gran cantidad de partículas aumenta enormemente el costo computacional. Muchos autores han estudiado el equilibrio entre el costo computacional y la precisión, con valores que van desde las 8 partículas DSMC por celda hasta valores que alcanzan las 120 [15-161].

En este trabajo se hace un estudio para estimar la influencia del número de partículas por celda promedio simuladas, variando este parámetro y comparar los coeficientes de transferencia de calor, presión y fricción. Se consideran tres casos, un caso estándar que contempla un promedio de 12 partículas por celda, un caso con una menor cantidad de, en promedio, 8 partículas por celda, y otro caso con mayor cantidad de 16 partículas por celda en promedio. Todos estos casos fueron llevados a cabo con la malla estándar que contiene un total de 741452 celdas, por lo que el número total de partículas computacionales simuladas corresponden a 8.90×10^6 , 5.93×10^6 y 1.19×10^7 , para los casos estándar, de menor cantidad y de mayor cantidad, respectivamente. Los detalles de los distintos parámetros de simulación se muestran en la Tabla 4.5.

Tabla 4.5: Parámetros de simulación del estudio de la cantidad de partículas por celda.

Parámetros de simulación	Número de partículas por celda		
	Menor	Estandar	Mayor
N° de celdas de la malla	741452	741452	741452
Tamaño del paso de tiempo [s]	6.60×10^{-8}	6.60×10^{-8}	6.60×10^{-8}
<i>N° de partículas por celda</i>	8	12	16
N° de iteraciones	100000	100000	100000
N° de procesadores usados	40	40	40
Tiempo de simulación [Hrs]	31.9	48.4	63.9

Los efectos de este estudio sobre los coeficientes de transferencia de calor, presión y fricción, se muestran en la Figura 4.15. Se observa que no existieron diferencias importantes en los resultados al hacer variar la cantidad promedio de partículas DSMC por celda, por lo que las simulaciones resultantes son esencialmente independientes de este parámetro incluso para valores bajos.

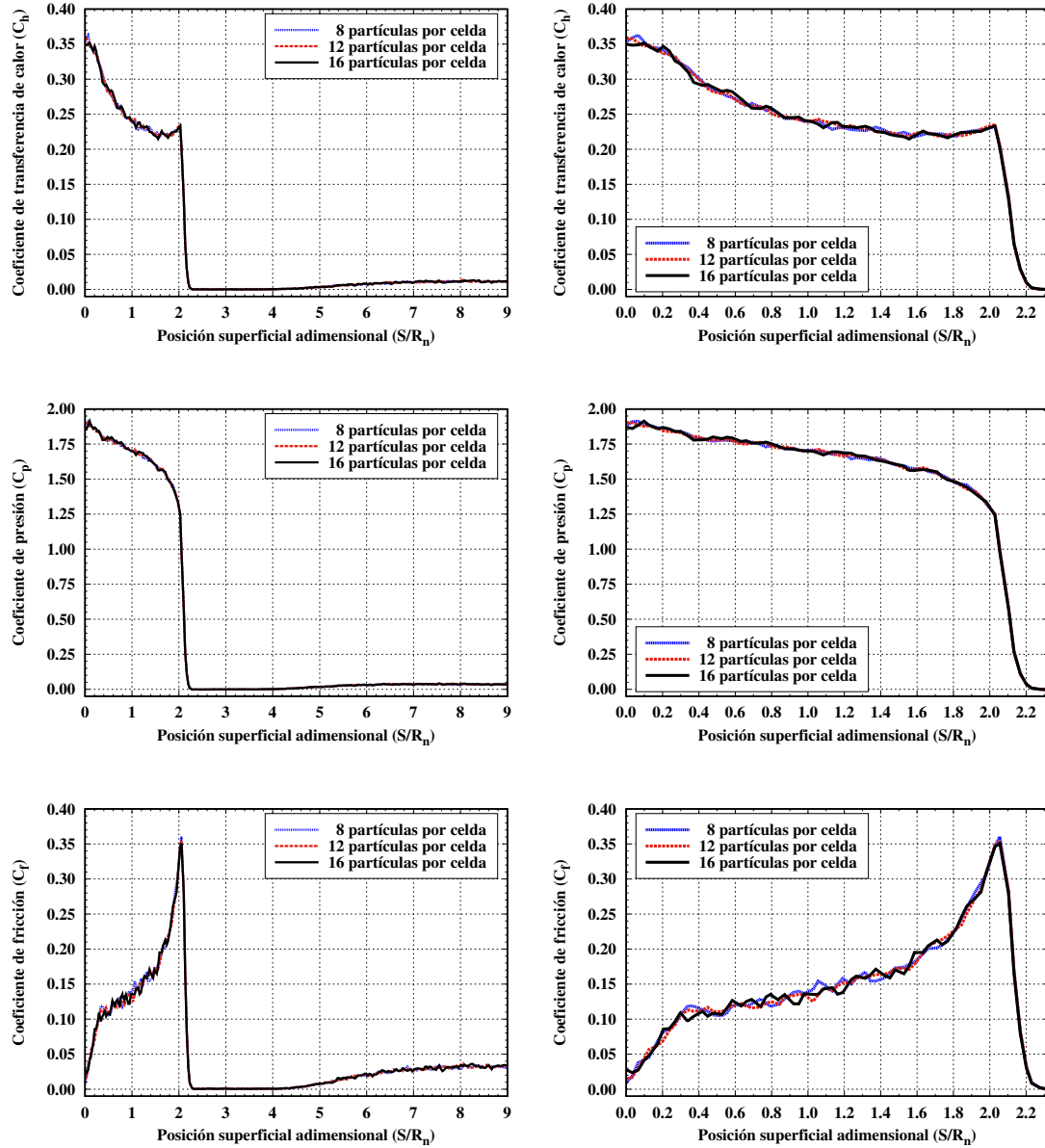


Figura 4.15: Influencia de la variación de la cantidad de partículas DSMC por celda, en las propiedades aerodinámicas sobre la superficie del modelo de sonda (izquierda), y con mayor detalle sobre su parte cónica (derecha).

4.2.4 Efectos del número de iteraciones

Las propiedades macroscópicas del flujo se obtienen muestreando el número total de partículas dentro de cada celda, durante el tiempo total de muestreo. La magnitud del error muestral es proporcional a $1/\sqrt{N_{samp}}$, con N_{samp} el número de muestras y, por tanto, disminuye como la raíz cuadrada del tamaño de la muestra. Es por ello que el número de muestras debe ser suficiente para minimizar el error estadístico, pero que a su vez satisfaga la capacidad y tiempos de cómputo de los que se dispone. Para ello, se realizan simulaciones con 100000, 200000 y 300000 pasos de tiempo o iteraciones, manteniendo el resto de los parámetros de simulación constantes. Los parámetros de simulación se muestran en la Tabla 4.6.

Tabla 4.6: Parámetros de simulación en el estudio de la cantidad de iteraciones.

Parámetros de simulación	Número de iteraciones		
	Menor	Estandar	Mayor
N° de celdas de la malla	3965063	3965063	3965063
Tamaño del paso de tiempo [s]	1.0×10^{-8}	1.0×10^{-8}	1.0×10^{-8}
N° de partículas por celda	3.23	3.23	3.23
N° de iteraciones	100000	200000	300000
N° de procesadores usados	40	40	40
Tiempo de simulación [Hrs]	55.3	117.4	178.8

En la Figura 4.16 se presentan los coeficientes aerotermodinámicos. Como es de esperar, a medida que aumenta el número de iteraciones los resultados presentan una menor dispersión. Los resultados para 200000 y 300000 iteraciones son bastante similares, y, por tanto, las 200000 iteraciones se consideran como un valor que proporciona un nivel de fluctuación aceptable para el caso investigado.

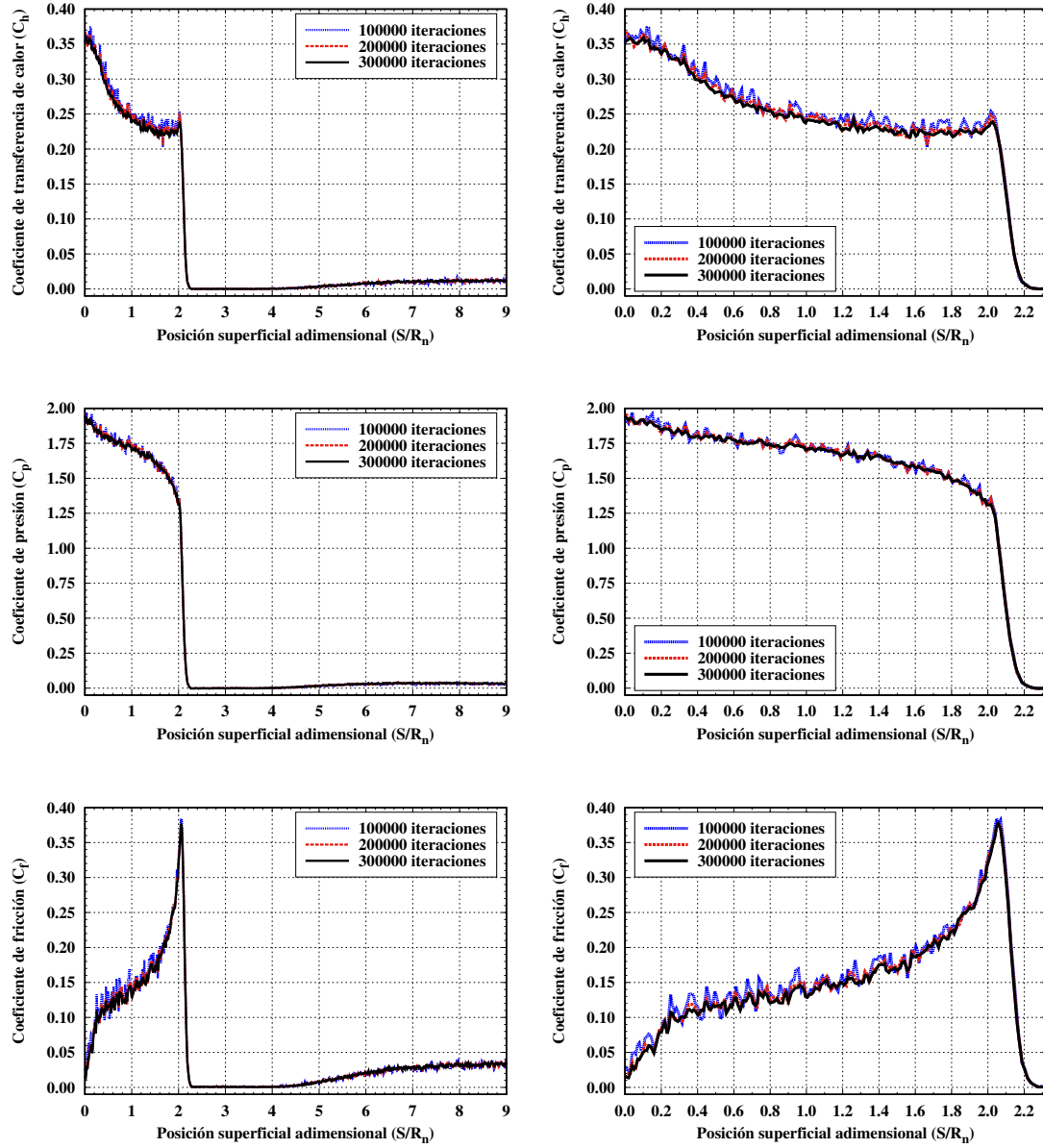


Figura 4.16: Influencia de la variación del número de iteraciones en las propiedades aerotermodinámicas sobre la superficie del modelo de sonda (izquierda), y con mayor detalle sobre su parte cónica (derecha).

Para resumir este capítulo, la verificación y validación del código `dsmcFoam+` se desarrolló simulando un flujo hipersónico, enrarecido y no reactivo, sobre un modelo de la sonda Mars Pathfinder. El proceso de verificación consistió en un análisis de sensibilidad de la discretización de la malla computacional, tamaño del paso de tiempo, número de iteraciones y cantidad promedio de partículas DSMC por celda. Siempre que se respetaron las buenas prácticas del método DSMC, los resultados condujeron a soluciones independientes de los parámetros analizados, al estudiar las propiedades aerotermodinámicas sobre la superficie de los modelos de sonda. En la validación se compararon propiedades del flujo, y propiedades aerotermodinámicas sobre la superficie del modelo de sonda. Se encuentra un buen acuerdo con los datos experimentales desarrollados en el túnel de viento hipersónico y de baja densidad SR3 de CNRS y los resultados numéricos desarrollados en NASA con el código DAC. Debido al alto grado de concordancia entre los resultados, el código `dsmcFoam+` se considera validado para simular flujos de gas hipersónicos enrarecidos y no reactivos en geometrías de tipo cono, con aplicaciones como la reentrada atmosférica de vehículos espaciales.

Capítulo 5

Análisis de desaceleradores aerodinámicos inflables

Para el desarrollo de la tecnología de desaceleradores aerodinámicos inflables (IAD), es requerido un estudio detallado de la aerotermodinámica durante la reentrada atmosférica. Por ello, en esta investigación se estudia el impacto de los flujos hipersónicos enrarecidos no reactivos, sobre un IAD acoplado a un CubeSat, en diferentes altitudes durante la reentrada atmosférica. Así, se busca describir adecuadamente las tasas de calentamiento de la superficie y las propiedades aerodinámicas, así como el comportamiento del flujo, de la onda de choque y de la región de estela formada aguas abajo del vehículo. Para ello, se realizaron simulaciones computacionales utilizando el método numérico DSMC, el cual se describió en detalle en el Capítulo 3.

5.1 Metodología

En esta sección se describe el diseño básico de IAD utilizado para realizar la investigación. Posteriormente, se describen las condiciones atmosféricas que debe atravesar el CubeSat, que sirven como parámetros de entrada para la descripción del flujo que rodea al cuerpo, por medio las simulaciones computacionales. Finalmente, se mencionan los modelos implementados del método DSMC y sus parámetros de entrada, el dominio computacional, las condiciones de borde y los distintos parámetros de simulación para cada altitud considerada en esta investigación.

5.1.1 Parámetros geométricos del IAD

El IAD en su configuración desplegada tiene forma cónica, y se encuentra compuesto por telas de alta resistencia térmica y por una nariz semiesférica rígida. En su configuración compacta, el IAD corresponde a una unidad CubeSat-1U, que se acopla a otro CubeSat-1U que contiene los sistemas y subsistemas propios de la misión. Dentro de la unidad 1U del IAD se encuentran todos sistemas y mecanismos necesarios para su inflado. La configuración geométrica desplegada del IAD considerada en la presente investigación se muestra en la Figura 5.1. El diámetro del sistema desplegado es de 600 mm , la longitud total del cuerpo es de 210.9 mm , el radio de la nariz es de 120 mm y el ángulo de medio cono del IAD desplegado es de 68.82° .

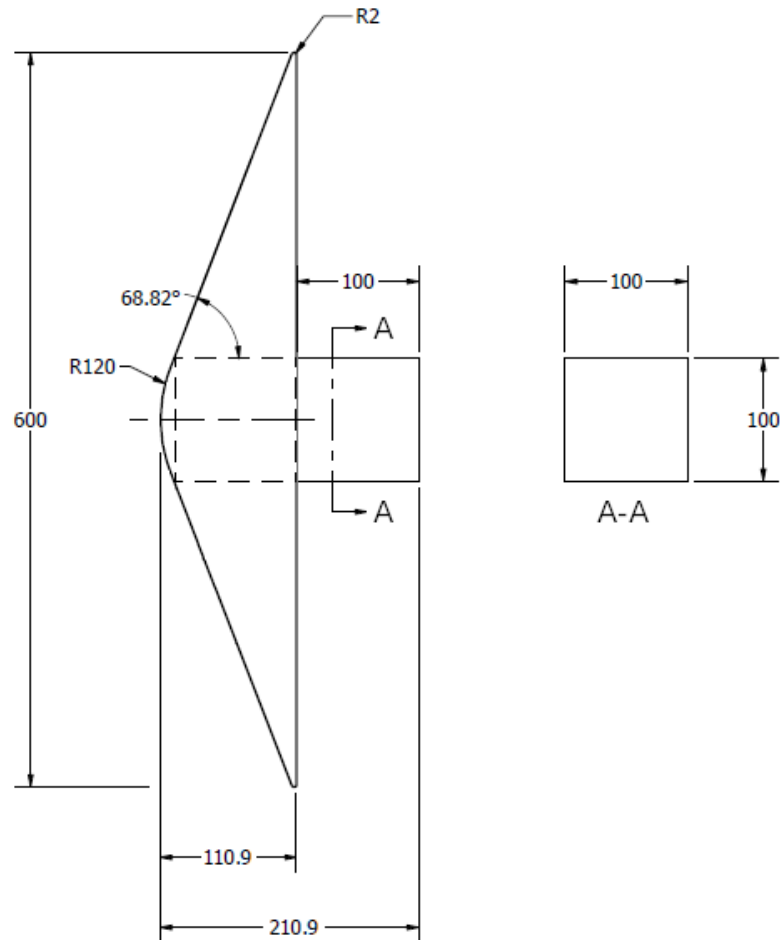


Figura 5.1: Dimensiones del IAD desplegado y acoplado al CubeSat 1U.

5.1.2 Condiciones de flujo libre

Para determinar con precisión las características aerotermodinámicas del IAD, se consideraron cinco altitudes durante la reentrada entre los 115 *km* y 95 *km*. Así, las simulaciones computacionales de los flujos sobre la configuración desplegada del IAD se realizaron a 115 *km*, 110 *km*, 105 *km*, 100 *km* y 95 *km* de altitud. Se considera una velocidad de reentrada (V_∞) constante de 7000 *m/s*. Además, se considera un ángulo de ataque nulo durante la reentrada. La temperatura superficial (T_w) se considera como un valor constante de 1000 *K*, la cual se elige de forma tal que sea representativa de la temperatura de la superficie cerca del punto de estancamiento. Para las altitudes analizadas se conocen las condiciones atmosféricas, las cuales se encuentran en la “U.S. Standard Atmosphere, 1976” [85]. Con base en esto, las condiciones de flujo libre experimentadas por los IAD se tabulan en la Tabla 5.1. Se desprende de la Tabla 5.1 que a medida que disminuye la altitud durante la reentrada, disminuye el nivel de rarefacción del gas, reflejado en el aumento de la densidad y la disminución del recorrido libre medio molecular. Esto se traduce en una disminución del número de Knudsen global ($Kn_L = \lambda_\infty/L$), donde la longitud característica L se consideró como el radio de la nariz del IAD, equivalente a 120 *mm*. A su vez, la disminución de la temperatura del flujo libre (T_∞) durante el rango de reentrada estudiado, genera el aumento del número de Mach ($M_\infty = V_\infty/a$), donde a es la velocidad del sonido ($a = \sqrt{\gamma RT_\infty}$), con $\gamma = 1.4$ y $R = 287$ [*kJ/kg · K*] la relación de calor específico y la constante de los gases del aire, respectivamente. El rango de números de Knudsen y números de Mach permiten establecer que el flujo se encuentran en régimen de flujo de transición y en régimen de velocidad hipersónico.

Tabla 5.1: Condiciones de flujo libre [85].

Altitud H [km]	Densidad ρ_∞ [kg/m ³]	Temperatura T_∞ [K]	Presión p_∞ [Pa]	Recorrido libre medio λ_∞ [m]	Knudsen global Kn_L	Mach global M_∞
115	4.289×10^{-8}	300.0	4.008×10^{-3}	1.587	13.25	20.16
110	9.709×10^{-8}	240.0	7.104×10^{-3}	0.725	6.042	22.54
105	2.325×10^{-7}	208.8	1.428×10^{-2}	0.312	2.600	24.17
100	5.604×10^{-7}	195.1	3.011×10^{-2}	0.125	1.042	25.00
95	1.393×10^{-6}	188.4	7.596×10^{-2}	0.051	0.425	25.44

En el rango de altitud estudiado, la atmósfera está compuesta principalmente

por nitrógeno (N_2), oxígeno (O_2) y oxígeno atómico (O). Si bien se encuentran presentes otros compuestos como argón (Ar) y helio (He), la concentración de estos representa menos del 1% del total [85], por lo que pueden ser despreciados. En la Tabla 5.4 se presenta la composición atmosférica porcentual y la concentración molecular para las altitudes analizadas.

Tabla 5.2: Composición atmosférica y densidad numérica en función de la altitud [85].

Altitud H [km]	Composición atmosférica (%)				Concentración molecular [m^{-3}]
	Nitrógeno (N_2)	Oxígeno (O_2)	Oxígeno atómico (O)	Otros compuestos	
115	74.93	9.96	14.75	0.35	9.680×10^{17}
110	76.54	12.23	10.74	0.49	2.144×10^{18}
105	77.33	15.23	6.78	0.66	5.021×10^{18}
100	77.49	18.10	3.62	0.80	1.189×10^{19}
95	77.67	19.96	1.49	0.88	2.920×10^{19}

5.1.3 Condiciones de simulación

Las simulaciones computacionales se realizaron con el código dsmcFoam+ y, por tanto, con los modelos propios del método DSMC. La relación entre los modelos moleculares y el gas real se basa principalmente en el coeficiente de viscosidad y el exponente de la temperatura ω de este coeficiente (ecuación (3.94)). Así, las colisiones moleculares se modelaron con el modelo de colisión molecular “Variable Hard-Sphere” (VHS) [61], y la técnica de muestreo de colisiones “No-Time-Counter” (NTC) [62]. En la Tabla 5.3 se presentan las propiedades requeridas para el modelo VHS, a una temperatura de referencia $T_{ref} = 273 \text{ K}$. Estas propiedades son la masa molecular (m), el diámetro molecular de referencia (d_{ref}) y el índice del coeficiente de viscosidad o exponente de la temperatura (ω), para cada uno de los tres componentes atmosféricos considerados. Por su parte, para el intercambio de energía entre los modos de traslación e internos se utiliza el modelo fenomenológico Larsen-Borgnakke [67]. Para ello los modelos moleculares de las moléculas diatómicas (nitrógeno (N_2) y oxígeno (O_2)) se consideran con un modo de vibración y dos grados de libertad de rotación.

El tipo de dominio computacional utilizado en la presente investigación se muestra en la Figura 5.2a, mientras que en la Figura 5.2b se presenta un esquema del tipo de malla computacional utilizada para discretizar el dominio computa-

Tabla 5.3: Propiedades requeridas en los modelos del método DSMC [27].

Propiedades moleculares	Compuesto		
	N_2	O_2	O
Masa molecular m [kg]	4.650×10^{-26}	4.650×10^{-26}	2.656×10^{-26}
Diámetro molecular d_{ref} [m]	4.170×10^{-10}	4.070×10^{-10}	3.000×10^{-10}
Índice de coeficiente de viscosidad ω	0.74	0.77	0.8
T° característica vibracional θ_{vib} [K]	3371	2256	-

cional. Dado que el ángulo de ataque considerado es nulo y que la geometría del conjunto IAD-CubeSat es simétrica respecto a los planos $Y = 0$ y $Z = 0$, las simulaciones pueden ser realizadas sobre un cuarto de la geometría. Para ello se deben aplicar condiciones de borde de tipo plano de simetría en las dos caras (I) que se muestran en la Figura 5.2a. Un plano de simetría implica que todos los gradientes de flujo normales al plano son cero, lo que a nivel molecular es equivalente a una condición de borde de tipo reflexión especular. En la superficie (II) se especifican las condiciones de flujo libre, en la cual las partículas simuladas entran y salen del dominio computacional. La superficie (II) tiene forma elipsoidal para hacer más eficiente el cálculo computacional. En la cara (III) se especifica la condición de vacío, lo que implica que las partículas solo pueden salir del dominio computacional, supuesto que es válido para flujos de alta velocidad como es el caso. Finalmente, (IV) corresponde a la superficie del CubeSat y del IAD desplegado, y en ella se define el tipo de interacción gas-superficie, la cual se especificó como una interacción de tipo reflexión difusa con acomodación térmica completa.

El dominio computacional se construye lo suficientemente grande para que las perturbaciones generadas por la geometría no alcancen los límites aguas arriba y laterales. Además, un tamaño del dominio computacional insuficiente aguas arriba del vehículo conduce a una predicción excesiva de las tasas de calentamiento y las fuerzas aerodinámicas [86]. La influencia del cuerpo en el flujo externo se extiende una distancia mayor a medida que aumenta el nivel de rarefacción del gas. El flujo es más enrarecido a altitudes mayores y, por tanto, el tamaño del dominio computacional debe aumentar con la altitud. En la Figura 5.3 se presenta el tamaño del dominio computacional para cada una de las altitudes estudiadas.

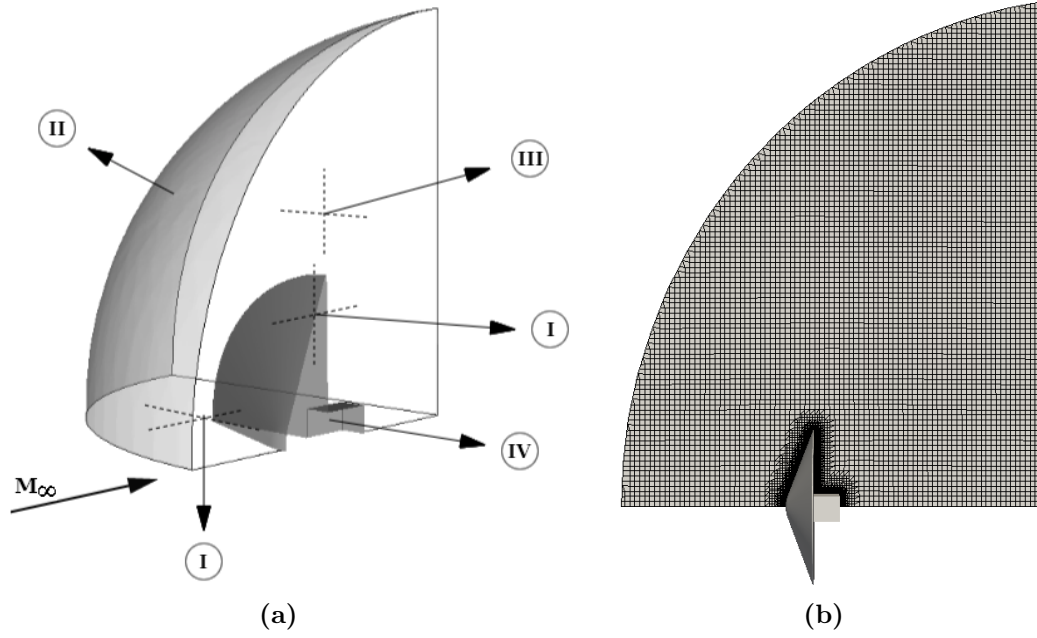


Figura 5.2: Esquema del (a) dominio computacional y de las condiciones de borde. (b) Malla computacional.

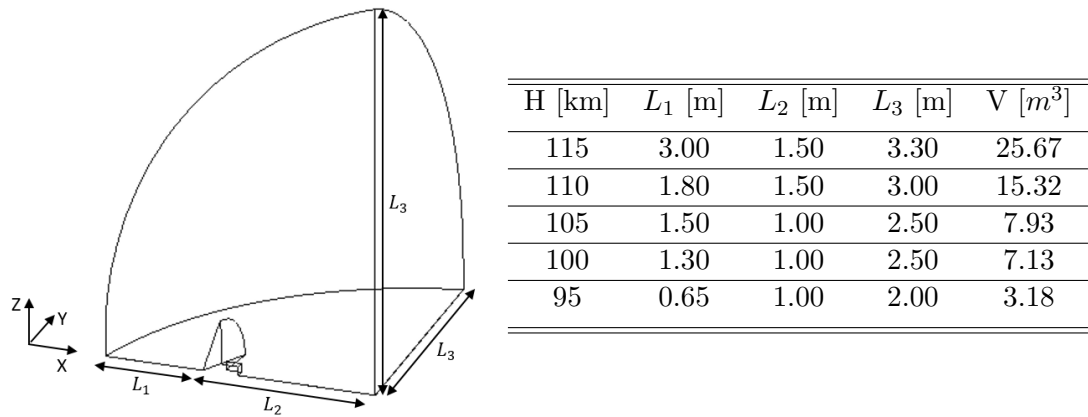


Figura 5.3: Dimensiones del dominio computacional en función de la altitud.

Parámetros de simulación

Una vez que se tiene el dominio computacional, este se debe discretizar por medio de una malla computacional. Dado que los posibles pares de partículas en colisión están restringidas a la celda actual, el tamaño de las celdas computacionales debe ser del orden o inferior que el recorrido libre medio local. A su vez, cada celda computacional se divide en 8 subceldas dentro de las cuales se realizan las colisiones intermoleculares, a fin de garantizar colisiones entre partículas cercanas y, por lo tanto, un transporte más realista de masa, momento y energía. Así, el dominio computacional se dividió mayoritariamente en celdas hexaédricas regulares, mientras que en las cercanías de la geometría se utilizaron celdas poliédricas irregulares para capturar mejor la forma geométrica. En la Figura 5.2b se muestra la malla computacional empleada a la altitud de 95 *km*. Para las altitudes de 115, 110, 105, 100 y 95 *km*, las celdas hexaédricas regulares se construyeron con un lado de tamaño (L_c) de 0.055, 0.045, 0.045, 0.02 y 0.02 *m*, respectivamente. El refinamiento en las cercanías de la geometría se genera con celdas que van reduciendo su tamaño a la mitad progresivamente, hasta alcanzar un tamaño del orden de $L_c/2^5$ sobre la geometría. Por su parte, el tamaño del paso de tiempo debe ser menor que el tiempo medio de colisión local [27, 28].

Para comenzar la simulación se debe inicializar el dominio computacional con partículas computacionales. Se define una cantidad promedio de partículas por celda simuladas. Una cantidad muy grande de partículas puede generar un costo computacional difícil de abordar. Por el contrario, una cantidad muy pequeña puede dificultar la estadística de colisión al interior de las subceldas. El error estadístico de una muestra disminuye como la raíz cuadrada del tamaño de la muestra, por lo que el tamaño de la muestra debe ser lo suficientemente grande para reducir el error estadístico. Sin embargo, una muestra muy grande puede implicar un gran costo computacional.

Los parámetros de simulación se determinaron de forma tal de respetar las buenas prácticas del método DSMC, descritas anteriormente. Los parámetros de simulación de cada una de las cinco simulaciones computacionales se presentan en la Tabla 5.4.

Tabla 5.4: Parámetros de simulación a diferentes altitudes.

Altitud H [km]	Cantidad de celdas	Paso de tiempo [s]	Número de iteraciones	Cantidad de partículas por celda
115	594625	1.80×10^{-06}	2154000	11.9
110	816398	1.50×10^{-06}	1857000	10.0
105	737140	1.50×10^{-06}	1453000	8.8
100	1659388	6.80×10^{-07}	2690000	9.2
95	3695081	6.50×10^{-07}	300000	8.3

5.2 Resultados computacionales y discusión

En esta sección se analiza el efecto de la variación de altitud durante la reentrada atmosférica en el comportamiento de la estructura de flujo y las propiedades aerodinámicas y aerotérmicas sobre la superficie del CubeSat con su IAD desplegado.

5.2.1 Estructura del campo de flujo

En esta sección se presentan las propiedades macroscópicas primarias del flujo hipersónico enrarecido que rodea al IAD y al CubeSat, dentro de las que se encuentran la velocidad, la densidad, la presión y la temperatura. Para obtener una descripción general de la estructura del flujo en función de la altitud, se presentan los contornos de las propiedades macroscópicas en cada una de las altitudes estudiadas. A su vez, para comprender mejor la influencia de la altitud en la estructura del campo de flujo, se miden las propiedades macroscópicas a lo largo de cinco perfiles normales a la superficie de la geometría, en distintas posiciones pertenecientes al plano $Y = 0$. Cada una de las posiciones en las que se ubican los perfiles se muestran en la Figura 5.4. Los perfiles P_1 , P_2 , P_3 , P_4 y P_5 , son normales a la superficie en los puntos de tipo $x_i = (X_i, Z_i)$, $x_1 = (0.0, 0.0)$, $x_2 = (0.0511, 0.15)$, $x_3 = (0.1099, 0.30)$, $x_4 = (0.1609, 0.05)$ y $x_5 = (0.2109, 0.05)$, respectivamente (unidades en metros). Así, el Perfil 1 (P_1) corresponde a la línea de corriente de estancamiento, el Perfil 2 (P_2) es normal a la parte frontal del IAD, el Perfil 3 (P_3) se ubica en el borde del hombro del IAD, el Perfil 4 (P_4) se encuentra al medio de la cara lateral del CubeSat, y el Perfil 5 (P_5) se ubica al final de la cara lateral del CubeSat. Las propiedades macroscópicas se miden desde la superficie del cuerpo, hasta la frontera del dominio computacional.

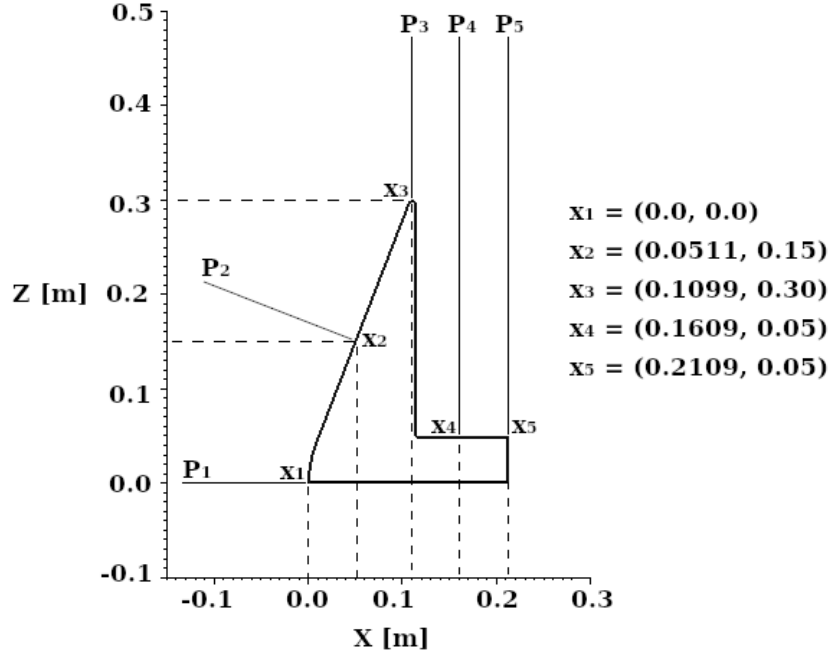


Figura 5.4: Esquema de los perfiles de medición de propiedades macroscópicas.

Campo de velocidad del flujo

Como se detalló en el capítulo 3, las propiedades macroscópicas de mezclas de gases se determinan como la ponderación de la fracción de masa de cada especie. En el caso del vector velocidad macroscópico local o de corriente de la mezcla, esto se expresa como:

$$\vec{C}_0 = \frac{1}{\rho} \sum_{s=1}^{N_s} \rho_s \langle \vec{C} \rangle_s \quad (5.1)$$

donde ρ_s es la densidad de cada especie, ρ es la densidad total de la mezcla y \vec{C}_s es la velocidad macroscópica de la corriente para cada especie, que se determina como

$$\langle \vec{C} \rangle_s = \frac{1}{N_{p,s}} \sum_{j=1}^{N_{p,s}} (\vec{C}_s)_j \quad (5.2)$$

donde j es cada una de las $N_{p,s}$ partículas simuladas de la especie s presentes en la celda de muestreo durante el número total de pasos de tiempo de muestreo N_{samp} , y \vec{C}_s es la velocidad de cada partícula individual de la especie s . Así, \vec{C}_0 corresponde a la velocidad media instantánea de las moléculas en el volumen de la celda.

A continuación se analiza el efecto de la reducción de la altitud en la velocidad del flujo que rodea al IAD y al CubeSat. En la Figura 5.5 se presentan los contornos de velocidad con trazos de líneas de corriente del flujo cercano al vehículo, en el lado izquierdo para el dominio completo y en el lado derecho una aproximación al dominio en $-0.3 < X < 0.5$ y $0 < Z < 0.8$ (unidades en metros). Como es de esperar, los gráficos de contornos de la velocidad muestran que la magnitud de velocidad en la entrada del dominio computacional es de 7000 m/s para todas las altitudes analizadas, y comienza a disminuir progresivamente a medida que el flujo libre se acerca a la superficie del vehículo, hasta alcanzar una velocidad muy baja en las cercanías del vehículo. Esto genera la formación de un fuerte gradiente de velocidad del flujo cercano a la parte frontal del IAD, característico de las ondas de choque. Una onda de choque suele formarse cuando un flujo supersónico se “acerca a sí mismo” [51], como resultado de la interacción con un cuerpo que obliga al flujo de alta energía cinética a desviarse de su trayectoria. A nivel molecular, las partículas colisionan con la superficie y se reflejan, chocando con otras partículas que la anteceden, lo que genera el intercambio de energía y momento. Como consecuencia, el flujo libre pierde energía cinética y se desvía de su trayectoria, lo que se aprecia en las líneas de corriente generadas aguas arriba del vehículo.

Las líneas de corriente muestran las trayectorias realizadas por partículas representativas del flujo medio local. Las líneas de corriente muestran que el flujo aguas arriba del vehículo tiene una trayectoria recta, hasta que alcanza las proximidades de la superficie frontal del IAD donde se desaceleran, alcanzando velocidades inferiores a 1000 m/s y desviándose para rodear el cuerpo sobre el hombro del IAD. Una vez en las cercanías del hombro del IAD, las partículas más alejadas se aceleran rápidamente, alcanzando velocidades superiores a 5000 m/s , mientras que las partículas más cercanas al hombro se desvían hacia la parte trasera del IAD manteniendo velocidades bajas, rodean el CubeSat y comienzan a acelerar suavemente aguas abajo hacia la estela lejana. En la parte trasera del IAD no se logra apreciar la formación de recirculación para ninguna de las altitudes analizadas.

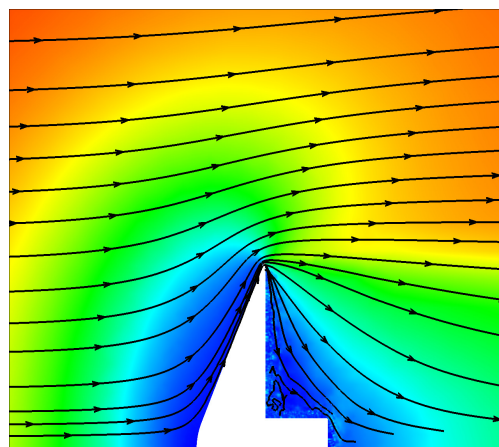
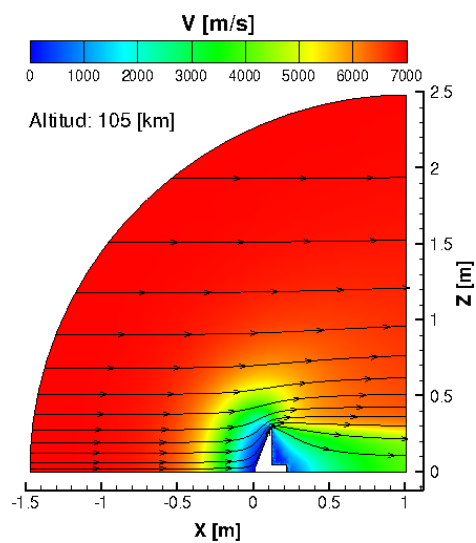
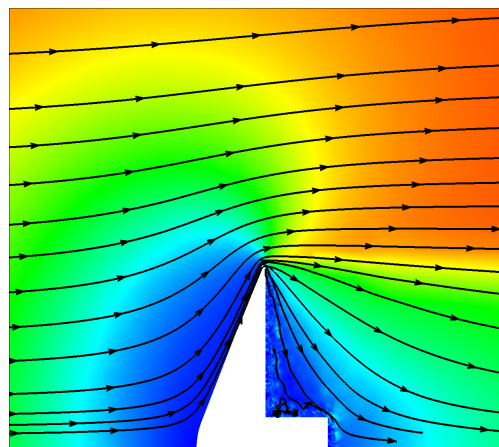
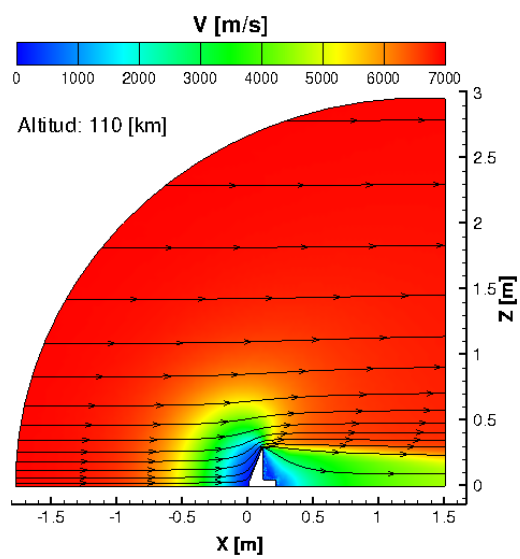
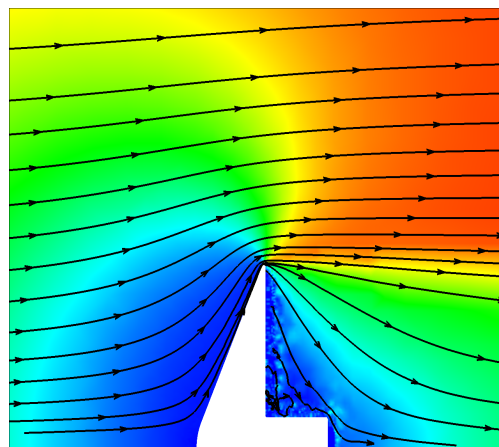
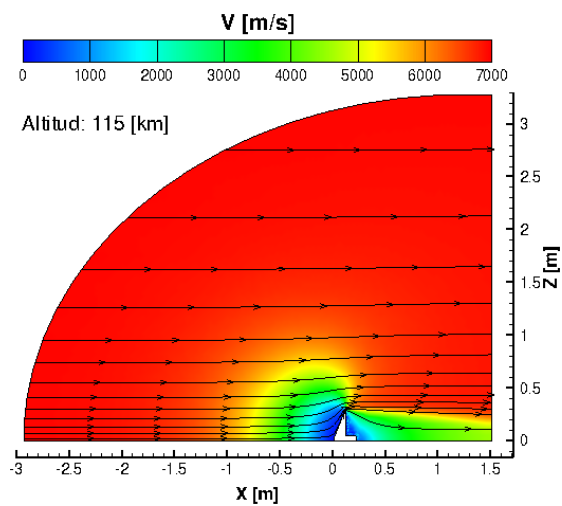
La perturbación de la corriente libre aguas arriba del vehículo es significativamente menor a medida que la altitud disminuye, por lo que la extensión de la onda de choque abarca un menor espacio y se acerca a la superficie frontal del IAD durante la reentrada atmosférica. Esto es indicativo de un aumento de la

difusión en la onda de choque a mayores altitudes. Por otra parte, a grandes altitudes la onda de choque está bien definida en la parte frontal del IAD, pero a medida que disminuye la altitud la onda de choque frontal se combina con la estela aguas abajo del hombro del IAD, haciendo que las variaciones de velocidad en la estela sean más graduales que lo ocurrido a mayores altitudes.

Con el objetivo de analizar con mayor detalle el comportamiento de la velocidad del flujo durante la reentrada atmosférica, en la Figura 5.6 se muestran las mediciones de la distribución de velocidad a lo largo de los cinco perfiles de la Figura 5.4, para las diferentes altitudes consideradas en esta investigación. En el lado izquierdo se muestran las mediciones de la componente de velocidad en dirección axial (V_X) a lo largo de los perfiles, mientras que en el lado derecho se muestran las mediciones de la componente de velocidad en dirección del eje Z (V_Z).

En el perfil 1 se hicieron mediciones de la distribución de velocidad axial (V_X) a lo largo de la línea de corriente de estancamiento, o sea desde la entrada del dominio computacional hasta la punta de la nariz del IAD donde la velocidad alcanza un valor nulo (punto de estancamiento). Se observa como la velocidad disminuye progresivamente a medida que se acerca al cuerpo. Esta disminución es más rápida conforme disminuye la altitud, por lo que la desaceleración es mayor y ocurre más cerca del punto de estancamiento. A los 115 *km* de altitud la desaceleración del flujo comienza a una distancia aproximada de 2.4 *m* de la nariz del IAD, a 105 *km* de altitud esta distancia se reduce a 1 *m*, mientras que a 95 *km* de altitud comienza a desacelerar a 0.45 *m* del IAD. Este comportamiento se debe al aumento del número de colisiones entre las partículas a altitudes más bajas, producto de la disminución de la rarefacción. Por otra parte, la componente V_Z es nula dada la condición de simetría respecto del plano $Y = 0$.

El perfil 2 es normal a la superficie de la parte frontal del IAD. Se observa como las mediciones de V_X en el perfil 2 son muy similares a las mediciones en el perfil 1, existiendo gradientes de V_X cada vez más pronunciados a medida que disminuye la altitud. A diferencia del perfil 1, el perfil 2 tiene componente de velocidad V_Z , la cual tiene un valor nulo en las lejanías de la geometría y comienza a aumentar a medida que se aproxima a esta, alcanzando un valor máximo para luego decaer progresivamente hasta alcanzar la superficie. Los valores máximos alcanzados son mayores y se aproximan al IAD a medida que disminuye la altitud, siendo de 318



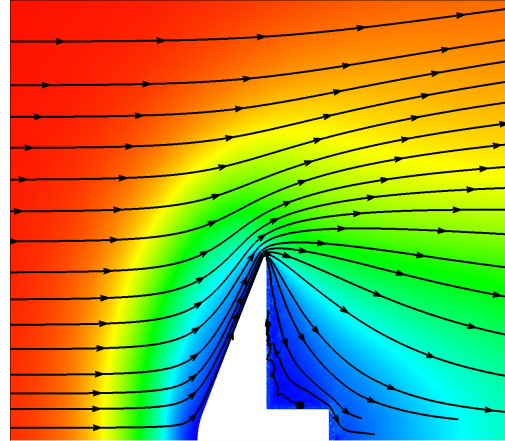
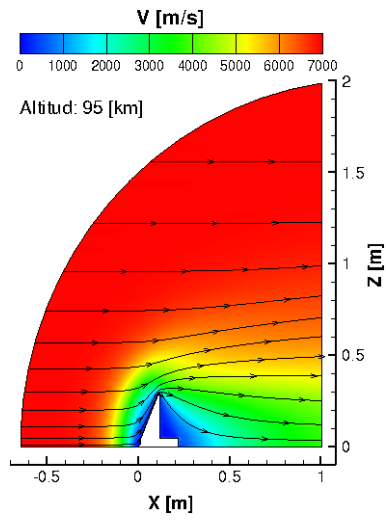
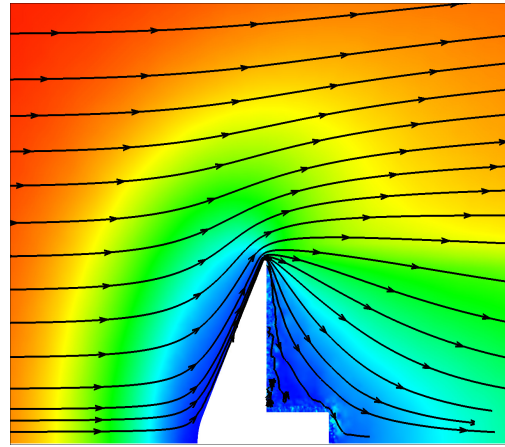
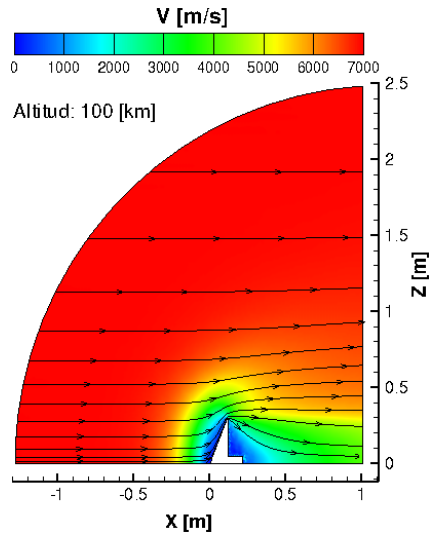


Figura 5.5: Contornos de velocidad (V) y líneas de corriente alrededor de la geometría para las altitudes consideradas.

m/s a los $115\ km$ y ubicándose a $0.18\ m$ del IAD, y alcanzando los $848\ m/s$ a $0.6\ m$ del IAD a los $95\ km$ de altitud.

El flujo continúa rodeando al vehículo y alcanza el hombro del IAD, donde se mide la distribución de velocidad a lo largo del perfil 3. Como es de esperar, para valores altos de Z la componente de velocidad V_X medida en el perfil 3 es equivalente a V_∞ , mientras que la componente V_Z es nula. A medida que Z disminuye, los efectos viscosos de la interacción entre el flujo y el vehículo se hacen presentes, con lo que V_X se reduce rápidamente hasta alcanzar valores mínimos sobre el hombro. Por su parte, la componente V_Z aumenta hasta alcanzar un máximo, para luego reducirse sobre la superficie del hombro. Ambas componentes de velocidad son positivas, por lo que el flujo se desvía con una tendencia ascendente al superar el hombro del IAD. Esta tendencia es mayor a medida que disminuye la altitud, dado que los valores máximos de V_Z aumentan durante la reentrada atmosférica.

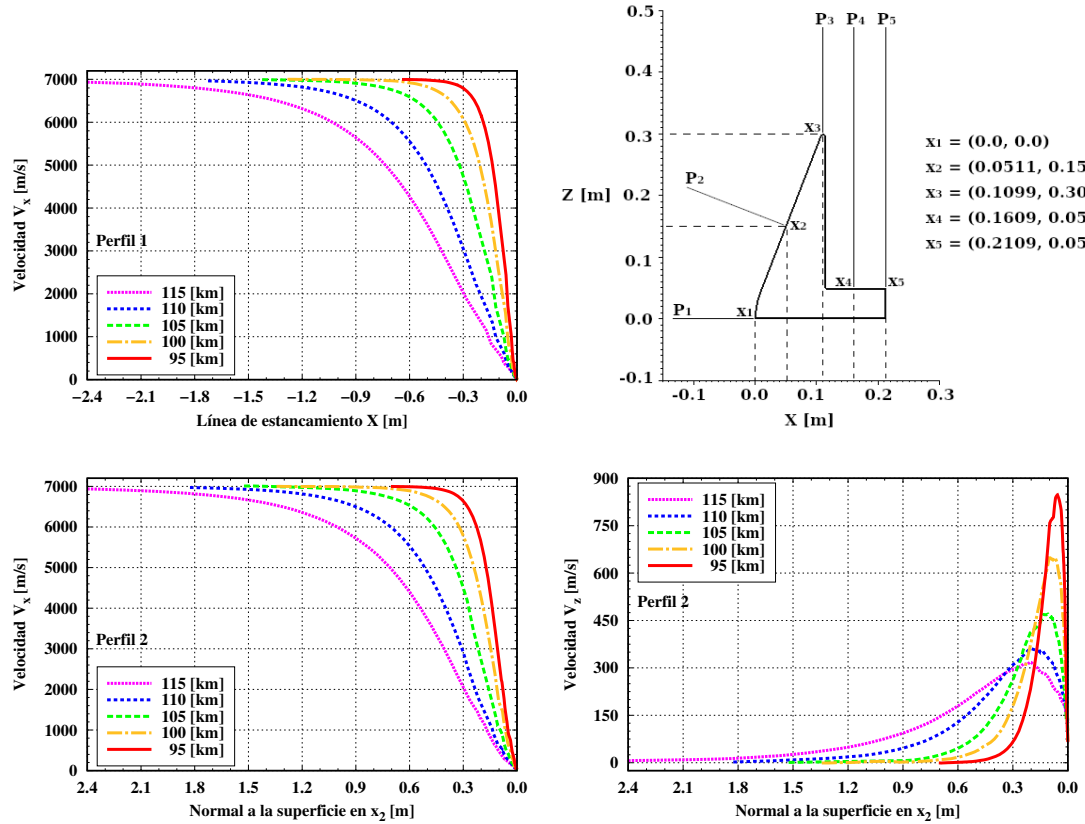
Posteriormente, el flujo alcanza los perfiles 4 y 5, medidos sobre la superficie lateral del CubeSat en los puntos x_4 (al medio de la cara lateral) y x_5 (al final de la cara lateral), respectivamente. La componente V_X medida en los perfiles 4 y 5 presenta un comportamiento similar al observado en el perfil 3 para $Z > 0.6\ m$, esto es, una disminución progresiva a medida que el flujo se encuentra más cerca del vehículo. Esta disminución de V_X se produce por la extensión de la onda de choque sobre el hombro del IAD, y su unión con la estela a medida que disminuye la altitud. Posteriormente, para $Z < 0.6\ m$ se genera una aceleración axial importante y la formación de máximos locales de la velocidad axial en $Z \approx 0.3\ m$. Esto se debe a que los gradientes de velocidad en la onda de choque se extienden en mayor medida hacia la estela interna formada aguas abajo del hombro, no así a la estela externa ($Z > 0.6\ m$) donde la velocidad aumenta a medida que la corriente avanza. Ya en la parte trasera del IAD donde $Z < 0.3\ m$, se genera una zona de expansión del flujo que se detallará en el análisis de la densidad, lo que genera que la velocidad axial continúe disminuyendo hasta alcanzar valores mínimos sobre la superficie del CubeSat.

Por su parte, el comportamiento de V_Z a lo largo de los perfiles 4 y 5 es similar a lo observado en el perfil 3 para $Z > 0.3\ m$, aumenta hasta alcanzar un máximo y luego disminuye sobre la superficie del hombro. A medida que el flujo avanza corriente abajo pasando del perfil 4 al perfil 5, la componente de velocidad ascendente ($+Z$) disminuye y por ende el flujo se desacelera corriente abajo. Para $Z \approx 0.3\ m$ la componente V_Z invierte su signo abruptamente, por

lo que el flujo se mueve con una tendencia descendente ($-Z$) en la parte trasera del IAD, acercándose a la superficie del CubeSat. Una vez alcanzado un máximo local de V_Z , pero con signo negativo (descenso), el flujo comienza a disminuir la magnitud de V_Z a medida que se acerca al CubeSat, impulsado por la interacción viscosa con la superficie.

Una observación importante es que la velocidad sobre la superficie es distinta de cero para todos los perfiles (salvo en el punto de estancamiento), o sea que existe la presencia de deslizamiento de velocidad. Este fenómeno es característico de los flujos enrarecidos.

Finalmente, para todos los perfiles analizados se observó que los gradientes de velocidad en dirección X y Z aumentan a medida que se reduce la altitud, y las variaciones de la velocidad se producen cada vez más cerca de la superficie de la geometría durante la reentrada atmosférica.



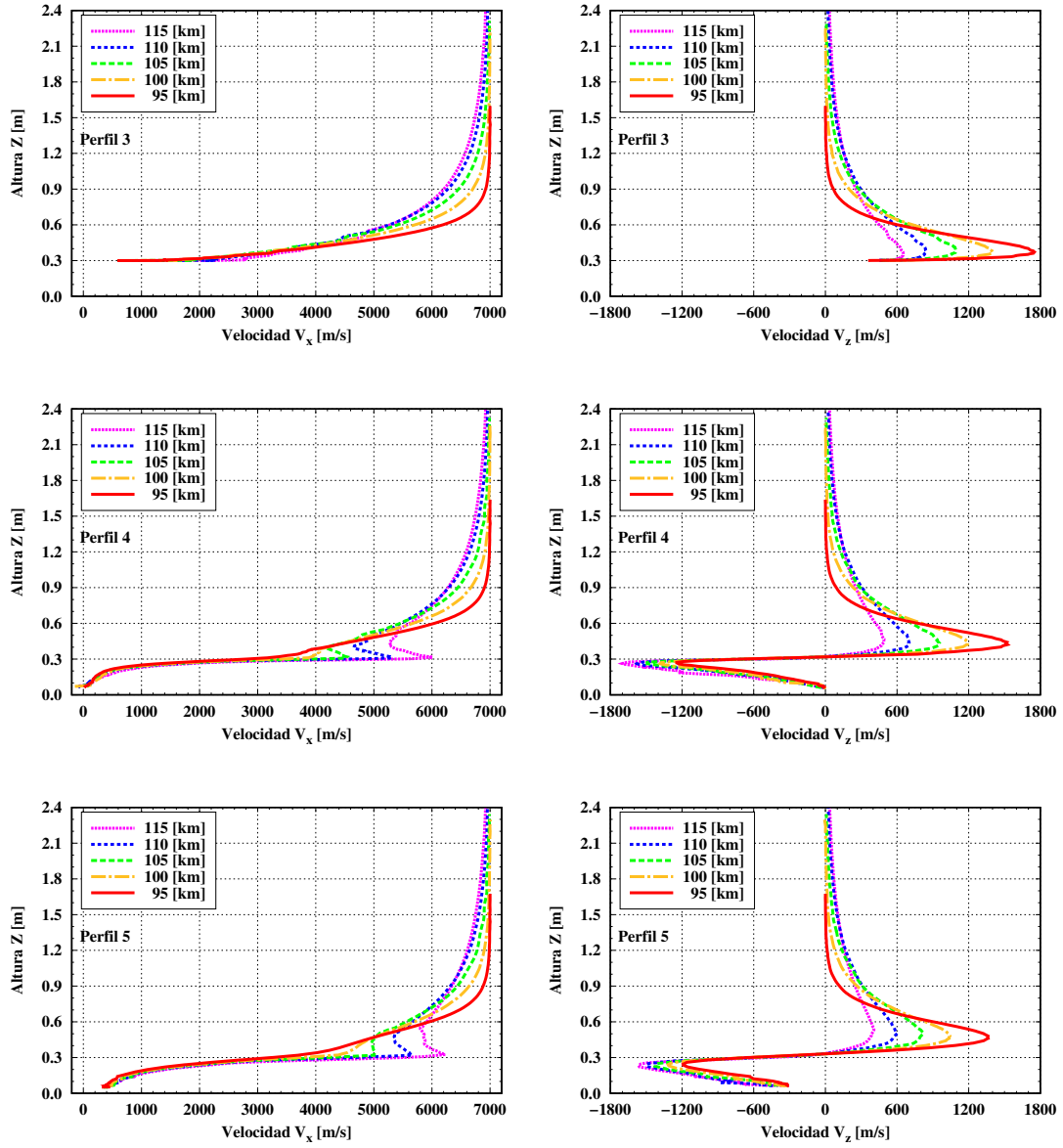


Figura 5.6: Perfiles de velocidad en función de la altitud en distintas posiciones normales a la geometría. A la izquierda las componentes de velocidad V_X y la derecha las componentes de velocidad V_Z .

Campo de temperatura

La temperatura general (T_{ov}) de una mezcla de gases se determina como la ponderación de la temperatura general de cada especie en la mezcla ($T_{ov,s}$) con respecto a la fracción de masa de cada especie, como sigue:

$$T_{ov} = \frac{1}{\rho} \sum_{s=1}^{N_s} (\rho_s T_{ov,s}) \quad (5.3)$$

donde s representa a cada una de las N_s especies que forman la mezcla, ρ es la densidad de la mezcla, y ρ_s es la densidad de cada una de las especies. La temperatura general de cada especie ($T_{ov,s}$) se define como el promedio ponderado de los modos traslacional ($T_{tra,s}$), rotacional ($T_{rot,s}$) y vibracional ($T_{vib,s}$), con respecto a sus respectivos grados de libertad (ζ), para cada especie s :

$$T_{ov,s} = \frac{\zeta_{tr,s} T_{tr,s} + \zeta_{rot,s} T_{rot,s} + \zeta_{vib,s} T_{vib,s}}{\zeta_{tr,s} + \zeta_{rot,s} + \zeta_{vib,s}} \quad (5.4)$$

donde las temperaturas de traslación de cada especie se obtienen para cada celda como:

$$T_{tr,s} = \frac{1}{3k} \langle m_s \vec{C}'^2 \rangle = \frac{m_s}{3k} \left[\frac{1}{N_{p,s}} \sum_{j=1}^{N_{p,s}} (C_s^2)_j - \langle C_s \rangle^2 \right] \quad (5.5)$$

donde k es la constante de Boltzmann, $\vec{C}' = \vec{C} - \vec{C}_0$ es la velocidad térmica o aleatoria, $(C_s^2)_j$ es el cuadrado de la velocidad de la partícula j para cada una de las $N_{p,s}$ partículas de especie s dentro de la celda de muestreo, y m_s es la masa de las moléculas de la especie s .

Por su parte, la temperatura de rotación para cada especie equivale a:

$$T_{rot,s} = \frac{2m \langle \epsilon_{rot} \rangle_s}{k \zeta_{rot,s}} = \frac{2}{k \zeta_{rot,s} N_{p,s}} \sum_{j=1}^{N_{p,s}} (\epsilon_{rot,s})_j \quad (5.6)$$

donde $(\epsilon_{rot,s})_j$ es la energía de rotación de la partícula j de la especie s dentro de la celda de muestreo, y $\zeta_{rot,s}$ son los grados de libertad de rotación correspondiente a la especie s .

Finalmente, la temperatura vibratoria se determina como:

$$T_{vib,s} = \frac{\theta_{vib,s}}{\ln \left(1 + \frac{k\theta_{vib,s}}{\langle \epsilon_{vib} \rangle_s} \right)} = \frac{\theta_{vib,s}}{\ln \left(1 + \frac{k\theta_{vib,s} N_{p,s}}{\sum_{j=1}^{N_{p,s}} (\epsilon_{vib,s})_j} \right)} \quad (5.7)$$

donde θ_{vib} es la temperatura característica de vibración.

En la Figura 5.7 se presentan los contornos de temperatura del flujo que rodea al cuerpo, desde los 115 *km* hasta los 95 *km* de altitud. Este conjunto de gráficos muestra la formación de una fuerte onda de choque, caracterizada por la presencia de elevados gradientes de temperatura aguas arriba del vehículo.

La región de la onda de choque se compone principalmente de partículas que pertenecían a la corriente libre y posteriormente colisionaron con partículas reflejadas desde la superficie [87]. Las partículas del flujo libre hipersónico tienen una alta energía cinética, y al colisionar con partículas reflejadas desde la superficie se produce una gran velocidad de separación entre estas dos clases de partículas [88], lo que aumenta la velocidad térmica frente al vehículo y, por ende, una conversión de la energía cinética del flujo libre en energía térmica. Como consecuencia, la velocidad media de las partículas disminuye y la temperatura traslacional aumenta en la onda de choque, además de excitar otros estados de energía molecular como la rotación y la vibración. Esto se ve reflejado en el aumento progresivo de temperatura aguas arriba del vehículo, que coincide con el comienzo de la disminución de la velocidad, como se observa al comparar los gráficos de contornos o el perfil 1 de velocidad y temperatura. Así, la temperatura aumenta progresivamente hasta alcanzar un máximo, para luego comenzar a disminuir hasta alcanzar la superficie del IAD.

La región donde el flujo disminuye su temperatura, entre la onda de choque y la superficie frontal del IAD, se compone principalmente por partículas que anteriormente pertenecieron a la región de la onda de choque y después colisionaron con la superficie [87]. Esta interacción reduce considerablemente la velocidad térmica y por ende la energía térmica de la partícula, lo que genera la disminución de la temperatura del flujo adyacente a la parte frontal del IAD.

Desde el hombro del IAD se generan dos tipos de flujos, uno de baja temperatura que rodea la parte trasera del IAD y al CubeSat, y un flujo de alta temperatura más alejado del CubeSat y que se extiende hasta la estela formada aguas abajo del vehículo.

A medida que el vehículo reingresa en la atmósfera terrestre, la onda de choque se torna menos difusa y más delgada debido al aumento de la densidad atmosférica, y se acerca a la superficie del IAD. Además, con la disminución de la altitud aumentan los gradientes de temperatura en la onda de choque, y con ello la temperatura máxima es mayor. Así, a los 115 *km* de altitud el valor máximo de la temperatura es de 11197 *K*. Luego el CubeSat continúa reingresando, alcanzando a los 95 *km* de altitud una temperatura máxima de 16660 *K*. La estela presenta gradientes de temperatura más suaves a medida que se reduce la altitud, pero su temperatura máxima se mantiene cercana a los 7200 *K* para todas las altitudes analizadas.

Con el objetivo de analizar mejor la influencia de la altitud en el comportamiento de la temperatura del flujo, en la Figura 5.8 se presentan las distribuciones de temperatura medidas a lo largo de los cinco perfiles normales a la superficie del cuerpo (Figura 5.4), al variar la altitud entre los 115 *km* y los 95 *km*. Las mediciones en los perfiles 1 y 2 son bastante similares, lo que muestra como la distribución de temperatura se mantiene prácticamente constante en un rango importante de la extensión de la onda de choque sobre el IAD, para todas las altitudes estudiadas. Pese a ello, en el perfil 1 se visualizan temperaturas levemente mayores, y es en este perfil donde se alcanzan las temperaturas máximas. Las mediciones en los perfiles 1 y 2 muestran claramente el aumento de los gradientes de temperatura a medida que disminuye la altitud, y como estos se acercan a la superficie del IAD durante la reentrada atmosférica. A medida que disminuye la altitud, el valor máximo de la temperatura aumenta y se ubica a una menor distancia de la superficie del IAD. Así, a los 115 *km* de altitud el valor máximo de la temperatura se ubica a 0.45 *m* de la parte frontal del IAD, mientras que a los 95 *km* de altitud se ubica a apenas 0.061 *m* de distancia del IAD.

En el perfil 3 se realizan mediciones en dirección normal al hombro del IAD. La temperatura en el límite del dominio equivale a la temperatura de la corriente libre. Conforme *Z* disminuye, la temperatura aumenta hasta alcanzar un valor máximo en las cercanías de $Z = 0.4$ *m*, para luego disminuir abruptamente en las cercanías del hombro. El valor máximo alcanzado a los 115 *km* de altitud es de 8604 *K*, mientras que a los 95 *km* de altitud alcanza los 11295 *K*. Estos valores representan un 76.84% y un 67.80% de la temperatura máxima alcanzada en la onda de choque, para los 115 y los 95 *km* de altitud, respectivamente. Por ende,

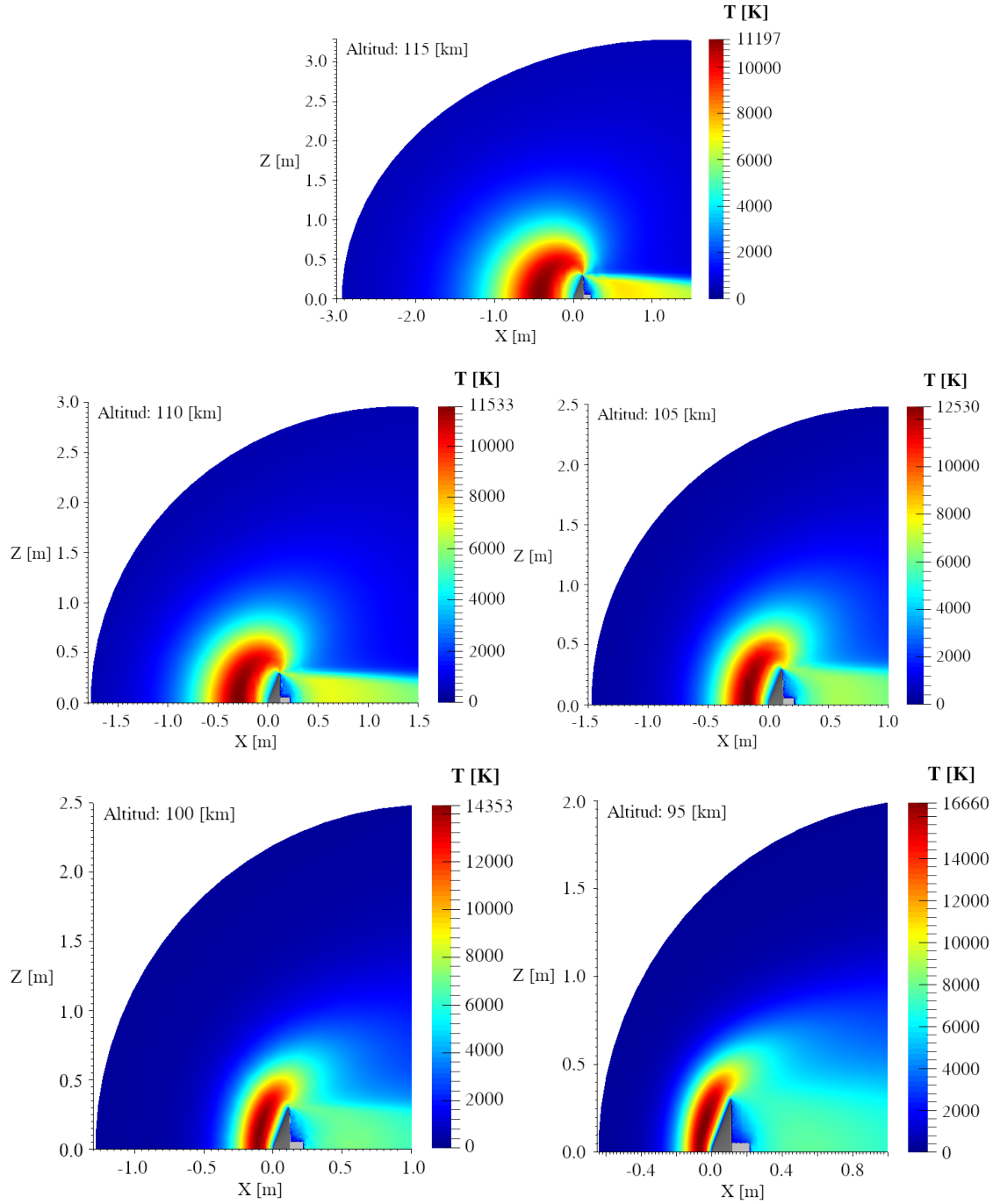


Figura 5.7: Contornos de temperatura (T) alrededor de la geometría para las altitudes consideradas.

se aprecia una disminución de la temperatura máxima a medida que el flujo rodea el IAD y alcanza las cercanías del hombro. Esta disminución de la temperatura máxima a medida que el flujo rodea el IAD, es mayor a medida que el vehículo ingresa en la atmósfera. Esto se explica por el cambio en la velocidad generado una vez superada la región de la onda de choque, el cual es más abrupto a altitudes mayores.

En los perfiles 4 y 5 se observa la influencia de la onda de choque aguas abajo del hombro del IAD, con la generación de un máximo de la temperatura en $Z \approx 0.45 \text{ m}$, y la formación de altos gradientes de temperatura. Este comportamiento es una continuación de lo observado en el perfil 3, pero con una tendencia a disminuir los valores máximos de temperatura y la magnitud de los gradientes, a medida que el flujo avanza aguas abajo. Así, a los 115 km de altitud la temperatura máxima es de 6422 K en el perfil 4 y de 5019 K en el perfil 5, mientras que a los 95 km de altitud la temperatura máxima alcanza los 9453 K en el perfil 4 y se reduce a 8206 K en el perfil 5. En $Z = 0.3 \text{ m}$ tanto para el perfil 4 como para el perfil 5, se produce un salto de temperatura producto de la extensión de la onda de choque hacia la estela cernada aguas abajo del hombro del IAD. Este salto es más notorio a altitudes mayores, mientras que a los 95 km de altitud solo genera una disminución del gradiente de temperatura a medida que los perfiles 4 y 5 se acercan a la superficie del CubeSat. Para el caso del perfil 5 este salto de temperatura corresponde al máximo global de las distribuciones de temperatura a las altitudes de 115 y 110 km .

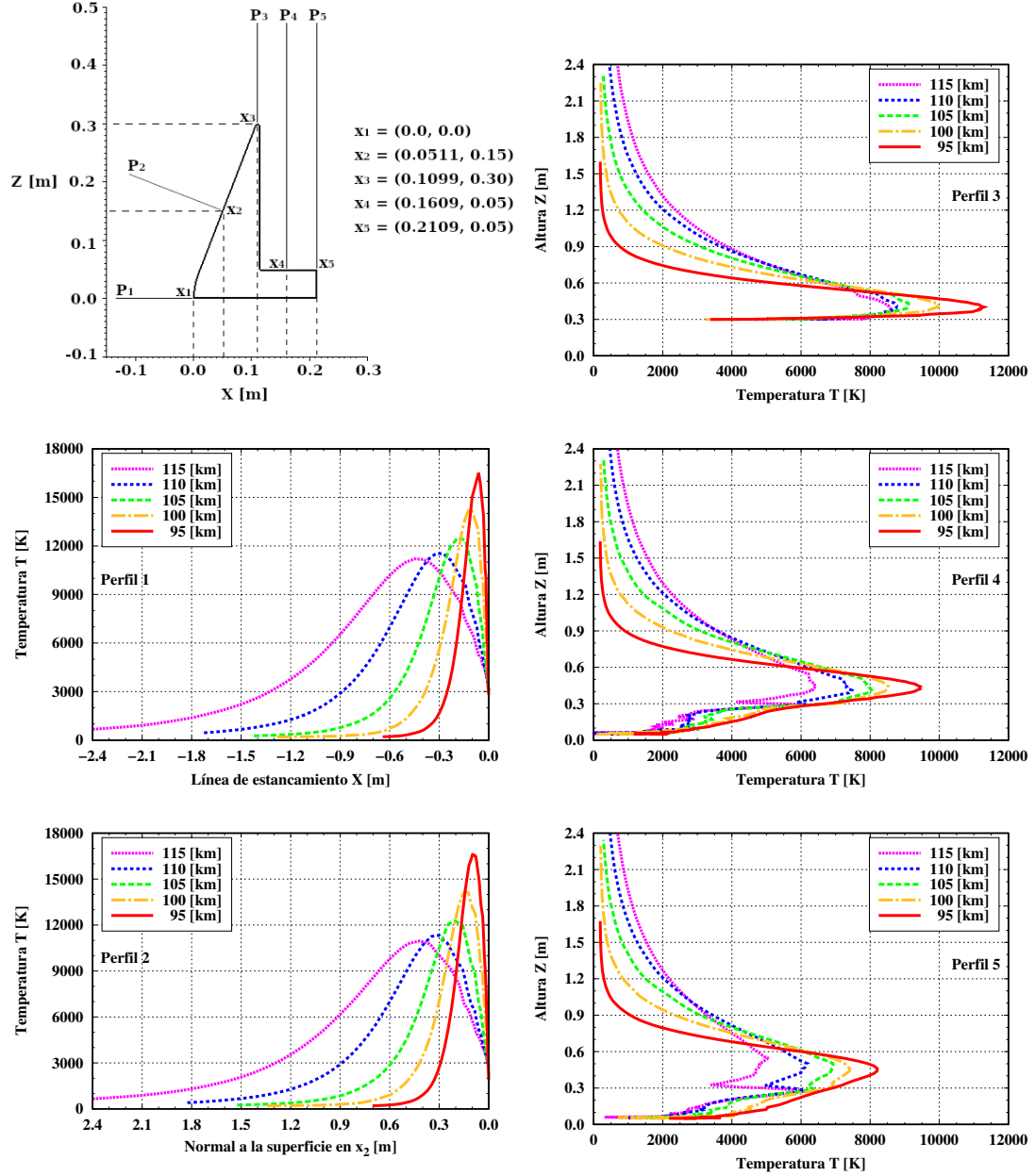


Figura 5.8: Perfiles de temperatura en función de la altitud en distintas posiciones normales a la geometría.

Campo de densidad del flujo

La densidad de la mezcla se obtiene promediando las densidades de cada especie (ρ_s):

$$\rho = \sum_{s=1}^{N_s} \rho_s \quad (5.8)$$

donde N_s es la cantidad de especies s en la mezcla. La densidad de cada especie se determina como

$$\rho_s = n_s m_s = \frac{N_{p,s} W_p}{N_{samp} V_c} m_s \quad (5.9)$$

donde n_s es la concentración molecular local de la especie s y m_s es la masa de las moléculas de la especie s , $N_{p,s}$ es el número de partículas simuladas de la especie s dentro de la celda de muestreo, durante N_{samp} pasos de tiempo de muestreo, V_c es el volumen de la celda, y W_p es la cantidad de moléculas reales que representa cada partícula simulada.

A continuación se analiza el efecto de la reducción de la altitud en la densidad del flujo que envuelve al vehículo. Para ello, en la Figura 5.9 se presentan los contornos de densidad, desde los 115 *km* hasta los 95 *km* de altitud. A medida que las partículas se acercan a la superficie del IAD impulsadas por la corriente libre aguas arriba del vehículo, la densidad comienza a aumentar producto de la interacción de estas partículas con las partículas reflejadas desde la superficie del vehículo. Ya en las cercanías de la nariz del IAD, se produce un aumento sustancial de la densidad y la formación de un fuerte gradiente de densidad, fenómeno característico de los flujos hipersónicos sobre superficies frías y romas [73, 88]. Un flujo de pared fría es aquel en que la temperatura superficial (T_w) es menor que la temperatura de la pared adiabática (T_{aw}) [89]. En esta investigación $T_w/T_{aw} \approx 0.035 \ll 1$ para todas las altitudes en estudio, lo que corresponde a un flujo de pared fría. En una pared fría las partículas se reflejan con menor energía que en el caso de una pared caliente ($T_w > T_{aw}$), lo que conduce a menores velocidades de traslación relativas y menores temperaturas de campo de flujo. Así, los reflejos energéticos de paredes más frías aumentan la acumulación neta de densidad de partículas cerca de la superficie [86].

Las partículas que se reflejan desde la superficie frontal del IAD se difunden aguas arriba, como se aprecia en los gráficos de contorno de densidad. A diferencia de la velocidad y la temperatura, la variación de densidad tiene una menor

extensión aguas arriba del vehículo para los casos investigados. Gran parte del aumento de densidad en la onda de choque ocurre después de que la temperatura haya alcanzado su valor máximo. Por ejemplo, a los 95 *km* de altitud la temperatura máxima se alcanza a una distancia de 0.061 *m* de la superficie frontal del IAD. A esta distancia la densidad alcanzada es 2.5 veces la densidad del flujo libre (ρ_∞), mientras que el valor máximo de la densidad adyacente a la nariz del IAD equivale a 40.4 veces ρ_∞ . El nivel de difusión del flujo disminuye a medida que se reduce la altitud, producto del aumento de la densidad atmosférica. Con ello, la onda de choque se adelgaza y el campo de flujo se vuelve más concentrado a medida que se acerca al IAD, presentando a su vez mayores gradientes de densidad. La densidad máxima a los 115 *km* de altitud es de $8.37 \times 10^{-7} \text{ kg/m}^3$, y alcanza un valor de $7.53 \times 10^{-6} \text{ kg/m}^3$ a los 105 *km*, lo que representa un aumento de 9 veces al disminuir 10 *km* la altitud. Si se compara ahora la densidad máxima a los 115 y a los 95 *km* de altitud, lo que representa una reducción de 20 *km* en la altitud, el aumento es de más de 100 veces, alcanzado un valor de $8.43 \times 10^{-5} \text{ kg/m}^3$. Por tanto, el crecimiento de la densidad máxima durante la reentrada es exponencial en el rango de altitud estudiado.

Con respecto al comportamiento de la estela formada aguas abajo del vehículo, los contornos de densidad evidencian que la estela cercana se encuentra en expansión, caracterizado por una densidad baja con respecto a la densidad del flujo libre. La expansión del flujo en la estela cercana se torna menos abrupta a medida que disminuye la altitud. Por su parte, la estela más alejada del vehículo es una extensión de la onda de choque que rodea el hombro del IAD, por lo que se encuentra en compresión con respecto al flujo libre.

De manera similar al estudio de la velocidad y temperatura, se investiga el efecto de la reducción de la altitud en los cinco perfiles de densidad medidos en dirección normal a la superficie del vehículo, según la Figura 5.4. Dado que a diferentes altitudes existe una diferencia de órdenes de magnitud entre las mediciones de densidad, los datos se grafican en escala logarítmica y se presentan en la Figura 5.10. Todos los perfiles muestran como la densidad es baja en los límites del dominio computacional, y conforme las mediciones se acercan al vehículo, se forman fuertes gradientes de densidad. Tanto las mediciones de la densidad como de los gradientes de densidad son de órdenes de magnitud mayores a medida que disminuye la altitud. Esto se observa con mayor claridad al analizar el perfil 1

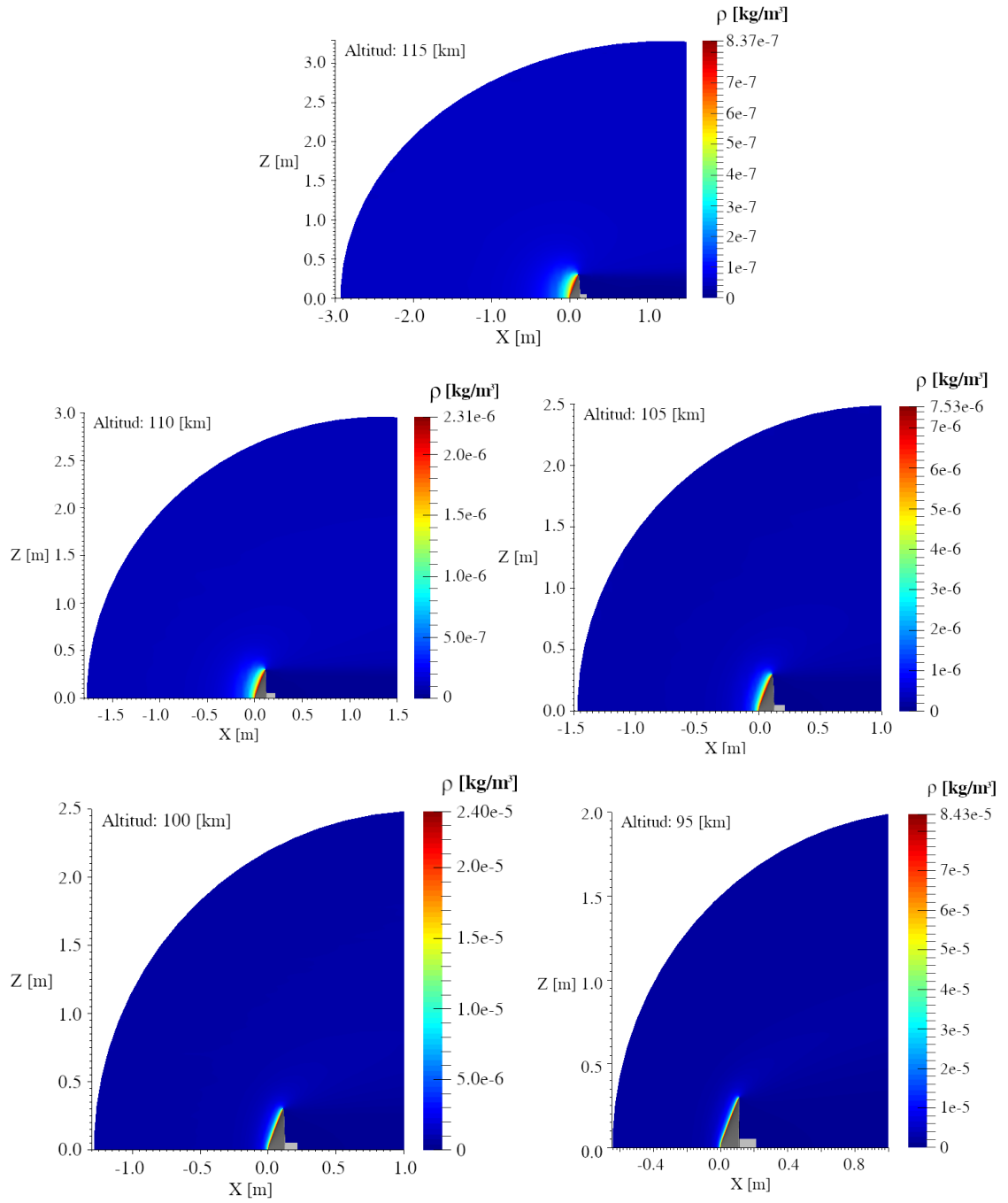


Figura 5.9: Contornos de densidad (ρ) alrededor de la geometría para las altitudes consideradas.

medido a lo largo de la línea de corriente de estancamiento. Estas mediciones muestran el abrupto aumento de la densidad cuando el flujo se acerca a la superficie del vehículo. A los 115 *km* de altitud, la compresión combinada con una pared fría producen que la densidad aumente 19.5 veces, desde el valor de la corriente libre hasta el valor máximo medido sobre la superficie del IAD. A los 105 *km* de altitud este aumento es de 32.4 veces, mientras que a los 95 *km* de altitud el aumento es de 60.5 veces. Conforme la altitud y el grado de rarefacción disminuyen, este aumento se produce más cerca del IAD y, por tanto, los gradientes de densidad son mayores. Este comportamiento es muy similar en las mediciones del perfil 2, realizadas desde el punto x_2 en dirección normal a la superficie de la parte frontal del IAD, por lo que la distribución de densidad se mantiene prácticamente constante sobre gran parte del campo de flujo aguas arriba de la parte frontal del IAD. Una vez que las partículas alcanzan las cercanías del hombro del IAD, se observa una reducción importante en los valores máximos de densidad y en los gradientes de densidad, para todas las altitudes analizadas. Esto se muestra en las mediciones efectuadas en el perfil 3. Específicamente, a los 115 *km* de altitud se alcanza una densidad máxima de $1.26 \times 10^{-7} \text{ kg/m}^3$ en el flujo adyacente al hombro del IAD, lo que representa apenas un 15% del valor máximo alcanzado en la parte frontal del IAD. Este porcentaje se repite a los 95 *km* de altitud, donde el valor máximo de la densidad del flujo adyacente al hombro del IAD es de $1.27 \times 10^{-5} \text{ kg/m}^3$.

Finalmente, en los perfiles 4 y 5 se mide la distribución de densidad en dirección normal a la cara lateral del CubeSat. En el perfil 4 se aprecia la formación de una fuerte zona de expansión del flujo, ocasionado por la presencia del IAD aguas arriba. Con ello, los valores máximos de la densidad continúan disminuyendo a medida que las partículas avanzan hacia la estela cercana. Para $Z < 0.3 \text{ m}$ en los perfiles 4 y 5, la expansión del flujo se refleja en una disminución importante de la densidad, y en consecuencia la formación de altos gradientes de densidad negativos. A los 115 *km* de altitud se alcanza un valor mínimo de la densidad en el perfil 4 de $1.15 \times 10^{-10} \text{ kg/m}^3$, lo que representa un 0.27% de la densidad de la corriente libre. Por su parte, a los 95 *km* de altitud el valor mínimo de la densidad es de $9.01 \times 10^{-8} \text{ kg/m}^3$, que equivale a un 6.47% de la densidad de la corriente libre. Así, conforme disminuye la altitud, la expansión del flujo se torna menos pronunciada. Los gradientes ocasionados por la compresión en $Z > 0.3 \text{ m}$ y la expansión en $Z < 0.3 \text{ m}$, disminuyen su intensidad a medida que las partículas

avanzan desde el perfil 4 al perfil 5. Por su parte, los valores de densidad mínimos alcanzados comienzan a aumentar. En consecuencia, aguas abajo en la estela, los valores de la densidad tienden a aumentar y acercarse al valor de la corriente libre.

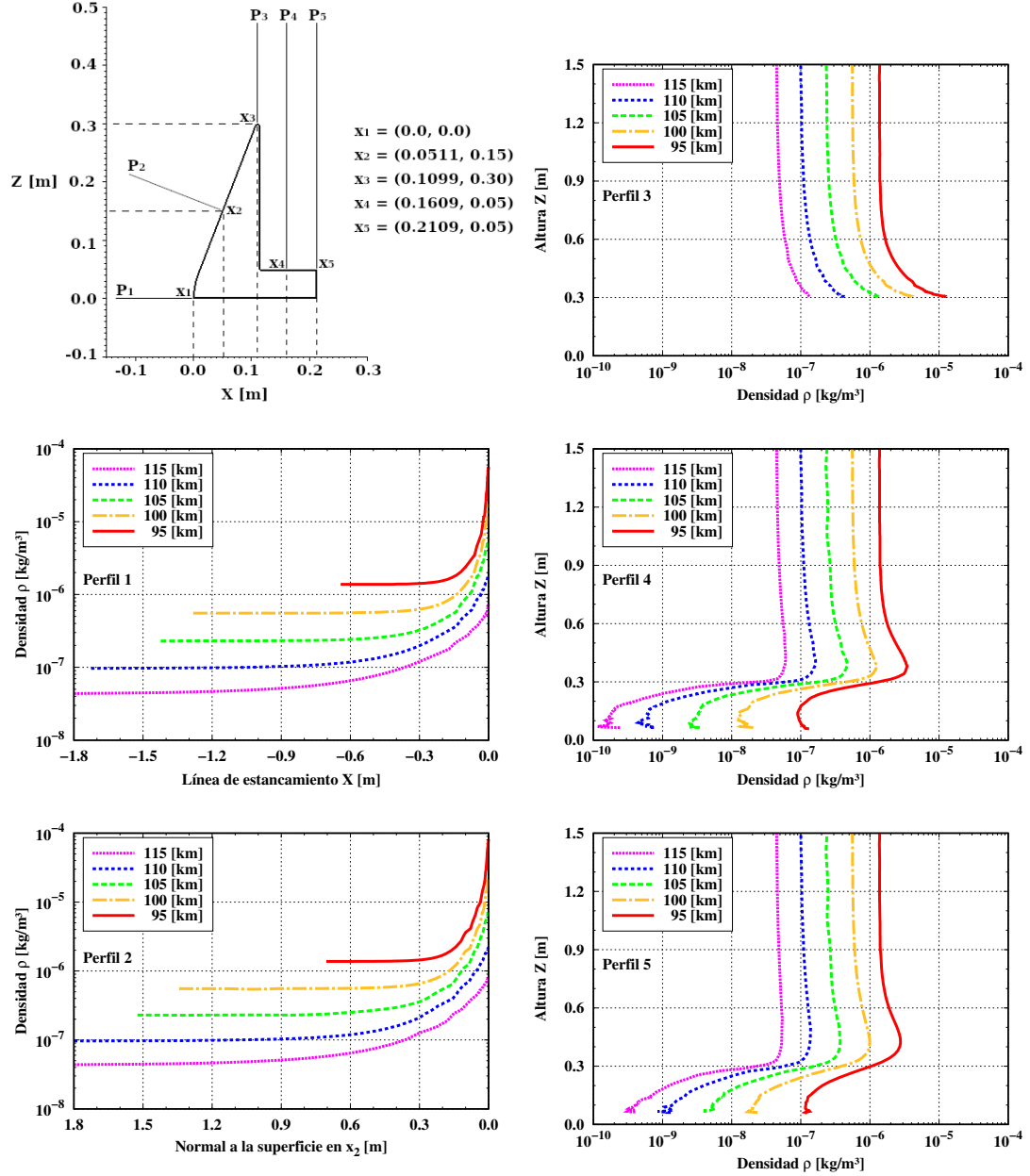


Figura 5.10: Perfiles de densidad en función de la altitud en distintas posiciones normales a la geometría.

Campo de presión del flujo

La presión en una mezcla de gases se obtuvo en el capítulo 3, y está dada por la expresión

$$p = \sum_{s=1}^{N_s} p_s \quad (5.10)$$

donde N_s es la cantidad de especies s que forman la mezcla y p_s es la presión parcial de cada especie, que equivale a

$$p_s = n_s k T_{tr,s} = \frac{1}{3} n_s \langle m_s \vec{C}'^2 \rangle \quad (5.11)$$

donde m_s es la masa de cada una de las moléculas de la especie s , y n_s y $T_{tr,s}$ son la concentración molecular y la temperatura traslacional de cada una de las especies s . Reemplazando n_s (ecuación (3.129)) y $\vec{C}' = \vec{C} - \vec{C}_0$ se obtiene la expresión final para la presión p como:

$$p_s = \frac{N_{p,s} W_p m_s}{3 N_{samp} V_c} \left[\frac{1}{N_{p,s}} \sum_{j=1}^{N_{p,s}} (C_s^2)_j - \langle C_s \rangle^2 \right] \quad (5.12)$$

donde $N_{p,s}$ es el número de partículas DSMC de la especie s simuladas dentro de la celda de muestreo, durante N_{samp} pasos de tiempo de muestreo, V_c es el volumen de la celda y W_p es la cantidad de moléculas reales que representa cada partícula simulada.

En la Figura 5.11 se presentan los contornos de presión del flujo que rodea al vehículo, desde los 115 *km* hasta los 95 *km* de altitud. Según este conjunto de gráficos, se observa la formación de fuertes gradientes de presión del flujo sobre la parte frontal del IAD. La gran cantidad de energía cinética presente en una corriente libre hipersónica se convierte mediante trabajo de flujo en un aumento de la presión [90]. De esta manera, la presión del flujo en la entrada del dominio computacional equivale a la presión del flujo libre (p_∞), y aumenta progresivamente a medida que el flujo se aproxima a la superficie frontal del IAD, alcanzando valores máximos en el flujo adyacente a la superficie.

A medida que el vehículo ingresa en la atmósfera terrestre, los gradientes de presión se aproximan a la parte frontal del IAD. Además, junto con la reducción del nivel de rarefacción atmosférica se produce un aumento en los gradientes de presión y la presión máxima crece exponencialmente. Para las altitudes de 115,

110, 105, 100 y 95 *km* las presiones máximas alcanzadas son de 2.15, 4.92, 11.69, 27.23 y 67.0 *Pa*, respectivamente. Por tanto, durante la reentrada entre los 115 y los 95 *km* de altitud, la presión máxima crece 31 veces. Además, a los 115 *km* de altitud la presión máxima equivale a 536 veces la presión del flujo libre, mientras que a los 95 *km* de altitud la presión máxima aumenta a 882 veces la presión del flujo libre.

Detrás del IAD y en las cercanías del CubeSat el flujo se expande rápidamente, con lo que se alcanzan valores mínimos de presión. Por su parte, aguas abajo del vehículo en la estela lejana no se aprecian variaciones importantes de la presión, y esta tiende a la presión del flujo libre.

En la Figura 5.12 se presentan las distribuciones de presión a lo largo de los cinco perfiles normales a la superficie. La distribución de presión a lo largo de la línea de corriente de estancamiento (perfil 1) es baja aguas arriba del vehículo, y conforme la medición se acerca a la superficie del vehículo la presión aumenta hasta alcanzar un valor máximo en el punto de estancamiento.

La distribución de presión a lo largo del perfil 2 es muy similar al resultado obtenido en la línea de corriente de estancamiento, lo que refleja que el campo de flujo mantiene prácticamente constante su distribución de presión en gran parte de la región frontal del IAD.

A medida que las partículas avanzan en la onda de choque y alcanzan las cercanías del hombro del IAD, la presión disminuye, como se aprecia al comparar los perfiles 1 y 2 con el perfil 3. Así, a los 115 *km* de altitud la presión máxima sobre el hombro del IAD es de 0.45 *Pa*, lo que representa solo el 20.9% de la presión máxima alcanzada en el resto de la onda de choque a esta altitud. A los 95 *km* de altitud la presión máxima sobre el hombro del IAD es de un 29.4% de la presión máxima alcanzada en la onda de choque, con un valor de 19.68 *Pa*. Por tanto, a medida que disminuye la altitud la presión a lo largo de la onda de choque tiende a disminuir con menor intensidad hacia el hombro del IAD.

Con respecto a las mediciones realizadas en los perfiles 4 y 5, para valores de Z altos, la presión equivale a la presión de la corriente libre. A medida que se reduce Z la presión aumenta hasta alcanzar un valor máximo, para luego comenzar a disminuir en las cercanías de la superficie del CubeSat donde ocurre la expansión del flujo. El salto de presión generado en los perfiles 4 y 5 a la altura del hombro ($Z \approx 0.3 \text{ m}$) se produce por la extensión de la onda de choque sobre el hombro.

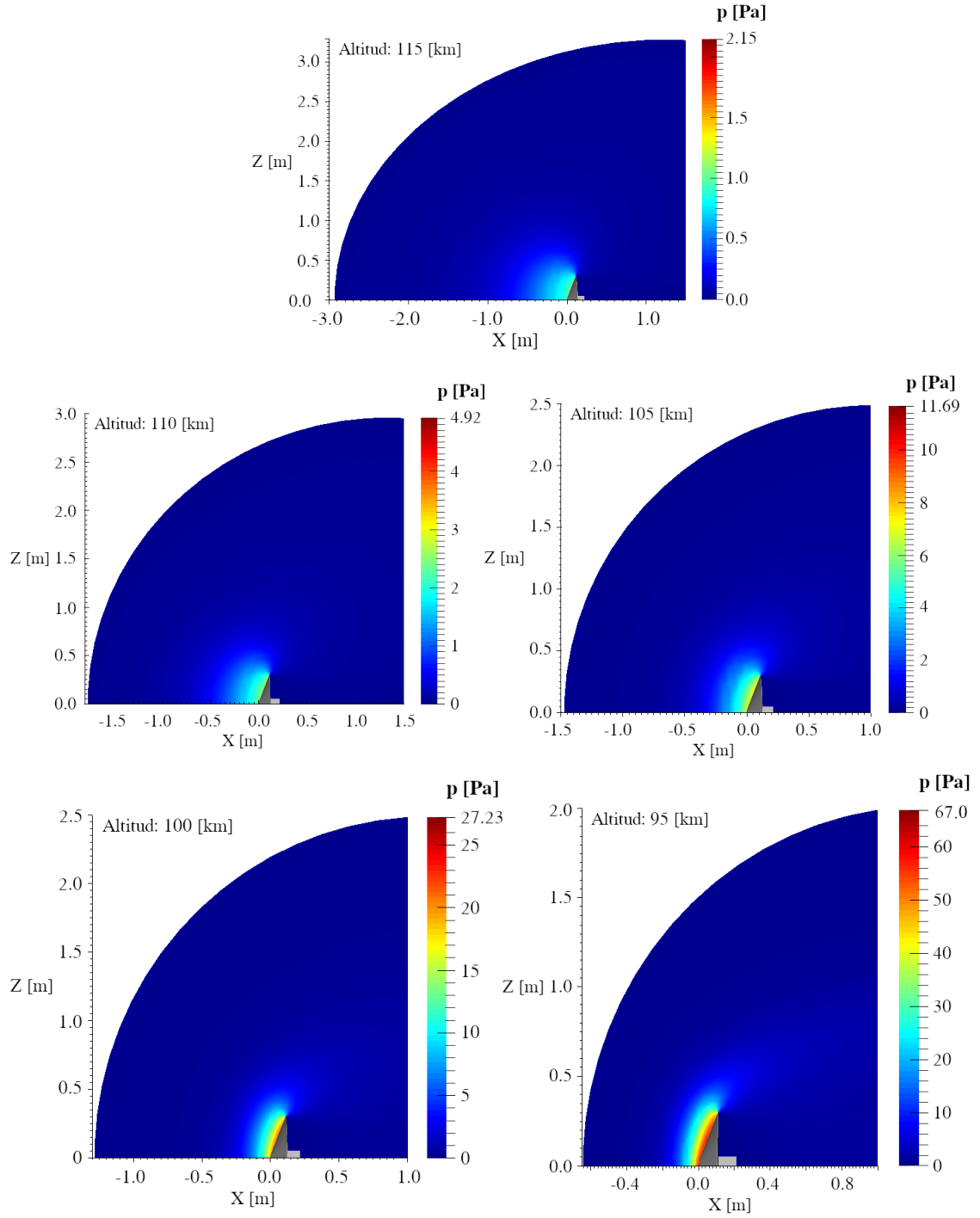


Figura 5.11: Contornos de presión (p) alrededor de la geometría para las altitudes consideradas.

A medida que disminuye la altitud, la influencia de la onda de choque se extiende con mayor intensidad hacia la estela cercana. La presión máxima a los 115 *km* de altitud medida en el perfil 4 es de 0.171 *Pa* y se produce en $Z = 0.44$ *m*, mientras que en el perfil 5 la presión máxima se ubica en $Z = 0.55$ *m* y alcanza un valor de 0.119 *Pa*. Posteriormente, a los 95 *km* de altitud la presión máxima es de 10.33 *Pa* y se ubica en $Z = 0.40$ *m*, mientras que en el perfil 5 la presión máxima equivale 7.60 *Pa* y se ubica en 0.44 *m*. Por tanto, los valores máximos de presión y en general las distribuciones completas, disminuyen continuamente a medida que el flujo rodea al vehículo, como se observa al comparar los perfiles 3, 4 y 5. Además, las distribuciones de presión son exponencialmente mayores a medida que disminuye la altitud, y presentan gradientes más elevados.

Las distribuciones de presión en los perfiles 4 y 5 disminuyen considerablemente para $Z < 0.3$ *m*, alcanzando valores mínimos en el flujo adyacente a la superficie del CubeSat. Así, la presión mínima alcanzada en el perfil 4 a los 115 *km* de altitud es de 6.0×10^{-5} *Pa*, lo que representa un 1.5% de la presión de la corriente libre. Este valor aumenta hasta los 0.0262 *Pa* a los 95 *km* de altitud, lo que representa un 34.5% de la presión de la corriente libre a esa altitud. Por tanto, a medida que la altitud disminuye, la presión en la zona de expansión del flujo aumenta y alcanza valores mínimos mucho más grandes que a altitudes más altas, lo que indica que el nivel de expansión disminuye a menores altitudes. A su vez, para el perfil 5 los valores de la presión mínima son de 2.65×10^{-4} *Pa* y 0.10 *Pa* a los 115 y 95 *km* de altitud, lo que representa un 6.6% y un 131.6% de la presión de la corriente libre, respectivamente. Por tanto, la presión mínima del flujo a lo largo de la cara lateral del CubeSat tiende a aumentar, desde un 1.5% del valor de la corriente libre (en la mitad de la cara) hasta un 6.6% (al final de la cara) a los 115 *km* de altitud, mientras que a los 95 *km* de altitud la presión mínima del perfil 4 pasa del 34.5% del valor de la corriente libre hasta un 131.6% en el perfil 5. Este valor de la presión mínima mayor que la presión de la corriente libre sobre el final de la cara, se produce por la influencia que tiene la onda de choque sobre la estela a altitudes menores.

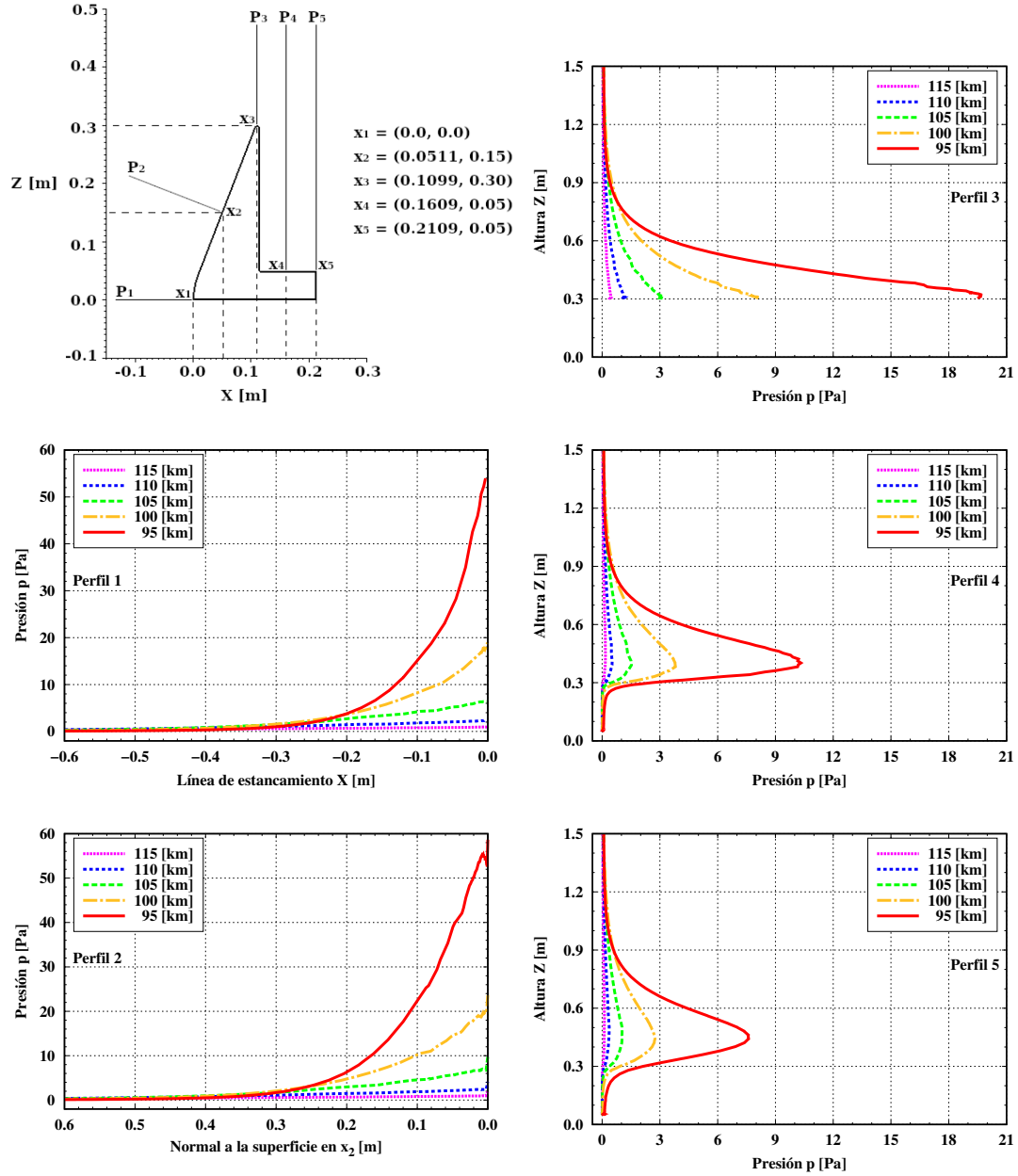


Figura 5.12: Perfiles de presión en función de la altitud en distintas posiciones normales a la geometría.

5.2.2 Propiedades sobre la superficie

En esta sección se analiza la influencia de la variación de la altitud en las propiedades aerotermodinámicas sobre la superficie del AID y del CubeSat, durante la reentrada atmosférica. Específicamente, se estudia el comportamiento del flujo de calor (q), de la presión (p) y del esfuerzo cortante tangencial (τ) sobre la geometría, a altitudes de 115, 110, 105, 100 y 95 km. Se presentan las mediciones de las distribuciones de q , p y τ en función de la longitud de arco de la superficie (s), como se muestra en la Figura 5.13, medidas desde el punto de estancamiento del IAD ($s = 0$), hasta el punto central de la base del CubeSat (s_7).

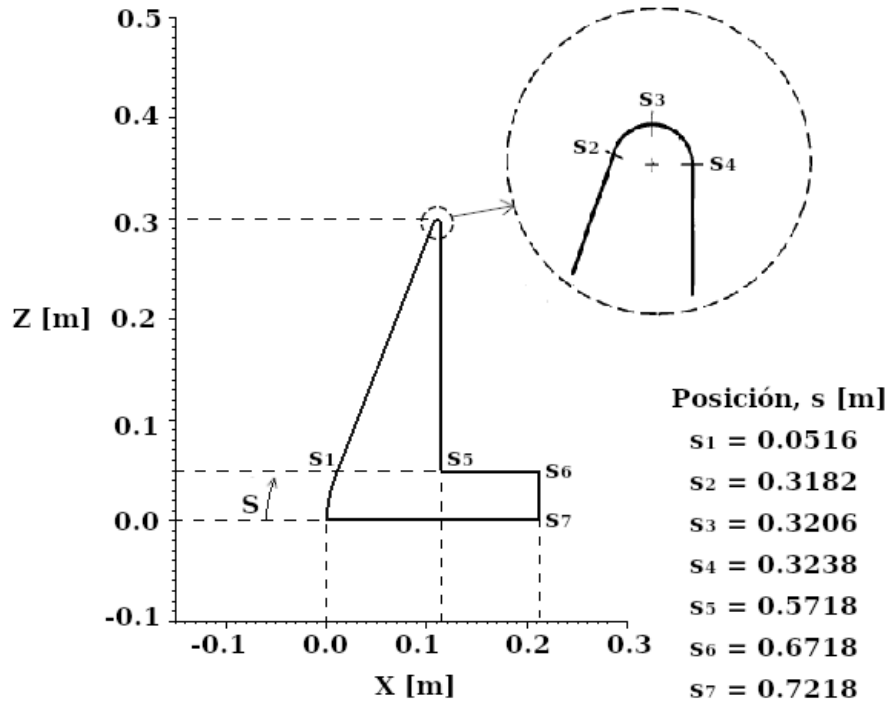


Figura 5.13: Sistema de referencia para medición de propiedades sobre la superficie (s).

Flujo de calor

El flujo de calor (q) sobre la superficie del cuerpo se obtiene como el flujo de energía neto de las moléculas que inciden en la superficie del cuerpo. Las partículas que chocan con la superficie cuentan con energías de traslación, rotación y vibración. La energía neta de las partículas se reduce producto del choque, y es esta pérdida de energía la que la superficie del cuerpo obtiene como flujo de calor neto. Así, el

flujo de calor neto sobre la superficie equivale a la diferencia de energía entre las partículas reflejadas (post-colisión) e incidentes (pre-colisión), según la ecuación (5.13):

$$q = \frac{W_p}{A\Delta t N_{smp}} \sum_{j=1}^{N_{ps}} \left[\left(\frac{1}{2} m_j C_j^2 + \epsilon_{rot,j} + \epsilon_{vib,j} \right)^{post} - \left(\frac{1}{2} m_j C_j^2 + \epsilon_{rot,j} + \epsilon_{vib,j} \right)^{pre} \right] \quad (5.13)$$

dónde W_p es el número de moléculas reales representadas por cada partícula simulada, Δt es el paso de tiempo, N_{smp} es el número de pasos de tiempo de muestreo, A el área de la superficie de la celda, N_{ps} es el número de partículas simuladas j que chocan con la superficie de la celda durante el tiempo de muestreo a una velocidad C , m es la masa de la molécula, y ϵ_{rot} y ϵ_{vib} son las energías rotacional y vibratoria, respectivamente. Cabe mencionar que un flujo de calor se considera positivo si está dirigido hacia la superficie del cuerpo.

Los efectos sobre el flujo de calor debido a la variación de la altitud se muestra en la Figura 5.14. Se comprueba que el flujo de calor en la superficie aumenta en forma exponencial, a medida que disminuye la altitud en el rango analizado. Esto se produce por la disminución de la rarefacción de la atmósfera y el acercamiento de la onda de choque hacia la superficie, a medida que disminuye la altitud. Esto se traduce en el aumento del número de colisiones de partículas con la superficie, donde una cantidad importante de estas partículas pertenecen a la corriente libre hipersónica y, por tanto, cuentan con una alta energía cinética que en parte se transfiere a la superficie durante la colisión. En consecuencia, una menor distancia de separación del choque se asocia con una mayor transferencia de calor hacia la superficie [87].

El flujo de calor es máximo en las proximidades del punto de estancamiento, desde el cual comienza a disminuir progresivamente a lo largo de la superficie y estabilizarse poco antes de alcanzar el hombro del IAD. En las proximidades del hombro del IAD, el flujo de calor comienza a aumentar hasta alcanzar un máximo local en las cercanías de s_2 según la Figura 5.13, para luego disminuir abruptamente en la zona del chaflán del hombro del IAD (entre s_2 y s_4). En la base del IAD (entre s_4 y s_5) el flujo de calor se reduce drásticamente, para luego aumentar suavemente a lo largo de la superficie lateral (entre s_5 y s_6) y alcanzar un máximo local en s_6 , para finalmente reducirse en la base del CubeSat (entre s_4 y s_5). El máximo local del flujo de calor medido en s_6 es de hasta

cuatro órdenes de magnitud menor que el máximo global a la altitud analizada, por lo que es prácticamente imperceptible en la Figura 5.14. Estos resultados permiten corroborar la eficacia del uso de la tecnología IAD para reducir las tasas de calentamiento y por ende las cargas térmicas sobre tecnología satelital.

Como se mencionó anteriormente, el flujo adyacente a la superficie frontal del IAD se compone principalmente de partículas que pertenecieron a la región de la onda de choque y posteriormente colisionaron con la superficie [87]. En esta interacción, parte de la alta energía térmica de las partículas se transmite hacia la superficie en forma de calor, lo que a su vez reduce la energía térmica de las partículas reflejadas y en consecuencia de la temperatura del flujo adyacente. A medida que el flujo se acerca al hombro del IAD, aumenta rápidamente su velocidad impulsada por la corriente libre no perturbada ubicada en las lejanías del eje axial (Z alto). Parte del aumento de la energía cinética de las partículas adyacentes es transferida al hombro en forma de calor, lo que explica el aumento del flujo de calor en s_2 . Posteriormente, entre s_2 y s_3 comienza la expansión del flujo, por lo que se reduce considerablemente la cantidad de partículas que colisionan con la superficie, y por ende disminuye el flujo de calor en esta zona. Ya en la base del IAD y sobre la superficie del CubeSat el flujo ha alcanzado una expansión considerable, por lo que la cantidad de partículas que colisionan con la superficie es muy bajo, lo que explica la disminución del flujo de calor en esta zona.

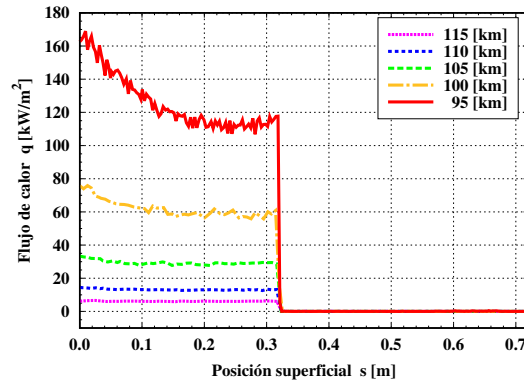


Figura 5.14: Distribución del flujo de calor a lo largo de la superficie geométrica al variar la altitud.

En la Figura 5.15 se presentan los contornos de flujo de calor sobre la superficie de la parte frontal del IAD (hasta $s_3 = 0.3206$ m), para cada una de las altitudes

analizadas. Se escoge únicamente la parte frontal del IAD dado que es en esta zona donde se alcanzan valores significativos, producto del impacto directo del flujo y la alta tasa de colisión partícula-superficie. Los contornos del flujo de calor corroboran el análisis anterior, y muestran como a una altitud de 115 *km* el flujo de calor máximo es de apenas 6.906 kW/m^2 y se ubica en las cercanías del punto de estancamiento. Posteriormente, a los 110, 105, 100 y 95 *km* de altitud, se encuentran valores máximos de 15.029, 39.491, 79.767 y 180.426 kW/m^2 , respectivamente, por lo que el flujo de calor durante la reentrada tiene un crecimiento exponencial. Por su parte, los valores mínimos alcanzados se ubican en el borde del hombro del IAD, en s_3 , donde se logra divisar en las figuras de contorno una coloración azulada en todo el borde. Esto muestra la disminución abrupta del flujo de calor que se genera en el chaflán del hombro del IAD, generado por una disminución importante de colisiones en esta zona. Los valores mínimos alcanzados en s_3 son de 1.924, 3.995, 8.883, 16.100 y 30.899 kW/m^2 , para las altitudes de 115, 110, 105, 100 y 95 *km*, respectivamente.

Los cambios de coloración de los contornos evidencian los cambios en los gradientes del flujo de calor en la superficie, siendo más grandes a medida que disminuye la altitud. A los 115 *km* de altitud, la curva del flujo de calor es bastante plana, con valores cercanos al 90% del valor máximo del flujo de calor en toda esta zona, salvo en la nariz del IAD donde se encuentra el valor máximo. A los 95 *km* de altitud la disminución del flujo de calor alcanza valores cercanos al 65% del flujo de calor máximo, para luego volver a aumentar en el hombro del IAD a un valor cercano al 70% del valor máximo.

El flujo de calor máximo alcanzado sobre la superficie del CubeSat se ubica en las cercanías del borde de salida de este (punto s_6 de la Figura 5.13), y alcanza valores de 1.96×10^{-3} , 7.43×10^{-3} , 2.81×10^{-2} , 1.84×10^{-1} y 1.14 kW/m^2 a los 115, 110, 105, 100 y 95 *km* de altitud. Estos valores representan desde un 0.028% del flujo de calor máximo a los 115 *km* de altitud, hasta un 0.63% del flujo de calor máximo a los 95 *km* de altitud. Pese a que el flujo de calor sobre el CubeSat se reduce drásticamente producto del uso del IAD, se observa como a medida que se reduce la altitud el flujo de calor máximo sobre el CubeSat aumenta tanto en magnitud como en porcentaje con respecto al máximo global a la altitud estudiada.

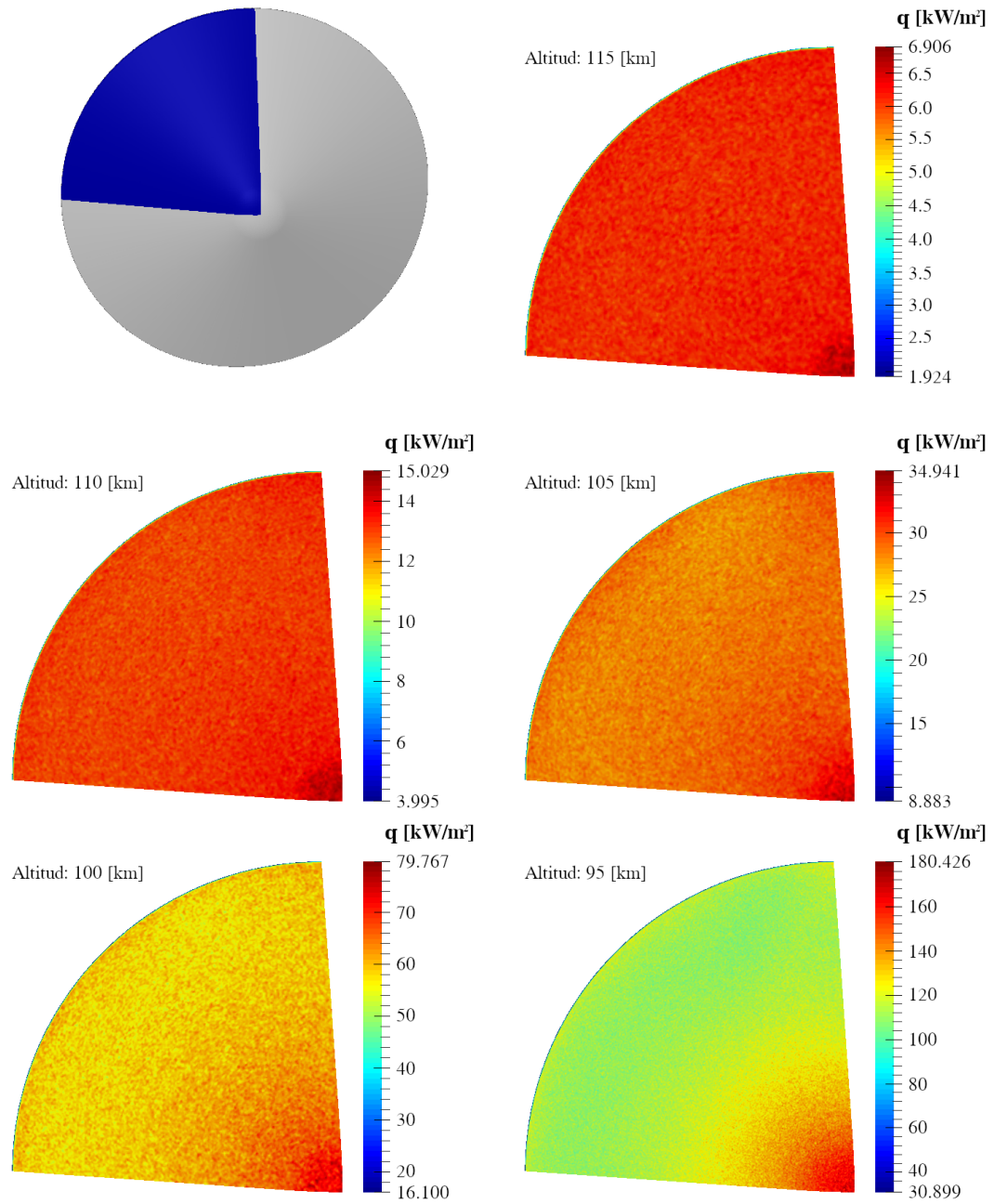


Figura 5.15: Contornos de flujo de calor (q) sobre la superficie de la parte frontal del IAD a diferentes altitudes.

Presión superficial

En el capítulo 3, se obtuvo la expresión para las componentes cartesianas del flujo neto de cantidad de movimiento \vec{F}_M en cada elemento de área (Ecuación 5.19) como:

$$F_{M_i} = -\frac{W_p}{A\Delta t N_{samp}} \sum_{j=1}^{N_{ps}} m_j (C_i^{post} - C_i^{pre})_j \quad (5.14)$$

donde m_j es la masa del tipo de molécula que representa la partícula simulada j , C_i^{pre} y C_i^{post} son las componentes de la velocidad en la dirección coordenada i en el instante previo y posterior a la colisión con la superficie, respectivamente. A partir de esta expresión se puede determinar la presión superficial p en cada elemento de área como:

$$p = -\vec{F}_M \cdot \hat{n} = -(F_{M_x}n_x + F_{M_y}n_y + F_{M_z}n_z) \quad (5.15)$$

donde \hat{n} es el vector unitario en dirección normal a la superficie en el elemento de área. Esta expresión es equivalente a la suma de los flujos de momento normales de las moléculas incidentes y reflejadas por unidad de tiempo:

$$p = \frac{W_p}{A\Delta t N_{samp}} \sum_{j=1}^{N_{ps}} m_j (C_n^{post} - C_n^{pre})_j \quad (5.16)$$

donde C_n es la componente normal de la velocidad de la partícula simulada j .

En la Figura 5.16 se presenta la variación de la presión (p) a lo largo de la superficie de la geometría al disminuir la altitud. Se observa como la presión sobre la superficie aumenta durante la reentrada atmosférica, generado por la disminución del grado de rarefacción de la atmósfera, lo que conlleva un aumento de la cantidad de partículas que colisionan con la superficie.

Para todas las altitudes analizadas se observa que la presión superficial es máxima en las cercanías del punto de estancamiento, y disminuye progresivamente sobre la nariz del IAD, hasta alcanzar s_1 . Este valor máximo de la presión en el punto de estancamiento se debe a que la media de la velocidad de las partículas que embisten este punto, tiene mayoritariamente componente de velocidad normal a la superficie, además de existir una concentración de partículas en las cercanías de este punto. Luego, la presión superficial se estabiliza en la parte frontal del IAD (desde s_1 hasta $s \approx 2.5 m$), por lo que las curvas se tornan planas. Posteriormente,

poco antes de alcanzar el hombro del IAD (entre $s \approx 2.5 \text{ m}$ y s_2), la presión comienza a disminuir paulatinamente hasta alcanzar s_2 . A medida que disminuye la altitud, la presión superficial disminuye con mayor intensidad en las cercanías del hombro del IAD y, por tanto, se alcanzan valores menores de la presión en s_2 .

En la zona del chaflán del IAD (entre s_2 y s_4) la presión disminuye considerablemente hasta alcanzar valores muy bajos. Es en esta región donde comienza la expansión del flujo hacia la parte trasera del IAD, que se caracteriza por una disminución considerable de la concentración de partículas y de la velocidad de estas, lo que genera una disminución en el número de colisiones con la superficie y una reducción del flujo neto de cantidad de movimiento hacia esta. Así, entre s_4 y s_5 la presión alcanza valores mínimos, órdenes de magnitud inferior a la presión de la parte frontal del IAD, para luego comenzar a aumentar progresivamente en la superficie lateral del CubeSat (entre s_5 y s_6), y volver a disminuir en la base del CubeSat (entre s_6 y s_7).

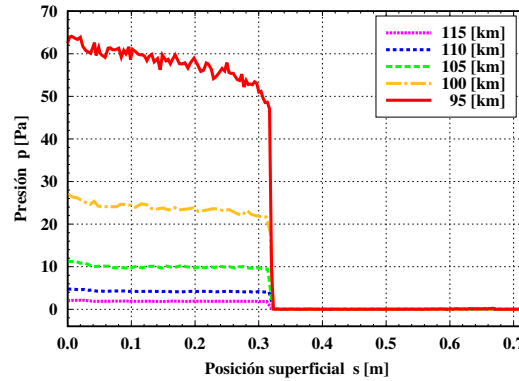


Figura 5.16: Distribución de la presión a lo largo de la superficie geométrica al variar la altitud.

En la Figura 5.17 se presentan los contornos de presión sobre la superficie de la parte frontal del IAD (hasta $s_3 = 0.3206 \text{ m}$), para cada una de las altitudes analizadas. Se muestra como a las altitudes de 115, 110, 105, 100 y 95 km , se encuentran valores máximos de la presión superficial de 2.239, 4.945, 11.920, 28.376 y 68.891 Pa , respectivamente, por lo que el crecimiento de la presión máxima durante la reentrada es exponencial. Por su parte, los valores mínimos alcanzados se ubican en el borde del hombro del IAD, en s_3 . Esto evidencia la disminución abrupta de la presión que se genera en el chaflán del hombro del IAD, generado por una disminución importante de colisiones de partículas con una gran

componente de velocidad normal en esta zona, además de la disminución de la densidad y la presión del flujo. Los valores mínimos alcanzados en s_3 son de 0.409, 0.759, 1.940, 4.368 y 9.432 Pa , para las altitudes de 115, 110, 105, 100 y 95 km , respectivamente. Por otra parte, los gradientes de presión en la superficie del IAD son más grandes en las cercanías del hombro y más pequeños en las cercanías de la nariz del IAD a medida que disminuye la altitud.

Al igual que el flujo de calor, la presión máxima sobre la superficie del CubeSat se alcanza en las cercanías del borde de salida de este. Para las altitudes de 115, 110, 105, 100 y 95 km se alcanzan los valores de 1.42×10^{-3} , 4.61×10^{-3} , 1.47×10^{-2} , 9.55×10^{-2} y 4.42×10^{-1} Pa , respectivamente. Estos valores representan desde un 0.063% de la presión máxima a los 115 km de altitud, hasta un 0.64% de la presión máxima a los 95 km de altitud. Por tanto, durante la reentrada atmosférica la presión máxima sobre el CubeSat aumenta, pero es cuatro órdenes de magnitud menor que la presión máxima en el IAD a los 115 km de altitud y tres órdenes de magnitud inferior a los 95 km de altitud, por lo que el IAD cumple su objetivo de reducir considerablemente la presión superficial y por ende las cargas mecánicas sobre el CubeSat.

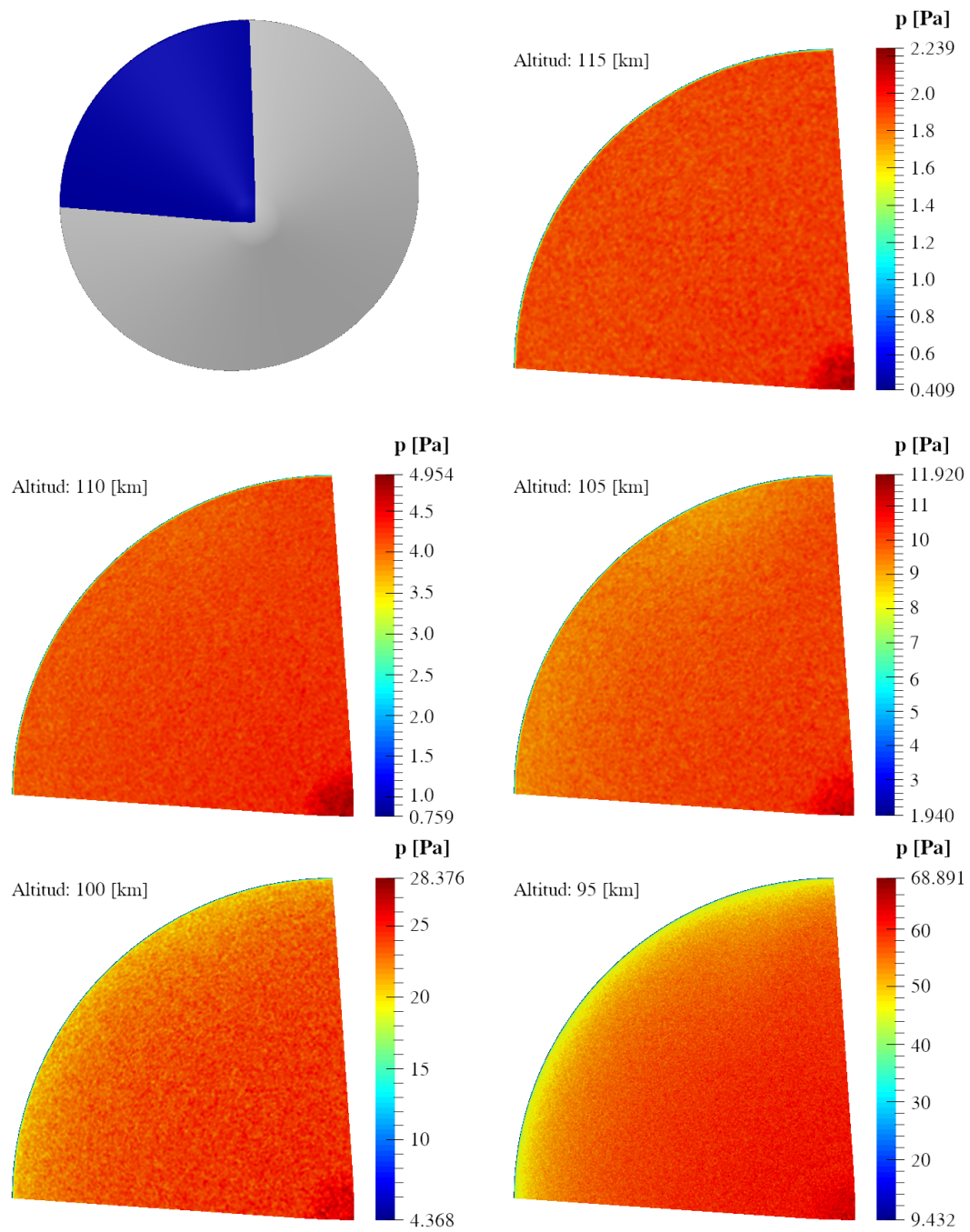


Figura 5.17: Contornos de presión (p) sobre la superficie de la parte frontal del IAD a diferentes altitudes.

Esfuerzo cortante superficial

Al igual que la presión superficial, el esfuerzo cortante superficial (τ) en cada elemento de área del cuerpo se puede expresar en términos del flujo neto de cantidad de movimiento \vec{F}_M , como:

$$\tau = \vec{F}_M \cdot \hat{t} = F_{M_x} t_x + F_{M_y} t_y + F_{M_z} t_z \quad (5.17)$$

Esta expresión es equivalente a la suma de los flujos de momento tangencial de las moléculas incidentes y reflejadas, que chocan con la superficie en cada paso de tiempo,

$$\tau = -\frac{W_p}{A\Delta t N_{samp}} \sum_{j=1}^{N_{ps}} m_j (C_t^{post} - C_t^{pre})_j \quad (5.18)$$

donde C_t es la componente tangencial de la velocidad de la partícula simulada j . Para el caso particular de la reflexión completamente difusa, que es el modelo de interacción gas-superficie adoptado en el presente trabajo, las moléculas reflejadas tienen un momento tangencial igual a cero, ya que las moléculas esencialmente pierden, en promedio, sus componentes de velocidad tangencial. De esta manera, el flujo de momento tangencial reflejado es cero, y la expresión para el esfuerzo cortante es por tanto equivalente a

$$\tau = \frac{W_p}{A\Delta t N_{samp}} \sum_{j=1}^{N_{ps}} m_j (C_t^{pre})_j \quad (5.19)$$

El impacto del esfuerzo de corte (τ) sobre la superficie debido a la variación de la altitud, se muestra en la Figura 5.18. Al igual que la presión y el flujo de calor, se observa como el esfuerzo cortante sobre la superficie aumenta durante la reentrada atmosférica, como consecuencia del aumento de la densidad atmosférica. Pero contrario a la presión y al flujo de calor, el esfuerzo cortante es bajo en el punto de estancamiento y aumenta hasta un valor máximo en el hombro del IAD. Esto se debe a que en la línea de corriente de estancamiento no existe componente de velocidad media tangencial, mientras que en las cercanías del hombro del IAD esta componente es máxima.

La Figura 5.18 muestra además, como para todas las altitudes en estudio, el esfuerzo cortante superficial es mínimo en las cercanías del punto de estancamiento, y aumenta rápidamente sobre la nariz del IAD, hasta alcanzar s_1 , para posterior-

mente estabilizarse entre s_1 y $s = 0.15 \text{ m}$, y continuar creciendo desde $s = 0.15 \text{ m}$ hasta alcanzar un valor máximo en s_2 . Luego de alcanzar el hombro del IAD, el esfuerzo cortante disminuye abruptamente en el chaflán del IAD (entre s_2 y s_4). Ya en la base del IAD (entre s_4 y s_5) caracterizada por la presencia de la expansión del flujo, el esfuerzo cortante se mantiene en valores muy bajos para luego aumentar progresivamente en la superficie lateral (entre s_5 y s_6) del CubeSat. Finalmente, en la base del CubeSat (entre s_6 y s_7) los valores del esfuerzo cortante vuelven a disminuir.

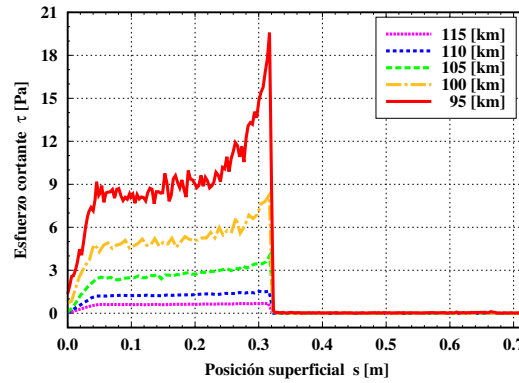


Figura 5.18: Distribución del esfuerzo cortante a lo largo de la superficie geométrica al variar la altitud.

En la Figura 5.19 se presentan los contornos de esfuerzo cortante sobre la superficie de la parte frontal del IAD (hasta $s_3 = 0.3206 \text{ m}$), para cada una de las altitudes estudiadas. Se muestra como el esfuerzo cortante crece en forma exponencial a medida que disminuye la altitud, generado por la variación en órdenes de magnitud de la densidad atmosférica. Así, a las altitudes de 115, 110, 105, 100 y 95 km , se encuentran valores máximos del esfuerzo cortante de 0.933, 1.980, 4.550, 9.772 y 21.37 Pa , respectivamente. Por su parte, los valores mínimos alcanzados en la parte frontal del IAD se ubican en el punto de estancamiento, y desde los 115 a los 95 km de altitud equivalen a 0.033, 0.028, 0.038, 0.323 y 0.547 Pa .

Los cambios de coloración de los contornos evidencian que a medida que disminuye la altitud, el esfuerzo cortante crece con menor intensidad en la nariz del IAD y con mayor intensidad en las cercanías del hombro del IAD a medida que se alcanza al valor máximo en s_2 . Así, a los 115 km de altitud el esfuerzo de corte en s_1 es del 76% del esfuerzo cortante máximo, mientras que a los 95 km este valor es del 46%.

Con respecto al esfuerzo cortante sobre la superficie del CubeSat, el valor máximo se alcanza en las cercanías del borde de salida. Para las altitudes de 115, 110, 105, 100 y 95 *km* se alcanzan los valores de 8.46×10^{-4} , 2.42×10^{-3} , 8.57×10^{-3} , 5.42×10^{-2} y 1.87×10^{-1} *Pa*, respectivamente. Estos valores representan desde un 0.09% del esfuerzo cortante máximo a los 115 *km* de altitud, hasta un 0.88% del esfuerzo cortante máximo a los 95 *km* de altitud. Por tanto, de igual forma que el flujo de calor y la presión, durante la reentrada atmosférica el esfuerzo cortante máximo sobre el CubeSat aumenta, siendo cuatro órdenes de magnitud menor que el valor máximo en el IAD a los 115 *km* de altitud, y tres órdenes de magnitud inferior a los 95 *km* de altitud. Se verifica así que el IAD es efectivo en la reducción del esfuerzo cortante superficial sobre el CubeSat y por ende de protegerlo durante la reentrada.

El esfuerzo cortante nos entrega una información adicional, dado que si este experimentara una inversión de signo, sería indicativo de la presencia de recirculación del flujo. En este caso el esfuerzo cortante es positivo a lo largo de toda la superficie y para todas las altitudes analizadas, por lo que se confirma que no existe el desarrollo de recirculación.

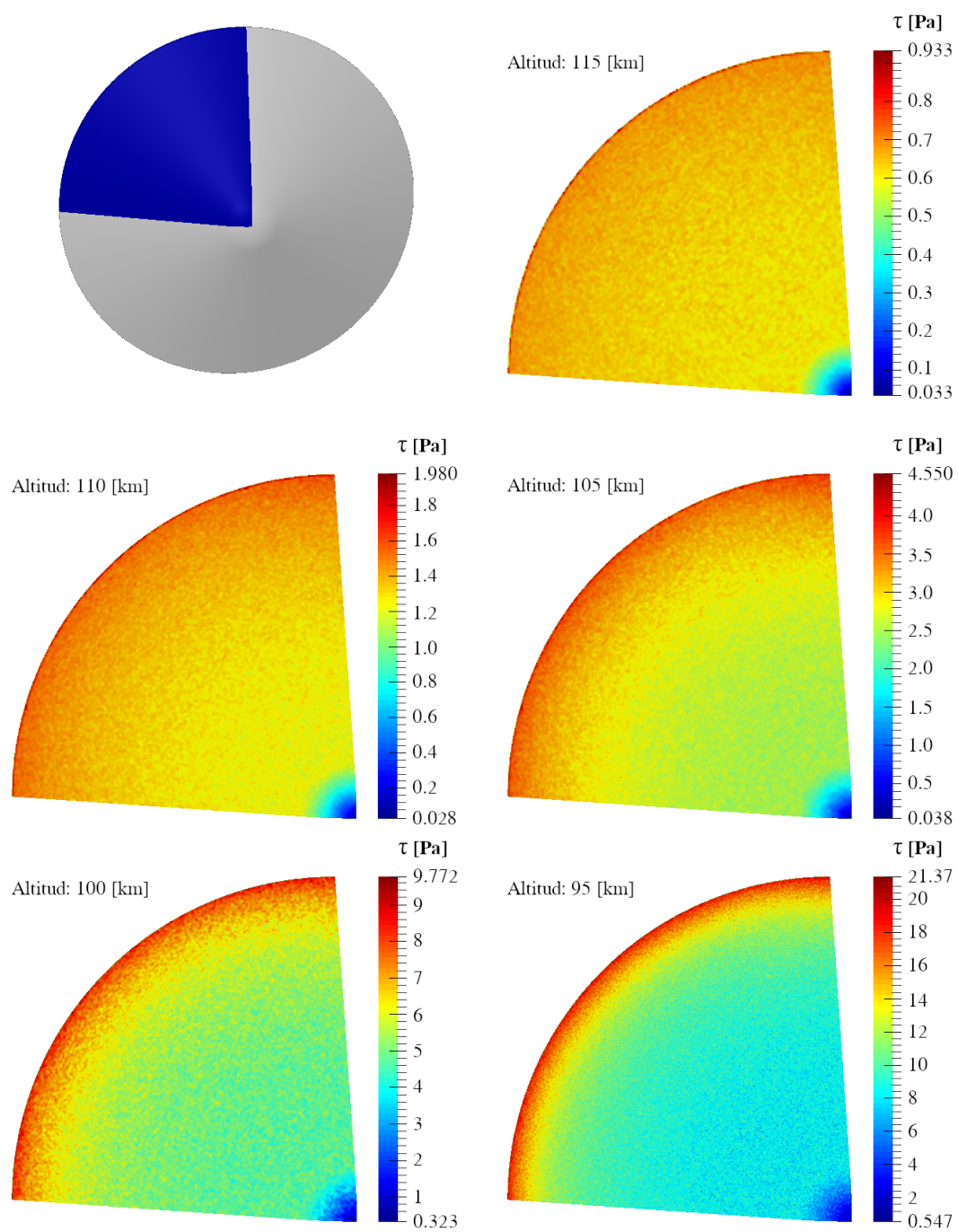


Figura 5.19: Contornos de esfuerzo cortante (τ) sobre la superficie de la parte frontal del IAD a diferentes altitudes.

5.2.3 Fuerzas aerodinámicas

Dada la simetría con respecto a los planos $Y = 0$ y $Z = 0$, tanto de la geometría como del flujo, la única fuerza aerodinámica neta que actúa sobre el cuerpo es la fuerza de arrastre (\vec{F}_d), que a su vez es equivalente a la fuerza axial (\vec{F}_a). Por su parte, la fuerza de sustentación (\vec{F}_l) es equivalente a la fuerza normal (\vec{F}_n) y ambas son nulas. La fuerza de arrastre corresponde a la componente de la fuerza total \vec{F}^{total} sobre el cuerpo, que actúa en dirección paralela a la velocidad del flujo libre (V_∞). Sea \hat{d} el vector unitario en la dirección de la velocidad del flujo libre, dado por $\hat{d} = \vec{V}_\infty / |\vec{V}_\infty|$, la fuerza de arrastre se obtiene como:

$$\vec{F}_d = (\vec{F}^{total} \cdot \hat{d})\hat{d} \quad (5.20)$$

donde las componentes i de la fuerza total (F_i^{total}) están dadas por la ecuación (3.150), obtenida a partir del flujo neto de cantidad de movimiento \vec{F}_M . La expresión para la fuerza total se recuerda a continuación:

$$F_i^{total} = \sum_{e=1}^{N_e} (F_{M_i} A)_e \quad (5.21)$$

donde N_e son todos elementos de la superficie.

Otra alternativa para expresar la fuerza de arrastre es en términos de la presión superficial y el esfuerzo cortante superficial. Para ello, en cada elemento de área e actúa una fuerza normal a la superficie generada por la presión ($(\vec{F}_n)_e = (p\hat{n}A)_e$, donde A es el área del elemento), y una fuerza tangente a la superficie generada por el esfuerzo cortante ($(\vec{F}_t)_e = (\tau A)_e$). Estas fuerzas contribuyen a la fuerza de arrastre y sustentación en el elemento de área. La magnitud de la contribución a la fuerza de arrastre se determina como el producto punto con \hat{d} . Así, la fuerza de arrastre en el elemento de área se puede expresar como:

$$(\vec{F}_d)_e = (\vec{F}_{d,n})_e + (\vec{F}_{d,t})_e = [(\vec{F}_n)_e \cdot \hat{d}]\hat{d} + [(\vec{F}_t)_e \cdot \hat{d}]\hat{d} \quad (5.22)$$

Con esta expresión, la fuerza de arrastre total \vec{F}_d no es más que la sumatoria de $(\vec{F}_d)_e$ en cada uno de los N_{ps} elementos de área. Por su parte, $\vec{F}_{d,n}$ es la contribución a la fuerza de arrastre generada por la fuerza normal, mientras que $\vec{F}_{d,t}$ es la contribución generada por la fuerza tangente a la superficie.

Una vez definido la fuerza de arrastre, se puede expresar el coeficiente de arrastre (C_d) como:

$$C_d = \frac{F_d}{\frac{1}{2}\rho_\infty V_\infty^2 A} \quad (5.23)$$

donde, en este caso, A es un área de referencia considerada para este caso como el área frontal del IAD, equivalente a $A = \pi 0.3^2 \text{ m}^2$.

Los cambios en la fuerza de arrastre (F_d) y el coeficiente de arrastre (C_d) debido a las variaciones de la altitud, se presentan en la Tabla 5.5, y se muestran gráficamente en las Figuras 5.20a y 5.20b, respectivamente. En la misma tabla y figuras se presentan las contribuciones de la fuerza normal ($F_{d,n}$) y de la fuerza tangente ($F_{d,t}$) a la fuerza de arrastre total F_d . De igual modo, se presentan las contribuciones del coeficiente de arrastre normal ($C_{d,n}$) y tangencial ($C_{d,t}$), al coeficiente de arrastre total C_d . De acuerdo con estos gráficos, se observa que durante la reentrada atmosférica en el rango de 115 *km* a 95 *km* de altitud, la fuerza de arrastre tiene una tendencia de crecimiento exponencial, con valores que van desde los 0.600 *N* hasta los 16.768 *N*. El aumento de la fuerza de arrastre durante la reentrada se debe al aumento de la presión y de la densidad del flujo libre, lo que genera un aumento en la cantidad de partículas que colisionan con la superficie. Esto se traduce en un aumento del flujo neto de cantidad de movimiento \vec{F}_M . Por su parte, el coeficiente de arrastre decrece con una tendencia lineal durante la reentrada atmosférica, con valores que van desde $C_d = 2.029$ a los 115 *km* de altitud, hasta $C_d = 1.759$ en los 95 *km* de altitud. Se observa como la fuerza de arrastre, y en consecuencia también el coeficiente de arrastre, están formados principalmente por la componente normal generada por la presión, característico de cuerpos contundentes. La componente normal $F_{d,n}$ representa un 88.17% de la fuerza de arrastre total F_d a los 115 *km* de altitud, y aumenta hasta un 93.03% a los 95 *km*, por lo que la contribución de la presión a la fuerza de arrastre total aumenta durante la reentrada en el rango de altitud analizado. Adicionalmente, debe tenerse presente que el coeficiente de arrastre disminuye con la altitud pese a que la fuerza de arrastre se comporta en forma contraria, producto del aumento de la densidad del flujo libre durante la reentrada, variable que se encuentra en el denominador de la ecuación (5.23).

Tabla 5.5: Componentes normal y tangencial de la fuerza de arrastre y del coeficiente de arrastre.

Altitud H	Fuerza de arrastre [N]			Coeficiente de arrastre		
	$F_{d,n}$	$F_{d,t}$	F_d	$C_{d,n}$	$C_{d,t}$	C_d
115	0.529	0.070	0.600	1.791	0.238	2.029
110	1.17	0.149	1.314	1.753	0.223	1.969
105	2.73	0.322	3.057	1.712	0.202	1.917
100	6.48	0.631	7.113	1.689	0.164	1.854
95	15.6	1.178	16.768	1.637	0.124	1.759

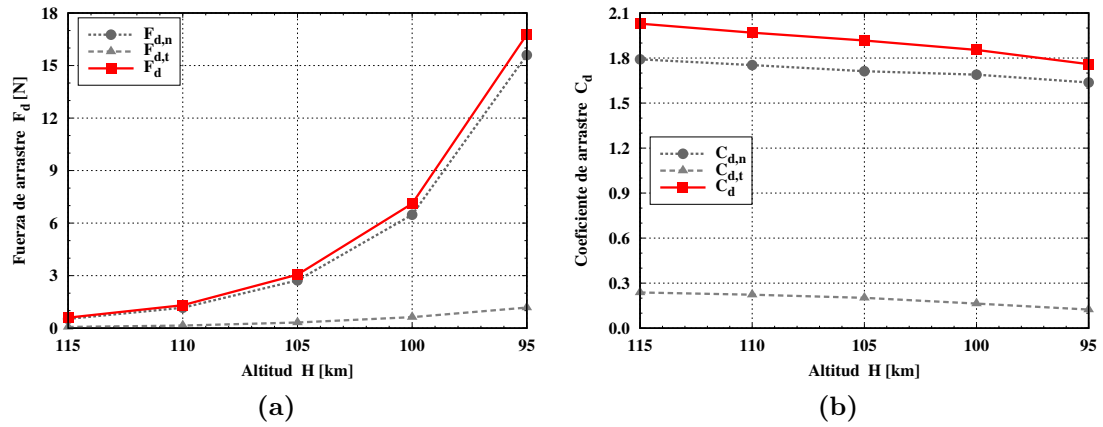


Figura 5.20: (a) Fuerza de arrastre (F_d) y (b) coeficiente de arrastre (C_d), y sus contribuciones normal (n) y tangencial (t) a la superficie.

Capítulo 6

Conclusiones

En esta investigación se aplicó el método Direct Simulation Monte Carlo (DSMC) para evaluar el efecto de la variación de la altitud en la estructura del campo de flujo alrededor de un IAD acoplado a un CubeSat, y en las propiedades aerodinámicas y aerotermodinámicas sobre su superficie, durante la reentrada atmosférica. Para ello, primero se efectuó un proceso de verificación y validación del código dsmcFoam+. El objetivo fue comprobar su capacidad para resolver flujos de gas químicamente no reactivos y de alta velocidad, durante el régimen de flujo de transición. Así, se utilizó el caso de prueba de un modelo de la sonda Mars Pathfinder, sumergido en un flujo de nitrógeno a una velocidad de 1502.56 m/s y en condiciones de número de Knudsen igual a 0.034.

En el proceso de validación se compararon los resultados obtenidos con el código dsmcFoam+, con datos experimentales obtenidos en el túnel de viento de baja densidad SR3 de CNRS, y simulaciones computacionales desarrolladas con el código DAC de NASA. Se encontró una buena concordancia entre las distintas comparaciones realizadas. Además, el proceso de verificación mostró que siempre que se respetaron las buenas prácticas del método DSMC, los resultados condujeron a soluciones independientes de los parámetros analizados. Basado en los buenos resultados obtenidos, el código dsmcFoam+ se validó para su uso en flujos de gas hipersónicos enrarecidos y químicamente no reactivos, sobre geometrías de tipo cono romo, con aplicaciones como la reentrada atmosférica de vehículos espaciales.

La segunda parte de esta investigación se centró en el análisis de desaceleradores aerodinámicos inflables (IAD), que podrán ser usados en CubeSats para

protegerlos durante la reentrada atmosférica. La geometría del IAD considerada en esta investigación tiene un ángulo de medio cono de 68.82° y un diámetro en configuración desplegado de 0.6 m . El estudio se focalizó en el régimen de flujo en transición, que para esta investigación equivale al rango de altitudes entre los 115 y 95 km , y un régimen de velocidad hipersónico a la velocidad de reentrada de 7000 m/s .

Los resultados mostraron la formación de una fuerte onda de choque altamente difusa aguas arriba del vehículo. La interacción entre las partículas del flujo hipersónico y la superficie, reduce la energía cinética de las partículas, lo que disminuye la velocidad del flujo y aumenta su temperatura. Parte de esta energía se convierte mediante trabajo de flujo en un aumento de la presión del flujo. Los reflejos de las partículas con la pared son de tipo pared fría, lo que conduce a una disminución de la temperatura y un aumento de la densidad del campo de flujo adyacente a la superficie frontal del IAD. Esto, combinado con el aumento de la concentración de partículas aguas arriba del vehículo, genera un aumento progresivo de la densidad y de la presión a medida que el flujo se acerca al IAD. Sobre el hombro del IAD comienza una abrupta expansión del flujo hacia la región de la estela cercana, caracterizada por un aumento importante del grado de rarefacción del flujo. Esto genera que las propiedades macroscópicas analizadas (velocidad, temperatura, densidad y presión) disminuyan hasta alcanzar valores mínimos en la estela cercana. Además, no se observa la formación de recirculación del flujo para ninguna de las altitudes analizadas.

Con respecto a las cantidades superficiales, el flujo de calor, la presión y el esfuerzo cortante, alcanzaron valores máximos sobre la superficie frontal del IAD, y disminuyeron a valores mínimos a medida que el flujo se expandía alrededor del hombro y alcanzaba la base del IAD. Los valores máximos del flujo de calor y de la presión se generan en las cercanías del punto de estancamiento, mientras que el esfuerzo cortante máximo se produce en las cercanías del hombro del IAD. Esto se debe al aumento de la concentración del flujo adyacente a la nariz del IAD, y al aumento de la componente de velocidad media tangencial en las cercanías del hombro. Ya sobre la cara lateral del CubeSat, las cantidades superficiales comenzaron a aumentar gradualmente, alcanzando máximos locales sobre el borde de salida del CubeSat. Las cantidades superficiales sobre el CubeSat no superaron el 1% del valor máximo de la parte frontal del IAD, para cada altitud analizada. Estos resultados permiten corroborar la eficacia del uso de IADs para reducir las

cargas térmicas y mecánicas sobre CubeSats.

Se observó que la variación de la altitud tiene una influencia significativa en la estructura del campo de flujo y en las cantidades sobre la superficie. Durante la entrada atmosférica, la onda de choque disminuye su nivel de difusión y se aproxima a la superficie frontal del IAD, aumentando en forma importante los gradientes de las propiedades macroscópicas. Las distribuciones de temperatura, presión y densidad, aumentan con la reducción de la altitud, y en el caso de la densidad y la presión, este aumento es exponencial. A grandes altitudes la onda de choque está bien definida en la parte frontal del IAD, pero a medida que disminuye la altitud la onda de choque se combina con la estela aguas abajo del hombro del IAD, haciendo que las variaciones de las propiedades macroscópicas en la estela sean más graduales que lo ocurrido a mayores altitudes. Así, el nivel de expansión del flujo en la estela cercana disminuye a menores altitudes.

Se determinó que las cantidades superficiales aumentan exponencialmente durante la reentrada atmosférica en el rango de altitud analizado, conforme disminuye el nivel de rarefacción. Así, las propiedades superficiales máximas se alcanzaron a los 95 *km* de altitud y equivalen a $q_{max} = 180.426 \text{ kW/m}^2$, $p_{max} = 68.89 \text{ Pa}$ y $\tau_{max} = 21.37 \text{ Pa}$, lo que representó con respecto a los valores alcanzados a los 115 [*km*] de altitud aumentos de 26, 31 y 23 veces, respectivamente. Es de esperar que a medida que disminuya la altitud, las cantidades superficiales sigan aumentando. Por otra parte, la fuerza de arrastre también tiene una tendencia de crecimiento exponencial durante la reentrada atmosférica, alcanzando un valor de 16.768 *N* a los 95 *km* de altitud. La fuerza de arrastre está formada principalmente por la componente normal a la superficie generada por la presión, característico de cuerpos contundentes.

En la literatura no existen investigaciones exhaustiva de la aerotermodinámica de IADs diseñados para proteger CubeSats durante la entrada atmosférica. Esta investigación proporciona una gran cantidad de información sobre el tema, que ayudará a comprender los desafíos asociados con el reingreso y la recuperación de CubeSat, su diseño estructural y consideraciones de selección de materiales, así como su implementación en misiones espaciales.

6.0.1 Trabajos futuros

Un hecho importante a tener en consideración es que la temperatura máxima alcanzada en la onda de choque a los 95 km de altitud fue de 16660 K . Esta temperatura es suficiente para que las moléculas se disocien e incluso se ionicen. Debido a que en esta investigación no se simularon flujos con reacciones químicas, se desconoce la influencia de esta simplificación en los resultados obtenidos. Sin embargo, investigaciones han mostrado que la consideración de reacciones químicas en las simulaciones genera temperaturas más bajas en la onda de choque y un menor flujo de calor hacia la superficie, con respecto a lo obtenido al considerar un flujo no reactivo. Por su parte, la presión, el esfuerzo cortante y las fuerzas aerodinámicas se mantienen prácticamente iguales [30, 91]. Una consecuencia de la ionización del flujo es el “apagón de comunicaciones” experimentado a ciertas altitudes y velocidades durante la entrada atmosférica, en el que es imposible transmitir ondas de radio hacia o desde el vehículo. Esto se debe a que durante la ionización se produce electrones libres que absorben la radiación de radiofrecuencia [51]. Por estos motivos, parte de los trabajos futuros consisten en investigar el efecto de los IADs en CubeSats por medio de simulaciones de flujos que reaccionen químicamente. También se considera el estudio de la variación de la geometría del IAD, con especial énfasis en el ángulo de medio cono y en el radio de punta. En la Figura 6.1 se presentan dos diseños de IAD a estudiar próximamente. Por último, resulta importante considerar distintos ángulos de ataque durante la entrada atmosférica, dado que ello influye en la estabilidad y en el control de actitud del vehículo durante el vuelo de reentrada.

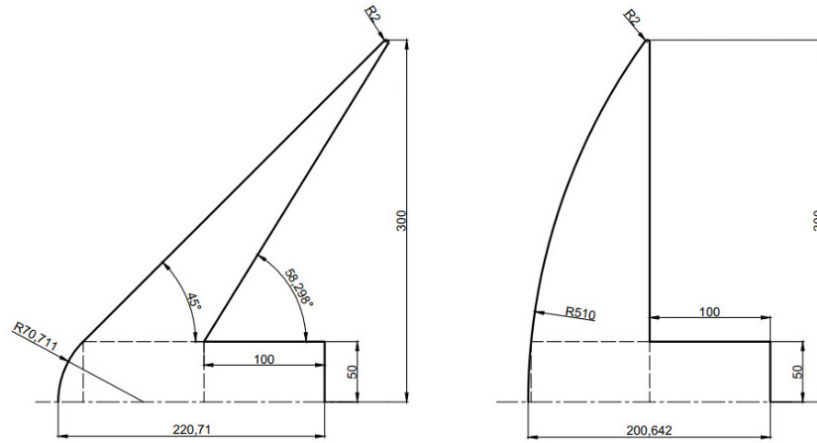


Figura 6.1: Configuraciones de IAD para futuras investigaciones.

Referencias

- [1] Valerio Carandente and Raffaele Savino. New Concepts of Deployable De-Orbit and Re-Entry Systems for CubeSat Miniaturized Satellites. *Recent Patents on Engineering*, 8(1):2–12, 2014.
- [2] Jhonathan O. Murcia Piñeros, Walter Abrahão dos Santos, and Antônio F.B.A. Prado. Analysis of the orbit lifetime of CubeSats in low Earth orbits including periodic variation in drag due to attitude motion. *Advances in Space Research*, 67(2):902–918, 2021.
- [3] ESA. The current state of space debris. <https://www.esa.int/>, 4 2020.
- [4] ESA. Space debris by the numbers. <https://www.esa.int/>, 2022.
- [5] Donald J. Kessler. Collisional cascading: The limits of population growth in low earth orbit. *Advances in Space Research*, 11, 1991.
- [6] Donald J. Kessler, Nicholas L. Johnson, J. C. Liou, and Mark Matney. The Kessler Syndrome: Implications to future space operations. *Advances in the Astronautical Sciences*, 137:47–61, 2010.
- [7] Joseph N. Pelton. The Space Debris Threat and the Kessler Syndrome. pages 17–23, 2013.
- [8] NASA. Space debris and human spacecraft. <https://www.nasa.gov/>, 2021.
- [9] William Ailor, Ian Dupzyk, John Shepard, and Mark Newfield. Rebr: An innovative, cost-effective system for return of reentry data. *A Collection of Technical Papers - AIAA Space 2007 Conference*, 3:2350–2357, 2007.

- [10] William Emery and Adriano Camps. Orbital mechanics, image navigation, and cartographic projections. *Introduction to Satellite Remote Sensing*, pages 565–596, 1 2017.
- [11] ESA. Esa’s annual space environment report. *Technical report, European Space Agency Space Debris Office*, 4 2022.
- [12] ESA. Esa’s annual space environment report. *Technical report, European Space Agency Space Debris Office*, 9 2020.
- [13] Jonathan C. McDowell. The low earth orbit satellite population and impacts of the spacex starlink constellation. *The Astrophysical Journal Letters*, 892:L36, 4 2020.
- [14] California Polytechnic State University. Cubesat Design Specification Rev 14.1. Technical Report February, 2022.
- [15] NASA. State of the art of small spacecraft technology. *Small Spacecraft Systems Virtual Institute Ames Research Center, Moffett Field, California*, 2021.
- [16] Kulu E. Nanosatellites database. <https://www.nanosats.eu/>, 2022.
- [17] W. J. Pang, B. Bo, X. Meng, X. Z. Yu, J. Guo, and J. Zhou. Boom of the cubesat: A statistic survey of cubsats launch in 2003-2015. *Proceedings of the International Astronautical Congress, IAC*, 0(September):2–7, 2016.
- [18] Stephen J. Hughes, Robert A. Dillman, Brett R. Starr, Ryan A. Stephan, Michael C. Lindell, Charles J. Player, and F. Mc Neil Cheatwood. Inflatable Re-entry Vehicle Experiment (IRVE) design overview. *Collection of Technical Papers - 18th AIAA Aerodynamic Decelerator Systems Technology Conference and Seminar*, pages 381–394, 2005.
- [19] Joseph A. Corso, F. McNeil Cheatwood, Walter E. Bruce, Stephen J. Hughes, and Anthony M. Calomino. Advanced high-temperature flexible tps for inflatable aerodynamic decelerators. *21st AIAA Aerodynamic Decelerator Systems Technology Conference and Seminar 2011*, 2011.

- [20] Andrew J. Brune, Serhat Hosder, Karl T. Edquist, and Steven A. Tobin. Uncertainty analysis of thermal protection system response of a hypersonic inflatable aerodynamic decelerator. *46th AIAA Thermophysics Conference*, 2016.
- [21] Dongheun Ha, Yusuke Takahashi, Kazuhiko Yamada, and Takashi Abe. Numerical simulation of flow field around an inflatable vehicle during a reentry demonstration flight. *32nd AIAA Applied Aerodynamics Conference*, 2014.
- [22] Stephen Hughes, Joanne Ware, Joseph Del Corso, and Rafael Lugo. Deployable Aeroshell Flexible Thermal Protection System Testing. In *20th AIAA Aerodynamic Decelerator Systems Technology Conference and Seminar*, number May, pages 1–21, Reston, Virginia, may 2009. American Institute of Aeronautics and Astronautics.
- [23] Brandon P. Smith, Christopher L. Tanner, Milad Mahzari, Ian G. Clark, Robert D. Braun, and F. Mc Neil Cheatwood. A historical review of inflatable aerodynamic decelerator technology development. *IEEE Aerospace Conference Proceedings*, 2010.
- [24] David Akin. Applications of Ultra-Low Ballistic Coefficient Entry Vehicles to Existing and Future Space Missions. In *SpaceOps 2010 Conference*, number April, Reston, Virginia, apr 2010. American Institute of Aeronautics and Astronautics.
- [25] Joseph A. Del Corso, Walter E. Bruce III, Stephen J. Hughes, John A. Dec, Marc D. Rezin, Mary Ann, B. Meador, Haiquan Guo, Douglas G. Fletcher, Anthony M. Calomino, and F. McNeil Cheatwood. Flexible Thermal Protection System Development for Hypersonic Inflatable Aerodynamic Decelerators. In *9Th International Planetary Probe Workshop*, number June, 2012.
- [26] Corso J, Hughes S, Cheatwood N, Johnson K, and Calomino A. Hypersonic inflatable aerodynamic decelerator ground test development - nasa technical reports server (ntrs). *NTRS - NASA Technical Reports Server*, 2015.
- [27] G. A. Bird. *Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flows*. Oxford Science Publications, first edition, 1994.

- [28] Iain D. Boyd and Thomas E. Schwartzentruber. *Nonequilibrium Gas Dynamics and Molecular Simulation*. Cambridge University Press, Cambridge, 2017.
- [29] Martin K. Analysis of the aerodynamics of tumbling spacecraft during orbital decay and reentry. *University of Michigan*, 2021.
- [30] Palharini R. Atmospheric reentry modelling using an open-source dsmc code. *University of Strathclyde*, 2014.
- [31] Chapman S and Cowling TG. *The mathematical theory of non-uniform gases: an Account of the kinetic theory of viscosity, thermal conduction and diffusion in gases*. Cambridge University Press, 1970.
- [32] David Akin. The ParaShield Entry Vehicle Concept: Basic Theory and Flight Test Development. *Small Satellite Conference*, 1990.
- [33] Gunter Krebs. Skidbladnir parashield - gunter’s space page. 2022.
- [34] Matthias Wiegand and Hans Konigsmann. A small re-entry capsule - brem-sat 2. *Small Satellite Conference*, 9 1996.
- [35] Hans Konigsmann, Holger Oelze, and Hans Rath. Brem-sat - first flight results. *Small Satellite Conference*, 8 1994.
- [36] Detlef Wilde, Stephan Walther, and Astrium Gmbh. Inflatable Reentry and Descent Technology (IRDT) – Further Developments. *Symposium A Quarterly Journal In Modern Foreign Literatures*, (March):26–29, 2001.
- [37] James N. Moss, Christopher E. Glass, Brian R. Hollis, and John W. Van Norman. Low-density aerodynamics for the inflatable reentry vehicle experiment. <https://doi.org/10.2514/1.22707>, 43:1191–1201, 5 2006.
- [38] Dillman R, Hughes S, Bodkin R, Bose D, Del Corso J, and Neil F. Flight performance of the inflatable reentry vehicle experiment ii. *NASA Langley Research Center, MS 489, Hampton, VA 23681, USA*, 2010.
- [39] Dillman R, Hughes S, Bodkin R, Bose D, Corso J, and Neil F. Flight performance of the inflatable reentry vehicle experiment 3 - nasa technical reports server (ntrs). 2013.

- [40] Yusuke Takahashi, Kazuhiko Yamada, Takashi Abe, and Kojiro Suzuki. Aerodynamic Heating Around Flare-Type Membrane Inflatable Vehicle in Sub-orbital Reentry Demonstration Flight. *Journal of Spacecraft and Rockets*, 52(6):1530–1541, nov 2015.
- [41] E. Bassano, R. Savino, R. Lo Forti, A. Ferrarotti, C. Richiello, G. Russo, R. Aurigemma, F. Punzo, and P. Dell’Aversana. IRENE - Italian re-entry Nacelle for microgravity experiments. In *62nd International Astronautical Congress 2011, IAC 2011*, volume 1, pages 858–866, 2011.
- [42] Alberto Fedele and Stefano Mungiguerra. Aerodynamics and flight mechanics activities for a suborbital flight test of a deployable heat shield capsule. *Acta Astronautica*, 151(May):324–333, 2018.
- [43] Fedele A. A deployable aerobraking system for atmospheric re-entry. *Università degli Studi di Napoli Federico II*, 2020.
- [44] Jason Andrews, Krissa Watry, and Kevin Brown. Nanosat Deorbit and Recovery System to Enable New Missions, 2011.
- [45] R. Savino and V. Carandente. Aerothermodynamic and feasibility study of a deployable aerobraking re-entry capsule. *Fluid Dynamics and Materials Processing*, 8(4):453–476, 2012.
- [46] Valerio Carandente, Gennaro Zuppardi, and Raffaele Savino. Aerothermodynamic and stability analyses of a deployable re-entry capsule. *Acta Astronautica*, 93:291–303, 2014.
- [47] Michele Iacovazzo, Valerio Carandente, Raffaele Savino, and Gennaro Zuppardi. Longitudinal stability analysis of a suborbital re-entry demonstrator for a deployable capsule. *Acta Astronautica*, 106:101–110, 2015.
- [48] Naoya Enoki, Yusuke Takahashi, Nobuyuki Oshima, Kazuhiko Yamada, and Kojiro Suzuki. Aerodynamics of inflatable nano-satellite ”eGG” in low earth orbit and reentry duration. *AIP Conference Proceedings*, 2132(August), 2019.
- [49] Alan M. Cassell, Paul F. Wercinski, Brandon P. Smith, Bryan C. Yount, Shakib M. Ghassemieh, Owen S. Nishioka, Carl E. Kruger, Chad A. Brivkalns, Alberto Makino, Shang C. Wu, Nghia N. Mai, Ryan D. McDaniel,

- Ali Guarneros-Luna, Joseph D. Williams, Dzung T. Hoang, Richard L. Rowan, Soumyo Dutta, Ashley M. Korzun, Justin S. Green, Jake A. Tynis, and Chris Karlgaard. Adept sounding rocket one flight test overview. *AIAA Aviation 2019 Forum*, (June):1–15, 2019.
- [50] Ashley M. Korzun, Soumyo Dutta, Ryan D. McDaniel, Christopher D. Karlgaard, and Jake A. Tynis. Aerodynamics for the adept sr-1 flight experiment. *AIAA Aviation 2019 Forum*, pages 1–15, 2019.
- [51] J. D. Anderson. Modern compressible flow with historical perspective. 1982.
- [52] Tuñón I., Ortí E., Gómez C., Pascual J., and Salvador I. Química física avanzada. *OCW de la Universitat de Valencia, Departamento Química Física*, 2009.
- [53] Vincenti W and Kruger C. *Introduction to Physical Gas Dynamics*. Krieger Publishing Company Mababar, 1967.
- [54] G. A. Bird. Approach to translational equilibrium in a rigid sphere gas. *The Physics of Fluids*, 6:1518, 12 1963.
- [55] Bird G. *The DSMC method*. CreateSpace Independent Publishing Platform, 2013.
- [56] Francis J. Alexander and Alejandro L. Garcia. The direct simulation monte carlo method. *Computers in Physics*, 11:588, 6 1998.
- [57] Alexander F, Garcia A, and Alder B. Erratum: “cell size dependence of transport coefficients in stochastic particle algorithms” [phys. fluids 10, 1540 (1998)]. *Physics of Fluids*, 12:731, 2000.
- [58] Alejandro L. Garcia and Wolfgang Wagner. Time step truncation error in direct simulation monte carlo. *Physics of Fluids*, 12:2621, 9 2000.
- [59] N. Hadjiconstantinou. Analysis of discretization in the direct simulation monte carlo. *Physics of Fluids*, 12:2634, 9 2000.
- [60] Engys. A comprehensive tour of snappyhexmesh. *7th OpenFOAM Workshop*, 2012.

- [61] G. A. Bird. Monte-carlo simulation in an engineering context. *In 12th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics*, pages 239–255, 1981.
- [62] G. A. Bird. Perception of numerical methods in rarefied gasdynamics. *American Institute of Aeronautics and Astronautics*, pages 211–226, 1989.
- [63] Katsuhisa Koura and Hiroaki Matsumoto. Variable soft sphere molecular model for inverse-power-law or lennard-jones potential. *Physics of Fluids A: Fluid Dynamics*, 3:2459, 6 1991.
- [64] Katsuhisa Koura and Hiroaki Matsumoto. Variable soft sphere molecular model for air species. *Physics of Fluids A: Fluid Dynamics*, 4:1083, 9 1992.
- [65] H. A. Hassan and David B. Hash. A generalized hard-sphere model for monte carlo simulation. *Physics of Fluids A: Fluid Dynamics*, 5:738, 6 1993.
- [66] Jing Fan. A generalized soft-sphere model for monte carlo simulation. *Physics of Fluids*, 14:4399, 11 2002.
- [67] Claus Borgnakke and Poul S. Larsen. Statistical collision model for monte carlo simulation of polyatomic gas mixture. *Journal of Computational Physics*, 18:405–420, 8 1975.
- [68] C. White, M. K. Borg, T. J. Scanlon, S. M. Longshaw, B. John, D. R. Emerson, and J. M. Reese. dsmcfoam+: An openfoam based direct simulation monte carlo solver. *Computer Physics Communications*, 224:22–43, 3 2018.
- [69] Openfoam website. <https://www.openfoam.com/>.
- [70] DIMEC-USM. Magíster en ciencias de la ingeniería mecánica. *Departamento de Ingeniería Mecánica USM*, <https://www.magisttermecanica.usm.cl/>.
- [71] American Institute of Aeronautics and Astronautics (AIAA). Guide for the verification and validation of computational fluid dynamics simulations. *AIAA G-077-1998(2002)*, 1 1998.
- [72] G. J. LeBeau and F. E. Lumpkin. Application highlights of the dsmc analysis code (dac) software for simulating rarefied flows. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 191:595–609, 12 2001.

- [73] J Moss, V Dogra, and R Wilmoth. Dsmc simulations of mach 20 nitrogen flows about a 70 degree blunted cone and its wake. *Technical Report NASA TM-107762*, 1993.
- [74] James N. Moss, Robert A. Mitcheltree, and Richard G. Wilmoth. Direct simulation monte carlo and navier-stokes simulations of blunt body wake flows. <https://doi.org/10.2514/3.12208>, 32:1399–1406, 5 1994.
- [75] James N. Moss, Virendra K. Dogra, Joseph M. Price, and David B. Hash. Comparison of dsmc and experimental results for hypersonic external flows. *30th Thermophysics Conference*, 1995.
- [76] AGARD. Hypersonic experimental and computational capability, improvement and validation. volume 1. *Technical Report AGARD-AR-319*, 1996.
- [77] AGARD. Hypersonic experimental and computational capability, improvement and validation. volume 2. *Technical Report AGARD-AR-319*, 1998.
- [78] Iain D. Boyd. Direct simulation monte carlo for atmospheric entry. 2. code development and application results. *MICHIGAN UNIV ANN ARBOR DEPT OF AEROSPACE ENGINEERING*, 2009.
- [79] Da Gao, Chonglin Zhang, and Thomas E. Schwartzentruber. Particle simulations of planetary probe flows employing automated mesh refinement. <https://doi.org/10.2514/1.52129>, 48:397–405, 5 2011.
- [80] Rodrigo C. Palharini, Craig White, Thomas J. Scanlon, Richard E. Brown, Matthew K. Borg, and Jason M. Reese. Benchmark numerical simulations of rarefied non-reacting gas flows using an open-source dsmc code. *Computers Fluids*, 120:140–157, 10 2015.
- [81] J. Allègre, D. Bisch, and J. C. Lengrand. Experimental rarefied density flowfields at hypersonic conditions over 70-degree blunted cone. <https://doi.org/10.2514/2.3300>, 34:714–718, 5 2012.
- [82] J. Allègre, D. Bisch, and J. C. Lengrand. Experimental rarefied aerodynamic forces at hypersonic conditions over 70-degree blunted cone. <https://doi.org/10.2514/2.3301>, 34:719–723, 5 2012.

- [83] J. Allègre, D. Bisch, and J. C. Lengrand. Experimental rarefied heat transfer at hypersonic conditions over 70-degree blunted cone. <https://doi.org/10.2514/2.3302>, 34:724–728, 5 2012.
- [84] JSC-NASA. Dsmc code simulates rarefied gas dynamic environments. *JSC Technology Transfer*, 2011.
- [85] US Standard Atmosphere. *US standard atmosphere*. National Oceanic and Atmospheric Administration, 1976.
- [86] Brian L. Haas and Michael A. Fallavollita. Flow resolution and domain influence in rarefied hypersonic blunt-body flows. <https://doi.org/10.2514/3.608>, 8:751–757, 5 1994.
- [87] Wilson F.N. Santos. Physical and computational aspects of shock waves over power-law leading edges. *Physics of Fluids*, 20:016101, 1 2008.
- [88] Santos W. Aerodynamic heating on blunt nose shapes in rarefied hypersonic flow. *Proceedings of the 17th international congress of mechanical engineering COBEM*, pages 10–14, 2003.
- [89] John D. Anderson Jr. *Hypersonic and High-Temperature Gas Dynamics, Second Edition*. 2006.
- [90] Santos W. A numerical study of the compressibility effect on flowfield structure of blunt bodies in low density flow. *Proceedings of the IV National Congress of Mechanical Engineering CONEM*, pages 22–25, 2006.
- [91] Rodrigo C. Palharini and João Luiz F. Azevedo. Thermochemical nonequilibrium computations of a brazilian reentry satellite. <https://doi.org/10.2514/1.A33658>, 54:961–966, 2 2017.