

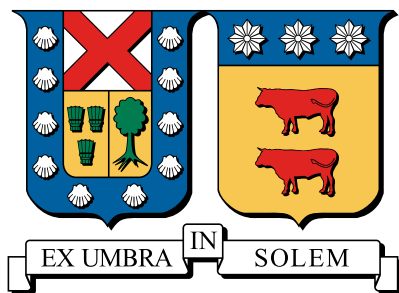
2020-09

CIERRE DE LAS ECUACIONES DE FLAMELET PARA SPRAY. UNA FORMULACIÓN LAGRANGIANA PARA LA FASE LÍQUIDA EN LLAMAS DE FLUJOS OPUESTOS

GONZALEZ HUENCHUGUALA, FELIPE ESTEBAN

<https://hdl.handle.net/11673/50028>

Repositorio Digital USM, UNIVERSIDAD TECNICA FEDERICO SANTA MARIA



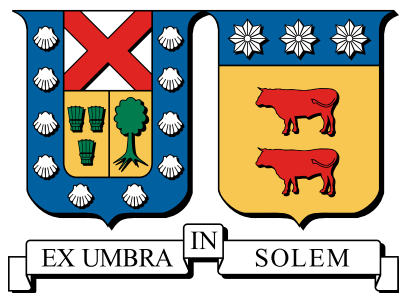
UNIVERSIDAD TÉCNICA FEDERICO SANTA MARÍA
DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA MECÁNICA
VALPARAÍSO- CHILE

**“CIERRE DE LAS ECUACIONES DE FLAMELET PARA
SPRAY. UNA FORMULACIÓN LAGRANGIANA PARA LA
FASE LÍQUIDA EN LLAMAS DE FLUJOS OPUESTOS”**

Felipe Esteban González Huenchuguala

Magíster en Ciencias de la Ingeniería Mecánica

Agosto - 2020



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

**“CIERRE DE LAS ECUACIONES DE FLAMELET PARA SPRAY. UNA FORMULACIÓN
LAGRANGIANA PARA LA FASE LÍQUIDA EN LLAMAS DE FLUJOS OPUESTOS”**

FELIPE ESTEBAN GONZÁLEZ HUENCHUGUALA

Tesis de grado para optar al grado de:
Magíster en Ciencias de la Ingeniería Mecánica
y al título de:
Ingeniero Civil Mecánico

Profesor Guía: Dr. Hernán Olguín A.

Profesor Revisor: Dr. Mario Toledo T.

Profesor Revisor externo: Dr. Arne Scholtissek (TU Darmstadt)

Septiembre - 2020

TITULO DE LA TESIS:

“Cierre de las ecuaciones de Flamelet para spray. Una formulación Lagrangiana para la fase líquida en llamas de flujos opuestos”

AUTOR:

Felipe Esteban González Huenchuguala

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. Hernán Olguín A.

Dr. Mario Toledo T.

Dr. Arne Scholtissek (TU Darmstadt)

VALPARAÍSO, CHILE- 2020

Agradecimientos

A mi profesor guía, Dr. Hernán Olguín, por su constante apoyo, preocupación e infinita paciencia. Gracias por su invaluable guía, la cual no sólo ha permitido el desarrollo de este trabajo, sino que también ha sido el pilar en mi formación como investigador.

A mi madre, Cecilia, y mi padre, Francisco, quienes han hecho posible que pueda cumplir mis sueños. Por ser quienes me inspiran y motivan día a día.

A mi familia, amigos y compañeros de pregrado, postgrado y equipo de voleibol, quienes me han ayudado y han hecho más amena esta etapa de mi vida.

Finalmente, le agradezco a CONICYT a través del FONDECYT 11171020 y la beca de Magister Nacional y al departamento de Postgrado de la Universidad Técnica Federico Santa María por el apoyo financiero.

Resumen

Los modelos de flamelet permiten la simulación de llamas turbulentas a un costo computacional relativamente bajo. Esto se consigue pretabulando estructuras laminares sencillas que son posteriormente utilizadas para reconstruir llamas más complejas. Para la generación de las estructuras requeridas para estas librerías, diversas ecuaciones de flamelet han sido desarrolladas, pero, para llamas de spray, un set de ecuaciones general y cerrado aún no ha sido derivado.

En esta tesis se obtiene un sistema de ecuaciones, que si bien no es general, puede ser resuelto de forma autosuficiente para una configuración de flujos opuestos. Los términos presentes en la formulación general, que hasta ahora permanecían abiertos, son el gradiente de la velocidad por la densidad y las fuentes debido a la evaporación. Para cerrar el primero se emplea la similaridad de la configuración para transformar la ecuación de momento a espacio de flamelet, mientras que para la fase líquida se trabaja con un modelo de evaporación Lagrangiano, el cual es reescrito en término de la fracción de mezcla como coordenada.

Posteriormente se evalúa el desempeño de los modelos de clausura propuestos tanto de forma conjunta como independiente. Para esto se simulan 4 llamas con distintos strain rate. De acá se concluye que ambos modelos funcionan bien, pudiendo replicar los resultados obtenidos de un sistema de ecuaciones en el espacio físico, a pesar de que el modelo completo presenta aún desafíos de carácter numérico en términos de su estabilidad. Finalmente se sugiere una simplificación asumiendo que la velocidad de la gota es la misma que la del gas, suposición que parece adecuada en miras a generar librerías de flamelet en base a este set de ecuaciones.

Palabras Claves: flamelets en spray, llamas de flujos opuestos, difusión diferencial, modelos de evaporación

Índice general

Agradecimientos	I
Resumen	II
1. Introducción	1
1.1. Desafíos de la modelación de la combustión	3
1.2. Modelos y ecuaciones de flamelet	5
1.3. Objetivos	7
2. Estado del arte	9
2.1. Burke-Schumann	9
2.2. Otras definiciones de la fracción de mezcla	11
2.3. Ecuaciones de flamelet clásicas	13
2.4. Ecuaciones de flamelet para llamas en spray	18
2.5. Cierre de la tasa de disipación escalar	19
3. Modelo matemático para llamas de flujos opuestos	22
3.1. Ecuaciones gobernantes en el espacio físico	22
3.1.1. Fase gaseosa	22
3.1.2. Fase líquida	24
3.2. Derivación y cierre de las ecuaciones de flamelet en spray	26
3.2.1. Ecuaciones de flamelet	26
3.2.2. Términos no cerrados	27
4. Solución numérica	32
4.1. Ecuación con transformación de similaridad	32
4.1.1. Fase gaseosa	33

4.1.2. Fase líquida	33
4.2. Valores de referencia, condiciones de contorno y condiciones iniciales .	34
4.2.1. Valores de referencia	35
4.2.2. Condiciones de contorno	35
4.2.3. Condiciones iniciales	39
4.3. Método de discretización	40
4.4. Algoritmo de resolución	42
5. Marco de validación	46
6. Resultados y discusión	48
6.1. Evaluación de los modelos de clausura	48
6.1.1. Análisis del comportamiento de la gota	52
6.2. Limitaciones y simplificaciones del modelo	55
6.2.1. Marco de validación	58
7. Conclusiones	63
Apéndice A. Nomenclatura	65
Bibliografía	68

Índice de figuras

1.1. Consumo mundial de Energía en Millones de Toneladas [1]	2
1.2. Representación de flamelet unidimensional	6
1.3. Configuración de flujos opuestos, donde el lado izquierdo está compuesto por un spray transportado por un flujo de aire, y el lado derecho es un flujo gaseoso (pudiendo ser de aire o combustible por ejemplo).	7
2.1. Curva S para llamas difusivas. Los puntos Q e I corresponden a la zona de extinción y de ignición respectivamente [2].	15
4.1. Esquema de llama de flujos opuestos	40
4.2. Esquema de una malla irregular unidimensional.	41
4.3. Esquema del algoritmo para la resolución de las ecuaciones de flamelet, las flechas verdes indican cumplimiento de la condición y las rojas el no cumplimiento de estas.	45
6.1. Perfiles de f'	49
6.2. Perfiles de $\hat{a}$	49
6.3. Perfiles del gradiente de la fracción de mezcla.	49
6.4. Perfiles de fuente de masa para las llamas.	50
6.5. Radio de la gota.	50
6.6. Perfiles de velocidad de la gota (d) y el gas (g).	51
6.7. Perfiles de fuente de momentum.	51
6.8. Perfiles de fuente de energía para las llamas.	51
6.9. Perfiles de temperatura en la superficie de la gota.	52
6.10. Perfiles del gradiente de la fracción de mezcla.	52
6.11. Perfiles de fuente de masa.	52

6.12. Perfiles del gradiente de la fracción de mezcla.	52
6.13. Perfiles de fracción másica de CO_2 del gas.	53
6.14. Perfiles de fracción másica de C_2H_2 del gas.	53
6.15. Densidad del número de gotas.	53
6.16. Temperatura de la gota (superficie) sobre el tiempo.	54
6.17. Radio de la gota (puntos) y su posición en el espacio de fracción de mezcla (líneas segmentadas).	54
6.18. Velocidad en el espacio de fracción de mezcla sobre el tiempo.	55
6.19. A la izquierda el gradiente de la fracción de mezcla y el radio de la gota en el espacio de flamelet, y a la derecha la fracción de mezcla en el espacio físico.	56
6.20. A la izquierda el gradiente de la fracción de mezcla en el espacio de flamelet, y a la derecha la fracción de mezcla y el radio de la gota en el espacio físico.	57
6.21. Radios de la gotas.	59
6.22. Perfiles de fracción másica de CO_2 del gas.	60
6.23. Perfiles de fracción másica de C_2H_2 del gas.	60
6.24. Perfiles de temperatura del gas.	61
6.25. Perfiles del gradiente de fracción de mezcla con el modelo completo usando el set S	61
6.26. Perfiles de temperatura del gas.	62
6.27. Perfiles de fracción másica de CO_2 del gas.	62
6.28. Perfiles de fracción másica de C_2H_2 del gas.	62
6.29. Radios de la gotas.	62

Capítulo 1

Introducción

La combustión está presente en una gran cantidad de procesos industriales, ejemplos de esto son los motores de combustión interna o turbinas a gas para la generación de energía, hornos industriales o cámaras de combustión para la generación de energía térmica, entre muchas otras aplicaciones. El crecimiento económico, en general, va de la mano con un mayor consumo energético, y para satisfacer esta demanda, de acuerdo a la International Energy Agency (IEA), las fuentes de energía basadas en la quema de combustibles fósiles, carbón, petróleo y gas natural, son quienes cubren la mayor parte, eclipsando otro tipo de energías como la nuclear, eólica, solar entre otras.

A pesar del creciente desarrollo de las energías renovables no convencionales, los combustibles fósiles continúan dominando la matriz energética mundial, abarcando más del 80 % de esta, más aún, si se consideran aquellos que no son de origen fósil, la cobertura es cercana al 90 %. Además, se estima que las reservas mundiales den a basto para varias décadas más [1], y cada día se descubren nuevas. De estos combustibles fósiles, casi un tercio se encuentran en fase líquida en la naturaleza, los que son ampliamente usados en la industria, ya sea por ventajas frente a los gaseosos o sólidos en temas de seguridad, facilidad de implementación, transporte y almacenamiento [1]. Además varios biocombustibles se producen en esta fase, tales como el etanol, butanol, entre otros. El mecanismo más común mediante el cual es utilizado un combustible líquido es mediante su atomización al ser inyectado a una cámara de combustión, lo que da a lugar a lo que se conoce como “spray”. Este método de inyección conlleva grandes complejidades como las interacciones gotas/turbulencia o la transferencia de calor entre las fases, entre otros. Esto, sumado a los extensos mecanismos de reacción

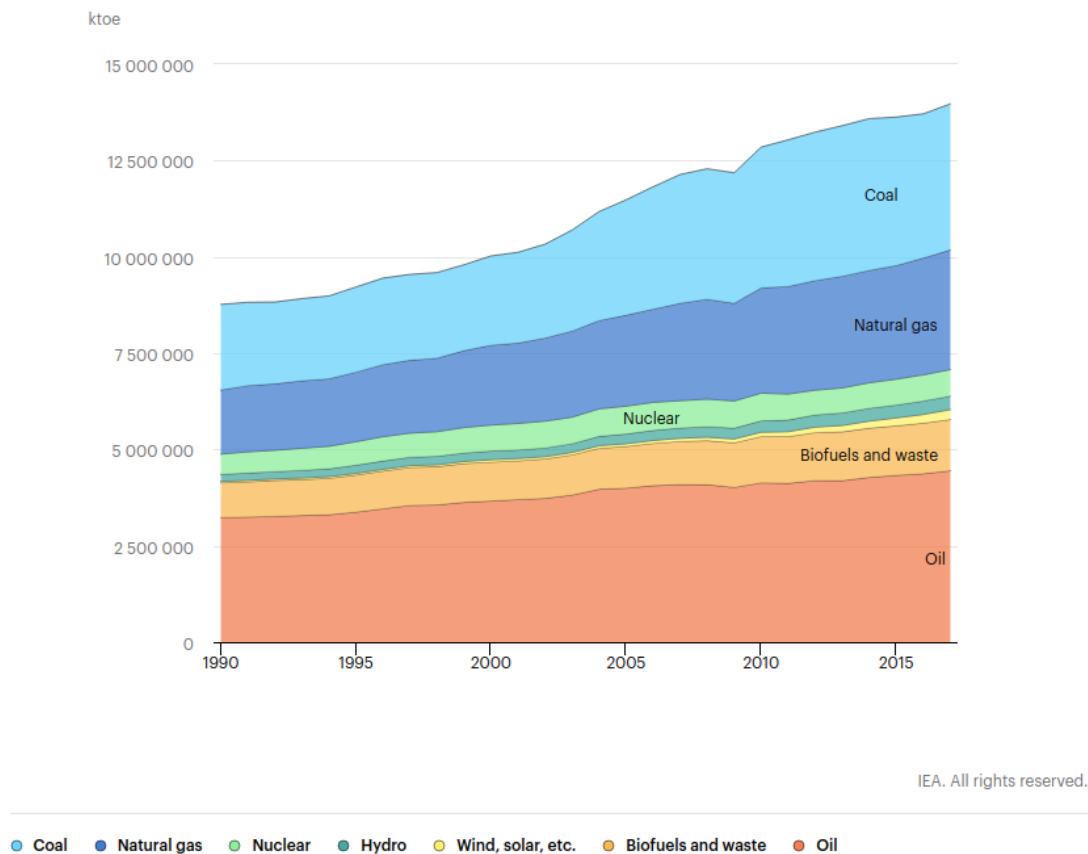


Figura 1.1: Consumo mundial de Energía en Millones de Toneladas [1]

involucrados y la turbulencia propia de flujos a alta velocidad, lo que implica que el entendimiento de este proceso sea sumamente complejo, donde una gran cantidad de fenómenos, tanto físicos como químicos, interactúan entre sí.

La combustión va a jugar sin lugar a dudas, un rol determinante durante las próximas décadas, debido a que existen procesos de combustión en la industria que son irremplazables, como aquellos que requieren elevadas temperaturas, en ocasiones, superando los 1000°C , o aquellos donde se requiera una potencia muy elevada, como en los motores de cohetes. Pero incluso en aplicaciones más cercanas como los motores de combustión interna, la combustión está lejos de desaparecer. En este último caso las motores eléctricos han ido recientemente ganado una gran popularidad, debido a la ausencia de emisiones de gases contaminantes, pero esto no ha provocado la desaparición de los motores de combustión interna, al contrario, han potenciado su desarrollo, debido a que estos aún tienen un amplio margen de mejora tanto en su

consumo como en el control de emisiones. Para esto, una serie de tecnologías se han estado desarrollando en los últimos años, como los motores híbridos, desconexión de cilindros, compresión variable, embriague electrónico y la implementación de combustibles alternativos.

En la actualidad, varios países (incluido Chile) están promoviendo el desarrollo de tecnologías de combustión, basadas en el uso del hidrógeno verde como combustible, dado que la combustión de este elemento está completamente exenta de la producción de contaminantes. Este tipo de desarrollos requiere más investigación fundamental y un mejor entendimiento de la física y química involucradas.

Es de aquí que el estudio de los procesos de combustión sean sumamente importantes de cara a la generación energética en el futuro.

1.1. Desafíos de la modelación de la combustión

Las simulaciones numéricas tienen una serie de ventajas que las hacen preferibles a los experimentos al momento de estudiar la factibilidad técnica, medioambiental y económica de, por ejemplo, dispositivos de combustión. En primer lugar, las simulaciones son considerablemente más económicas, evitando la necesidad de costosos sets de pruebas y la manufactura de los dispositivos requeridos para estos. Además, estos permiten determinar la influencia de distintos parámetros de forma aislada, lo cual es inviable en experimentos. Adicionalmente, estos nos pueden entregar información de todas las escalas del problema, lo que, nuevamente, no es posible a través de otro tipo de pruebas [3–9].

Por desgracia, los procesos de combustión son muy complejos y presentan una gran cantidad de problemas asociados a su simulación. De hecho durante las últimas décadas no se han escatimado esfuerzos en investigaciones sobre el tema [5–9]. Esta complejidad radica en dos de las características fundamentales de la combustión,

- i) Esta acopla diversas áreas de la física y la química que deben ser estudiadas, como, la mecánica de fluidos, termodinámica, transferencia de masa y calor y cinética química, donde todas presentan sus propias dificultades.
- ii) La naturaleza multi-escala de esta, tanto temporal como espacial (ya que la química puede llegar a desarrollarse en espacios de tiempo muy reducidos y

a nivel molecular, mientras que la física del flujo tiene tiempos de transición considerablemente mayores y se desarrolla en escalas espaciales mayores).

Si a esto se le suma que el combustible puede ser inyectado en fase líquida, se agregan a las simulaciones numéricas problemas relacionados con los procesos de atomización, la dinámica de la gota, calentamiento y evaporación de la misma, interacción entre ambas fases, además de tener que considerar las escalas temporales y espaciales de la fase líquida [10, 11]. Todo esto se traduce en un sistema con una gran cantidad de ecuaciones diferenciales parciales fuertemente acopladas, el cual es muy difícil de resolver.

La modelación de procesos de combustión de sprays es un área de investigación muy activa y con una gran cantidad de dificultades sin resolver [10, 11]. Entre estos, uno de los problemas que aún se encuentra sin solución es el relacionado con los procesos de inyección y atomización del combustible. De hecho, en la mayoría de los trabajos, se evita este problema considerando que el combustible está completamente atomizado antes de iniciar la combustión. Para esto se utiliza la distribución para el tamaño inicial de gotas de datos experimentales.

Por otro lado, en la mayoría de las aplicaciones se encuentra presente la turbulencia, fenómeno que es comúnmente descrito como el problema más grande sin resolver de la mecánica clásica [12, 13]. El desarrollo de modelos de turbulencia es un tema bastante complejo. En combustión, además, deben considerarse flujos reactivos, los que para su modelación requieren tantas ecuaciones de transporte como especies químicas estén involucradas en el mecanismo de reacción, ecuaciones que poseen términos fuentes que no están cerrados. Esto implica que la modelación de la combustión turbulenta requiera modelos adicionales [10, 11].

Dentro de los modelos existentes para considerar mecanismos de reacción en simulaciones de flujos turbulentos, los más sencillos son aquellos que consideran una química infinitamente rápida, ya que gracias a esta suposición se tiene únicamente una reacción, lo que suele llamarse química de un paso [3, 14]. En este modelo se agregan solo 3 nuevas variables que deben ser modeladas a través de sus correspondientes ecuaciones de transporte, lo cual no implica un aumento de costo computacional considerable. Ahora bien, este modelo, sólo es aplicable para llamas no pre mezcladas, además el precio a pagar por un modelo tan sencillo es que la predicción de contaminantes es deficiente.

Además, si se desea modelar la generación de contaminantes de una manera precisa,

es necesario implementar mecanismos de reacción detallados, los cuales involucran una enorme cantidad de especies y reacciones químicas, incluso para los combustibles más sencillos. Esto aumenta drásticamente los tiempos computacionales y para aplicaciones prácticas se hace completamente inviable, especialmente para llamas turbulentas.

Esto último remarca la necesidad de implementar mecanismos de química detallada, los cuales permiten la predicción de dichos contaminantes de mucha mejor manera. Existen una gran variedad de modelos, como los modelos de clausura de momentos condicionales (CMC) [15], los modelos de funciones de densidad de probabilidad transportada (PDF) [16, 17], los modelos de acondicionamiento de mapeo múltiple (MMC) introducido por Klimenko y Pope [18], los modelos *intrinsic low-dimensional manifold* (ILDIM) [19], los modelos de manifold reacción-difusión (REDIM) [20], los modelos de flamelet, los cuales se detallarán a continuación, entre otros. Todo esto sin mencionar la simulación numérica directa, que resuelve una ecuación para cada especie involucrada en el mecanismo de reacción, lo cual es extremadamente costoso computacionalmente hablando, haciéndolo inviable para cualquier aplicación. Los modelos de flamelet en particular se caracterizan por su extremadamente bajo costo computacional sin sacrificar calidad en las simulaciones, es esta característica tan interesante la que motiva su estudio en general, y en esta tesis en particular.

1.2. Modelos y ecuaciones de flamelet

Los modelos de flamelet se basan en la idea de que cualquier llama turbulenta puede ser reconstruida a partir de estructuras laminares más sencillas, las que llamaremos flamelets [21]. Gracias a esto es posible, durante las simulaciones de llamas turbulentas, obtener los valores de las fracciones másicas ponderando las estructuras laminares en vez de tener que resolver una ecuación diferencial parcial para cada una de estas especies. De aquí que estos modelos reduzcan los tiempos computacionales.

La idea es generar estas estructuras de llamas laminares a priori, pudiendo ser tabuladas en función de uno o más parámetros característicos. Luego, para acceder a estas estructuras es necesaria una función de densidad de probabilidad (PDF) para los parámetros característicos, para de esta manera poder considerar los efectos de fluctuaciones intrínsecos de la turbulencia [22].

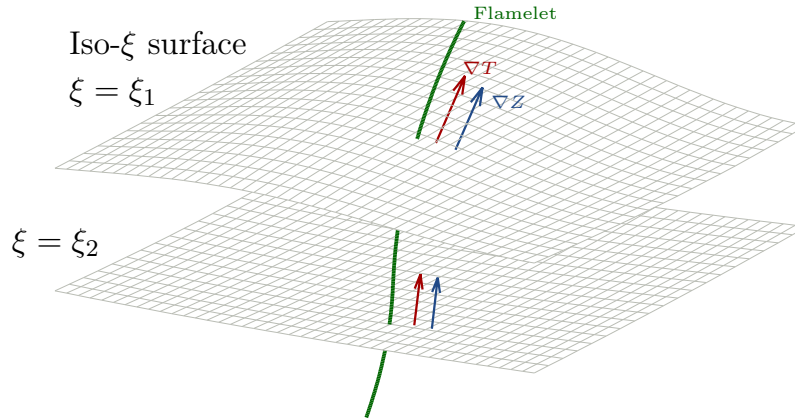


Figura 1.2: Representación de flamelet unidimensional

Para la generación de estas librerías, típicamente se consideran llamas simuladas en el espacio físico. Sin embargo en los últimos años se ha trabajado en la elaboración de ecuaciones de flamelet que permitan la elaboración de dichas librerías con ayuda de estas. Físicamente un flamelet es una estructura esencialmente unidimensional, donde la física se desarrolla preferentemente en una dirección, y en donde los efectos tangenciales pueden considerarse despreciables. Matemáticamente, las ecuaciones de flamelet se obtienen a partir de la transformación de las ecuaciones de transporte para las especies químicas y energía a un espacio unidimensional, comúnmente llamado espacio de composición y asumiendo efectos tangenciales y curvaturas pequeños. Las ecuaciones de flamelet dependen directamente del sistema de coordenadas que se use para realizar la transformación, el que a su vez depende del régimen de combustión.

En la literatura se encuentran varios modelos y ecuaciones de flamelet que han sido exitosamente probados y validados para llamas gaseosas [23–38], los que han sido probado en llamas de spray [39–42], que por naturaleza son más complejas. Estas complejidades se deben a que en las ecuaciones de transporte para las especies químicas y energía aparecen términos relacionados con la evaporación, que en este nuevo espacio no se encuentran cerrados, además de la tasa de disipación escalar, término que se logró cerrar con éxito en llamas gaseosas a través de soluciones analíticas, pero que no puede ser modelado de la misma forma en llamas de spray, debido a la interacción con la fase líquida. Para la tasa de disipación escalar ya han sido presentadas ecuaciones en espacio físico, pero ninguna de ellas han sido implementadas en espacio de composición debido a su gran complejidad [43, 44].

Recientemente se ha presentado [45] un nuevo set de ecuaciones de flamelet usando el gradiente de la fracción de mezcla en lugar de la tasa de disipación escalar, emulando lo hecho para llamas gaseosas [46]. Esta formulación representa la base sobre la que se trabajará en esta tesis.

1.3. Objetivos

El objetivo principal de este trabajo es cerrar las ecuaciones de flamelet [45]. Las que tienen abiertos el gradiente de la velocidad por la densidad y los términos relacionados con la evaporación y la dinámica de las gotas. El primero de estos está presente en la ecuación del gradiente de la fracción de mezcla, y será cerrado a partir de la ecuación de momentum en espacio de flamelet. Esta ecuación inherentemente está relacionada con la configuración física del flujo, por lo que debe establecerse a priori una estructura de llama sobre la cual trabajar. Para este trabajo se eligió la configuración de flujos opuestos, dado que es la llama que comúnmente es usada en la generación de librerías. Ya que la configuración de flujos opuestos es por naturaleza bidimensional, además se incorporará una transformación de similitud para la coordenada radial. De esta manera se puede expresar el gradiente de velocidad en función de una nueva y única variable de similitud.

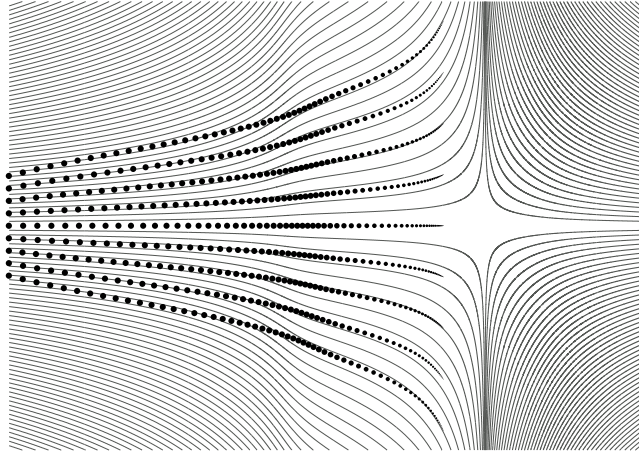


Figura 1.3: Configuración de flujos opuestos, donde el lado izquierdo está compuesto por un spray transportado por un flujo de aire, y el lado derecho es un flujo gaseoso (pudiendo ser de aire o combustible por ejemplo).

Por otro lado, para los términos fuentes debido a la evaporación, se trabajará con un modelo lagrangiano para la descripción de la fase líquida [47], al cuál se le realizará un cambio de coordenadas al espacio de flamelet (manteniendo la bidimensionalidad), tanto para las ecuaciones de la dinámica de la gota, como para la ecuación de la densidad del número de gotas.

Ambos modelos serán probados individualmente para posteriormente acoplarlos simultáneamente en un solver de flamelets, programado en *Fortran* [45], como un solo modelo para llamas a contraflujo. Con esto se busca tener una formulación completa y autocontenida para este tipo de configuración de llamas.

A continuación se hará una revisión de la literatura pasando por los distintos modelos de flamelet, para seguir con las ecuaciones de flamelet y su estado actual. En el capítulo 3 se presentan las ecuaciones que gobiernan la combustión en espacio físico y su derivación en el de flamelet. En el capítulo 4 se presenta la solución de similaridad contra la cual se valida el modelo, además de especificar el método numérico usado. En el capítulo 5 se presenta el marco de validación, donde se especifican las llamas con las que se validará el modelo. En el capítulo 6 se muestran los análisis y desempeño del modelo para finalizar con las conclusiones en el capítulo 7.

Capítulo 2

Estado del arte

A continuación se va a presentar una revisión de la literatura sobre las ecuaciones de flamelet, su motivación, las extensiones que se han realizado hasta llegar a ecuaciones de flamelet para sprays y los términos de dichas ecuaciones que aún se encuentran sin cerrar.

2.1. Burke-Schumann

El trabajo pionero de Burke-Schumann [48] puede ser considerado como la primera descripción de la estructura de una llama en términos de un escalar pasivo, y en ese sentido, como una de las primeras transformaciones tipo flamelet.

Bajo la suposición de química infinitamente rápida, es posible expresar el mecanismo de reacción con una sola ecuación (química de un paso), de la forma



donde F es el combustible, O el oxidante, P los productos y s es el coeficiente estequiométrico. Para este caso simplificado, las ecuaciones para las fracciones másicas del oxidante y de combustible y balance de energía [3, 14] se escriben como

$$\frac{\partial Y_F}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i Y_F)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_F \frac{\partial Y_F}{\partial x_i} \right) + \dot{\omega}_F, \quad (2.2)$$

$$\frac{\partial Y_O}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i Y_O)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_O \frac{\partial Y_O}{\partial x_i} \right) + \dot{\omega}_O, \quad (2.3)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i T)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\lambda}{C_p} \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) + \frac{Q}{C_p} \dot{\omega}_F, \quad (2.4)$$

donde u_i es la velocidad del gas, ρ es la densidad del gas, D_F y D_O son los coeficientes de difusión del combustible y el oxidante respectivamente, $\dot{\omega}_k$ es el término fuente de masa debido a la química para la especie k , Q es el flujo de calor de la reacción, λ es la conductividad térmica de la mezcla y C_p el calor específico de la mezcla. Si se asume que los coeficientes de difusión son iguales, $D_F = D_O = \frac{\lambda}{C_p} = D$ y se definen las siguientes variables

$$Z_1 = sY_F - Y_O, \quad (2.5)$$

$$Z_2 = \frac{C_p T}{Q} + Y_F, \quad (2.6)$$

$$Z_3 = \frac{sC_p T}{Q} + Y_O, \quad (2.7)$$

las ecuaciones de transporte (2.2), (2.3) y (2.4) pueden ser escritas de la forma

$$\frac{\partial \rho Z_j}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i Z_j)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D \frac{\partial Z_j}{\partial x_i} \right). \quad (2.8)$$

Normalizando las variables Z_j , [3, 14], con sus valores en los flujos de combustible y oxidante se obtiene

$$\xi_j = \frac{Z_j - Z_{j,O}}{Z_{j,F} - Z_{j,O}}, \quad (2.9)$$

y la ec. (2.8) queda

$$\frac{\partial \rho \xi_j}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i \xi_j)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D \frac{\partial \xi_j}{\partial x_i} \right). \quad (2.10)$$

Al normalizar se tiene que las condiciones de contorno para cada una de las ecuaciones son las mismas ($\xi = 1$ en el lado del combustible y $\xi = 0$ en el del oxidante), por lo que la ec. (2.10) puede ser escrita en términos del mismo ξ para cada caso, teniendo así que resolver una sola ecuación para cada una de las 3 variables. Como se asume química infinitamente rápida, no existen zonas donde combustible y oxidante coexistan, por lo que las ecs. (2.5), (2.6) y (2.7) pueden ser simplificadas para obtener expresiones para las fracciones másicas de combustible, oxidante y la

temperatura [3, 14]. Para la zona con combustible se tiene

$$Y_F(\xi) = Y_{F,-\infty} \left(\frac{\xi - \xi_{st}}{1 - \xi_{st}} \right), \quad (2.11)$$

$$Y_O(\xi) = 0, \quad (2.12)$$

$$T(\xi) = \xi T_{-\infty} + (1 - \xi) T_{\infty} + \frac{Q Y_{F,-\infty}}{C_p} \xi_{st} \frac{(1 - \xi)}{(1 - \xi_{st})}, \quad (2.13)$$

y para la que solo contiene oxidante

$$Y_F(\xi) = 0, \quad (2.14)$$

$$Y_O(\xi) = Y_{O,-\infty} \left(1 - \frac{\xi}{\xi_{st}} \right), \quad (2.15)$$

$$T(\xi) = \xi T_{-\infty} + (1 - \xi) T_{\infty} + \frac{Q Y_{O,-\infty}}{C_p} \xi_{st}, \quad (2.16)$$

donde los subíndices $-\infty$ y st representan los valores de las propiedades en la zona de inyección del combustible y en el punto estequiométrico respectivamente.

Este análisis nos lleva a la conclusión de que las llamas de difusión dependen esencialmente de esta variable, la fracción de mezcla. Esta relación se basa en que al definir la fracción de mezcla en función de un elemento que forma parte fundamental de la estructura del combustible, esta indica la cantidad de este presente en ese punto de la llama, lo que no es posible en llamas premezcladas. Es por esto que lo hace en primera instancia un excelente candidato como parámetro para definir las estructuras de flamelet en llamas difusivas. De hecho, estas podrían considerarse como las primeras ecuaciones de flamelet. Debido a las simplificaciones realizadas, las estructuras pueden ser descritas de forma analítica, que como se verá más adelante es imposible para mecanismos más detallados.

2.2. Otras definiciones de la fracción de mezcla

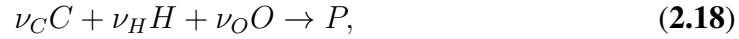
La definición clásica de la fracción de mezcla, como se vió en la sección anterior, se deriva a partir de un mecanismo de reacción de un paso. Pero en la mayoría de los mecanismos el combustible pasa por una serie de especies intermedias antes de combustionar completamente. Esto es un problema para esta definición de fracción

de mezcla, ya que estas reacciones intermedias pueden ocurrir en zonas relativamente gruesas de la llama, donde las concentraciones tanto de combustible como de oxidante son pequeñas y, por lo tanto, la fracción de mezcla tiene valor constante. Es por esto que en la literatura es posible encontrar definiciones alternativas basadas por ejemplo en un balance local de elementos. Masri et al. [49] presentan una definición basada en el balance del átomo de hidrógeno

$$\xi = \frac{\left(\frac{4\bar{M}_H}{\bar{M}_{CH_4}} Y_{CH_4} + \frac{2\bar{M}_H}{\bar{M}_{H_2O}} Y_{H_2O} + Y_{H_2} \right) - Y_{H,O}}{Y_{H,F} - Y_{H,O}}, \quad (2.17)$$

donde, $Y_{H,F}$ y $Y_{H,O}$ corresponde a la fracción másica de los átomos de Hidrógeno en los flujos de combustible y oxidante respectivamente.

Por otro lado, Bilger [50] haciendo uso de un equilibrio de elementos local, deriva una nueva expresión para la fracción de mezcla



$$\xi = \frac{\left(\frac{2Y_C}{\nu_C \bar{M}_C} + \frac{Y_H}{2\nu_H \bar{M}_H} - \frac{Y_O}{\nu_O \bar{M}_O} \right) + \frac{Y_{O,O}}{\nu_O \bar{M}_O}}{\frac{2Y_{C,F}}{\nu_C \bar{M}_C} + \frac{Y_{H,F}}{2\nu_H \bar{M}_H} + \frac{Y_{O,O}}{\nu_O \bar{M}_O}}. \quad (2.19)$$

Para estas definiciones es imposible derivar una ecuación de conservación, por lo que Pitsch y Peters [51] define la fracción de mezcla como una escalar tal que satisface la siguiente ecuación de transporte

$$\rho \frac{\partial \xi}{\partial t} + \rho u_i \frac{\partial \xi}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D \frac{\partial \xi}{\partial x_i} \right), \quad (2.20)$$

donde las condiciones de borde son 0 para el flujo de inyección del oxidante y 1 para el flujo de inyección de combustible.

Ahora bien, es posible derivar una expresión para la fracción de mezcla considerando todas las especies involucradas en el mecanismo de reacción. Para esto se hará uso de las ecuaciones de transporte para las especies químicas, la que se puede escribir como

$$\rho \frac{\partial Y_k}{\partial t} + \rho u_i \frac{\partial Y_k}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_i} \right) + \dot{\omega}_k, \quad (2.21)$$

si estas ecuaciones se multiplican por $a_{Ck}\bar{M}_C/M_k$, donde a_{Ck} denota el número de moles de carbono en la especie k , y se suman todas las ecuaciones, $k = 1, \dots, N$, esta queda

$$\rho \frac{\partial \xi}{\partial t} + \rho u_i \frac{\partial \xi}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{M_F}{a_{CF}} \rho \sum_{k=1}^N \frac{a_{Ck}}{M_k} D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_i} \right), \quad (2.22)$$

donde, la fracción de mezcla queda definido por

$$\xi = \frac{Z_C - Z_{C,O}}{Z_{C,F} - Z_{C,O}} \quad (2.23)$$

y

$$Z_C = \sum_{k=1}^N \left(\frac{a_{Ck} M_C}{M_k} \right). \quad (2.24)$$

Y, si se asume igualdad en los coeficientes de difusión entre las especies, la ecuación de transporte para la fracción de mezcla tiene la misma forma que la ec. (2.20) presentada por Pitsch y Peters [51], como se puede ver

$$\rho \frac{\partial \xi}{\partial t} + \rho u_i \frac{\partial \xi}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D \frac{\partial \xi}{\partial x_i} \right). \quad (2.25)$$

Esta última definición tiene la ventaja de que no se necesita asumir Lewis igual a 1, con la consecuencia de no conservar el valor estequiométrico, ya que esta se determina únicamente a través de la ecuación, desacoplándose totalmente de la composición local.

Para poder derivar un set de ecuaciones de flamelet, se hace necesario establecer cuál sera el nuevo sistema de coordenadas bajo el cual se realizará la transformación. Si se desea que la transformación sea unidimensional, esta coordenada ha de ser un parámetro que defina completamente a la llama, es por esto que motivados por la revisión presentada, para llamas no premezcladas se usa la fracción de mezcla como el parámetro que define la estructura de la llama.

2.3. Ecuaciones de flamelet clásicas

La necesidad de incorporar mecanismos de reacción detallados ya fue discutida anteriormente, y la primera formulación con esta adición fue realizada para llamas

gaseosas por Peters [22]. En esta formulación, la transformación realizada es $(\vec{x}, t) \rightarrow (\vec{\xi}, \tau)$, donde ξ_1 es la fracción de mezcla. Se verá que, a diferencia de las ecuaciones presentadas anteriormente y dada la gran cantidad tanto de especies químicas como de reacciones involucradas, es imposible llegar a una solución analítica. Las ecuaciones de transporte para las especies químicas y la temperatura se pueden reescribir en este nuevo espacio $(\xi_1, \xi_2, \xi_3, \tau)$, donde τ es el tiempo transformado [22], pudiendo expresar los escalares como función de estas nuevas coordenadas

$$\phi = f(\xi_1, \xi_2, \xi_3, \tau). \quad (2.26)$$

Los modelos de flamelet son válidos cuando el tiempo característico de la química es considerablemente menor al del flujo, o sea, para números de Damköhler muy altos. Es por esto que la combustión ocurre en una capa muy delgada, superficie cuyo valor de fracción de mezcla es el estequiométrico [22]. La estructura de los flamelets varía predominantemente en la dirección normal a estas superficies, y distintos estudios para otras configuraciones de llamas han revelado que los efectos tangenciales pueden llegar a ser relevantes en ciertas situaciones [25, 26, 33, 52]. De esta forma, las ecuaciones de transporte para las fracciones másicas de las especies químicas y la temperatura, [22], bajo la suposición de número de Lewis igual a 1, pueden escribirse como

$$\rho \frac{\partial Y_k}{\partial \tau} = \rho D \left(\frac{\partial \xi}{\partial x} \right)^2 \frac{\partial^2 Y_k}{\partial \xi^2} + \dot{\omega}_k - R(Y_k) \quad (2.27)$$

y

$$\rho \frac{\partial T}{\partial \tau} = \rho D \left(\frac{\partial \xi}{\partial x} \right)^2 \frac{\partial^2 T}{\partial \xi^2} - \sum_{k=1}^N \frac{h_k}{C_p} \dot{\omega}_k + \frac{1}{C_p} \left(\frac{\partial p}{\partial t} + q_R \right) - R(T), \quad (2.28)$$

con el operador R definido como

$$\begin{aligned} R(\cdot) = & \rho \left(v_2 \frac{\partial(\cdot)}{\partial \xi_2} + v_3 \frac{\partial(\cdot)}{\partial \xi_3} \right) - \frac{\partial(\rho D)}{\partial x_2} \frac{\partial(\cdot)}{\partial \xi_2} - \frac{\partial(\rho D)}{\partial x_3} \frac{\partial(\cdot)}{\partial \xi_3} \\ & - \rho D \sum_{i=2}^3 \left(2 \frac{\partial \xi}{\partial x_i} \frac{\partial^2(\cdot)}{\partial \xi \partial \xi_i} + \frac{\partial(\cdot)}{\partial \xi_i^2} \right), \end{aligned} \quad (2.29)$$

donde, Y_k es la fracción másica de la especie k , T es la temperatura, ρ es la densidad del gas, τ es tiempo transformado, $\dot{\omega}_k$ es el término fuente de la especie k asociado a las reacciones químicas, C_p el calor específico, q_R el flujo de calor, h_k la entalpía de la

especie k y p la presión.

Ya se ha hablado de que para llamas difusivas la fracción de mezcla por si sola es un parámetro que permite definir la estructura de la llama. Es por esto que en general para las ecuaciones de flamelet las variaciones en las otras coordenadas, representadas por el operador R en las ecs. (2.27) y (2.28), son despreciables, quedando así las ecuaciones de flamelet de la forma

$$\rho \frac{\partial Y_k}{\partial \tau} = \rho \frac{\chi}{2} \frac{\partial^2 Y_k}{\partial \xi^2} + \dot{\omega}_k \quad (2.30)$$

y

$$\rho \frac{\partial T}{\partial \tau} = \rho \frac{\chi}{2} \frac{\partial^2 T}{\partial \xi^2} - \sum_{k=1}^N \frac{h_k}{C_p} \dot{\omega}_k + \frac{1}{C_p} \left(\frac{\partial p}{\partial t} + q_R \right), \quad (2.31)$$

donde la tasa de disipación escalar, χ , se define como,

$$\chi = 2D \left(\frac{\partial \xi}{\partial x_i} \right)^2. \quad (2.32)$$

Este último término es el único que relaciona el espacio físico con el de flamelet, y es en este donde está presente toda la información del flujo. En las llamas en el espacio de flamelet un aumento local de la tasa de disipación escalar produce una reducción

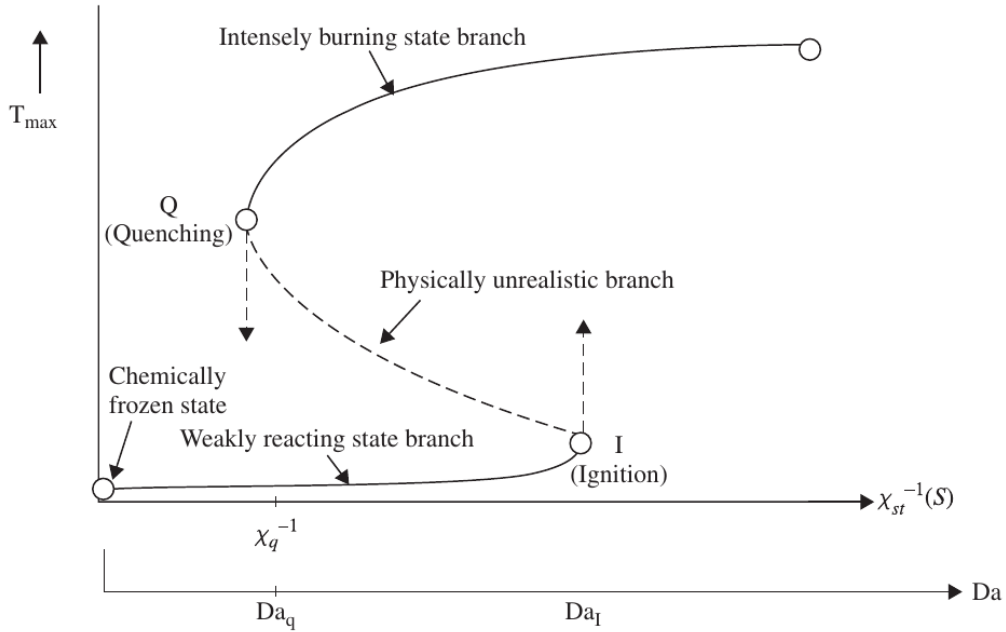


Figura 2.1: Curva S para llamas difusivas. Los puntos Q e I corresponden a la zona de extinción y de ignición respectivamente [2].

local del tiempo de residencia, lo que a su vez puede producir extinción local o incluso extinción total de llama, es de aquí que este valor se puede interpretar en términos de la extinción de la llama como una medida de estabilidad [22].

Para llamas difusivas, el comportamiento desde un estado de llama apagada, hasta su autoignición y su evolución puede ser representada por la curva-S (fig. 2.1), la que se obtiene al resolver de forma asintótica las ecuaciones de flamelet para una llama a contraflujo, y luego graficar las soluciones obtenidas, temperatura máxima vs χ_{st}^{-1} .

En la literatura es posible encontrar diversas modificaciones a estas ecuaciones [22, 24, 28], donde distintos fenómenos son incorporados, como por ejemplo difusión diferencial y peso molecular variable, efectos de curvatura, o versiones más sofisticadas donde ya no se desprecian ambas coordenadas tangenciales, sino que solo una, para de esta manera tener ecuaciones de flamelet en 2 dimensiones. A continuación se presentarán distintas versiones de las ecuaciones de flamelet. La primera es desarrollada por Peters [22] incorporando la difusión diferencial y peso molecular variable

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial Y_k}{\partial \tau} = & \rho \frac{\chi}{2} \frac{\partial^2 Y_k}{\partial \xi^2} + \dot{\omega}_k + \rho \frac{\chi}{2} \frac{Le_\xi}{Le_k} \frac{Y_k}{\bar{M}} \frac{\partial^2 \bar{M}}{\partial \xi^2} \\ & + \left[\left(\frac{Le_\xi}{Le_k} - 1 \right) \left(\frac{\partial(\rho\chi)}{\partial \xi} + \rho\chi Le_\xi \frac{C_p}{\lambda} \frac{\partial}{\partial xi} \left(\frac{\lambda}{C_p Le_\xi} \right) \right) \right] \frac{\partial Y_k}{\partial \xi} \\ & + \left[\frac{Le_\xi}{Le_k} \left(\frac{\partial}{\partial \xi} \left(\rho\chi \frac{Y_k}{\bar{M}} \right) + \rho\chi Le_\xi \frac{C_p}{\lambda} \left(\frac{\lambda}{C_p Le_\xi} \frac{Y_k}{\bar{M}} \right) \right) \right] \frac{\partial \bar{M}}{\partial \xi} \\ & + \frac{1}{4} \left[2\rho\chi \frac{Y_k}{\bar{M}} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{Le_\xi}{Le_k} \right) \right] \frac{\partial \bar{M}}{\partial \xi} + \frac{1}{4} \left[2\rho\chi \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{Le_\xi}{Le_k} \right) \right] \frac{\partial Y_k}{\partial \xi}. \end{aligned} \quad (2.33)$$

Hasse y Peters [24] hacen uso de un sistema bidimensional en el espacio de flamelet, usando como coordenadas 2 fracciones de mezclas, donde cada una de estas es usada para la caracterización de distintos flujos de combustible. Derivando las ecuaciones de flamelet correspondientes

$$\rho \frac{\partial Y_k}{\partial t} - \frac{\rho}{2Le_i} \left(\chi_1 \frac{\partial^2 Y_k}{\partial \xi_1^2} + 2\chi_{12} \frac{\partial^2 Y_k}{\partial \xi_1 \partial \xi_2} + \chi_2 \frac{\partial^2 Y_k}{\partial \xi_2^2} \right) - \dot{\omega}_k. \quad (2.34)$$

También Scholtissek et al. [28] han derivado un set de ecuaciones considerando efectos de difusión tangenciales, obteniendo

$$\begin{aligned}
\rho \frac{\partial Y_k}{\partial \tau} + \sum_{i=2}^3 \rho \nu_{si} \frac{\partial Y_k}{\partial s_i} = & \frac{Le_\xi}{Le_k} \frac{\rho \chi}{2} \frac{\partial^2 Y_k}{\partial \xi^2} + \frac{1}{4} \left(\frac{Le_\xi}{Le_k} - 1 \right) \frac{\partial(\rho \chi)}{\partial \xi} \frac{\partial Y_k}{\partial \xi} \\
& + \frac{1}{4} \left(\frac{Le_\xi}{Le_k} - 1 \right) \frac{\chi}{D_\xi} \frac{\partial(\rho D_\xi)}{\partial \xi} \frac{\partial Y_k}{\partial \xi} - \frac{\rho \chi Y_k}{2} \sum_{j=1}^N \frac{Le_\xi}{Le_j} \frac{\partial^2 Y_j}{\partial \xi^2} \\
& - \frac{1}{4} \frac{\partial(\rho \chi Y_k)}{\partial \xi} \sum_{j=1}^N \frac{Le_\xi}{Le_j} \frac{\partial Y_j}{\partial \xi} - \frac{1}{4} \frac{\chi}{D_\xi} \frac{\partial(\rho D_\xi Y_k)}{\partial \xi} \sum_{j=1}^N \frac{Le_\xi}{Le_j} \frac{\partial Y_j}{\partial \xi} \\
& + \frac{\rho \chi}{2} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{Le_\xi}{Le_k} \right) \frac{\partial Y_k}{\partial \xi} + \rho D_\xi \frac{Le_\xi}{Le_k} \sum_{i=2}^3 \frac{\partial^2 Y_k}{\partial s_i^2} \\
& - \rho D_\xi Y_k \sum_{j=1}^N \frac{Le_\xi}{Le_j} \sum_{i=2}^3 \frac{\partial^2 Y_j}{\partial s_i^2} \\
& - \left(\frac{Le_\xi}{Le_k} - 1 \right) \kappa_\xi \rho \left(\frac{D_\xi \chi}{1} \right)^{0,5} \frac{\partial Y_k}{\partial \xi} \\
& + \rho \left(\frac{D_\xi \chi}{2} \right)^{0,5} \kappa_\xi Y_k \sum_{j=1}^N \frac{Le_\xi}{Le_j} \frac{\partial Y_j}{\partial \xi} + \dot{\omega}_k, \tag{2.35}
\end{aligned}$$

donde κ_ξ es la curvatura de la fracción de mezcla.

Scholtissek et al. [46], en el contexto de llamas premezcladas, presentan ecuaciones flamelet usando como coordenada la variable de progreso, Y_c . Incorporando igualmente los fenómenos de curvatura. Las ecuaciones obtenidas son

$$\begin{aligned}
\rho \frac{\partial Y_k}{\partial \tau} = & -g_c \frac{\partial}{\partial Y_c} \left(g_c \rho Y_k \tilde{V}_k \right) + g_c \frac{\partial}{\partial Y_c} \left(g_c \rho Y_c \tilde{V}_c \right) \frac{\partial Y_k}{\partial Y_c} \\
& \rho g_c \kappa_c \left(Y_k \tilde{V}_k - Y_c \tilde{V}_c \frac{\partial Y_k}{\partial Y_c} \right) - \dot{\omega}_c \frac{\partial Y_k}{\partial Y_c} + \dot{\omega}_k, \tag{2.36}
\end{aligned}$$

donde g_c y κ_c son el gradiente y la curvatura de la variable de progreso respectivamente, y $\tilde{V}_i$ es la velocidad de difusión en la dirección i .

Más recientemente Scholtissek et al. [53] desarrollan una formulación bi-dimensional para las ecuaciones de flamelet. En esta formulación el espacio de composición es ortogonal, y está formada por la fracción de mezcla, ξ , y un escalar

reactivo, Y_c , perpendicular a este. La ecuación de fracciones másicas es

$$\dot{\omega}_{c\perp} \left. \frac{\partial Y_i}{\partial Y_c} \right|_{\xi} = \rho D |\nabla \xi|^2 \frac{\partial^2 Y_c}{\partial \xi^2} + \rho D |\nabla_{\perp} Y_c|^2 \left. \frac{\partial^2 Y_i}{\partial Y_c^2} \right|_{\xi} + \dot{\omega}_c, \quad (2.37)$$

donde

$$\dot{\omega}_{c\perp} = \rho D |\nabla \xi|^2 \frac{\partial^2 Y_c}{\partial \xi^2} \dot{\omega}_c. \quad (2.38)$$

Todas las ecuaciones presentadas anteriormente son exclusivamente para llamas gaseosas. A continuación se presentan los trabajos realizados para llamas con spray.

2.4. Ecuaciones de flamelet para llamas en spray

Existen varios modelos de flamelet que aplican las ecuaciones descritas en la sección pasada en llamas gaseosas turbulentas [24–27, 32, 33, 36, 51, 54], pero, por desgracia, cuando se trata de llamas en spray, el uso de librerías basadas en llamas gaseosas no han dado buenos resultados debido a que la evaporación juega un papel predominante tanto en la física del flujo como en la química de la combustión [41, 55, 56]. Es por esto que al igual que para las llamas gaseosas, el primer paso natural es desarrollar modelos de flamelet para llamas en spray [39, 42, 55, 57–60]. Recientemente se han empezado a desarrollar trabajos enfocados en las ecuaciones de flamelet para este tipo de llamas [41, 61–63], desafortunadamente, la mayoría de estos de manera bastante superficial, lo que tiene relación con la dificultad asociada. Luo et. al [61] y Olguin y Gutheil [64] han derivado de forma independiente un set de ecuaciones de flamelet en spray. Para estas la suposición de un número de Lewis igual a 1, y el uso de la ley de difusión de Fick son adoptados, [61, 64], dando como resultado

$$\rho \frac{\partial Y_k}{\partial \tau} = \rho \frac{\chi}{2} \frac{\partial^2 Y_k}{\partial \xi^2} + \dot{\omega}_k + \dot{S}_v (\xi - 1) \frac{\partial Y_k}{\partial \xi} + \dot{S}_v (\delta_{lk} - Y_k) \quad (2.39)$$

y

$$\rho \frac{\partial T}{\partial \tau} = \rho \frac{\chi}{2} \frac{\partial^2 T}{\partial \xi^2} + \frac{1}{C_p} \left(\dot{\omega}_T + \dot{S}_e \right) + \dot{S}_v (\xi - 1) \frac{\partial T}{\partial \xi} - \dot{S}_v T, \quad (2.40)$$

donde $\dot{S}_v$ y $\dot{S}_e$ son los términos fuentes debido a la evaporación de masa y energía. En este set de ecuaciones además de tener la tasa de disipación escalar como término sin cerrar, se tienen los términos fuentes debido a la evaporación. Olguin y Gutheil

[64] sin resolver directamente las ecuaciones de flamelet, pero incluyendo una química detallada en su análisis, concluyen que la evaporación es el proceso con mayor predominancia en las estructuras del flamelet en spray, y no puede ser despreciada.

Además, desde el punto de vista de la resolución numérica de las ecuaciones, este tipo de llamas presentan inconvenientes, ya que la fracción de mezcla, la cual presenta un comportamiento monotónico en llamas gaseosas, no lo es en estas llamas en spray. Para esto, se suele dividir el dominio en dos zonas, una donde la fracción de mezcla presenta un gradiente positivo, y la otra con un gradiente negativo, esto es posible ya que el perfil de la fracción de mezcla en este tipo de llamas presenta un máximo, el que a priori tampoco se conoce, haciendo que esta solución tampoco sea sencilla [57, 64–66]. Otra propuesta es hacer uso de una nueva variable para definir el espacio de flamelet, reemplazando la fracción de mezcla por una composición efectiva, para de esta manera evitar la no monotonicidad, ya que esta nueva variable se define monotónica en el espacio físico. Si bien Franzelli et al. [62] llegan a resultados prometedores con esta nueva variable, donde logran resultados consistentes para una configuración de flujos opuestos simplificado, y de esta manera poder solventar de buena forma el problema de la no monotonicidad de la fracción de mezcla, esta sigue siendo un gran candidato para describir la llama, ya que como se mostró en la sección 2.1, existe una clara dependencia entre la llama y la fracción de mezcla, y una dependencia similar no ha sido demostrada para la composición efectiva.

2.5. Cierre de la tasa de disipación escalar

Para poder resolver las ecuaciones de flamelet (2.27) y (2.28), el único término que en principio se encuentra abierto es la tasa de disipación escalar, pero para llamas gaseosas estacionarias es posible derivar expresiones analíticas, obtenidas a través de una serie de suposiciones aplicadas a la ec. (2.10). Una de las soluciones analíticas más simples presentes en la literatura, en este caso para una configuración de flujos opuestos fue desarrollada por Peters [22] y puede expresarse como

$$\chi(\xi) = 4a_s\xi^2[erfc^{-1}(2\xi)]^2, \quad (2.41)$$

donde a_s es el strain rate en el punto de estancamiento y $erfc^{-1}$ es la inversa de la función de error complementaria. Una vez obtenido el perfil para la tasa de disipación escalar es posible resolver las ecuaciones de flamelet para la generación de

librerías, en este caso, en base a llamas de contraflujo estacionarias, donde se fijan todas las condiciones de contorno a excepción del strain rate. Este se va aumentando gradualmente hasta llegar a la extinción de la llama.

De forma alternativa a las soluciones analíticas, es posible usar ecuaciones de transporte para la tasa de disipación escalar, Hasse [24] presenta una ecuación para esta variable

$$\frac{\partial \chi}{\partial t} + u_i \frac{\partial \chi}{\partial x_i} + 4D \frac{\partial \xi}{\partial x_j} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \frac{\partial \xi}{\partial x_i} = D \frac{\partial^2 \chi}{\partial x_i^2} - 4D^2 \left(\frac{\partial^2 \xi}{\partial x_i \partial x_j} \right)^2. \quad (2.42)$$

Como se explicó en la presentación de la ec. (2.34), este hace uso de un sistema bidimensional, para el cual deriva una ecuación para cada tasa de disipación escalar

$$\frac{\partial \chi_1}{\partial t} + \frac{1}{4} \left(\frac{\partial \chi_1}{\partial \xi_1} \right)^2 - 2a_1 \chi_1 = \frac{\chi_1}{2} \frac{\partial^2 \chi_1}{\partial \xi^2} + \chi_{12} \frac{\partial^2 \chi_1}{\partial \xi_1 \partial \xi_2} + \frac{\chi_2}{2} \frac{\partial^2 \chi_1}{\partial \chi_2^2}, \quad (2.43)$$

con una ecuación análoga para χ_2 .

Para la formulación con los efectos de curvatura Scholtissek et al. [67] derivó una ecuación para $\hat{\chi}$, que se relaciona con la tasa de disipación escalar según la relación $\hat{\chi} = (\nabla \xi)^2 = \chi / 2D_\chi$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{\chi}}{\partial \tau} = & -\frac{D}{2} \left(\frac{\partial \hat{\chi}}{\partial \xi} \right)^2 + \hat{\chi} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(D \frac{\partial \hat{\chi}}{\partial \xi} \right) + \frac{\hat{\chi}}{\rho} \frac{\partial(\rho D)}{\partial \xi} \frac{\partial \hat{\chi}}{\partial \xi} + 2\hat{\chi}^2 \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial(\rho D)}{\partial \xi} \right) \\ & - 2\hat{\chi}^{3/2} \kappa_\xi \frac{\partial D}{\partial \xi} - 2\hat{\chi}^{3/2} D \frac{\partial \kappa_\xi}{\partial \xi} - 2a\hat{\chi}. \end{aligned} \quad (2.44)$$

En el caso de las llamas premezcladas, para describir la llama se usa la variable de progreso, Y_c , y en la derivación de ecuaciones de flamelet en este espacio, igualmente aparece una tasa de disipación escalar, definida como $\chi_c = 2D_c(\nabla Y_c)^2$, para la cual Scholtissek et al. [46] derivaron una ecuación de transporte.

Para llamas en spray se hace necesaria la utilización de una nueva ecuación de transporte para esta variable, Olguin y Gutheil [41] presentan una ecuación para la tasa de disipación escalar

$$\rho \frac{\partial \chi}{\partial t} + u_i \frac{\partial \chi}{\partial x_i} = D \frac{\partial^2 \chi}{\partial \xi^2} + S_{\chi,g} + S_{\chi,v} \quad (2.45)$$

donde

$$\begin{aligned}
S_{\chi,g} = & -4D \frac{\partial \xi}{\partial x_i} \frac{\partial \xi}{\partial x_j} \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - 4D^2 \left(\frac{\partial^2 \xi}{\partial x_i \partial x_j} \right)^2 - D\chi \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{1}{D} \\
& - \frac{4D}{\rho} \frac{\partial \xi}{\partial x_i} \frac{\partial \xi}{\partial x_j} u_i \frac{\partial \rho}{\partial x_j} + 2D^2 \frac{\partial \chi}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{1}{D} \right) + \frac{4D}{\rho} \frac{\partial^2 \xi}{\partial x_i^2} \frac{\partial \xi}{\partial x_j} \frac{\partial(\rho D)}{\partial x_j} \\
& + \frac{4D}{\rho} \frac{\partial \xi}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial \xi}{\partial x_j} \frac{\partial(\rho D)}{\partial x_j} \right) - D\chi \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{D} \right) - \frac{4D}{\rho} \frac{\partial \xi}{\partial t} \frac{\partial \xi}{\partial x_j} \frac{\partial \rho}{\partial x_j} \\
& + \chi D^2 \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} \left(\frac{1}{D} \right), \tag{2.46}
\end{aligned}$$

$$S_{\chi,v} = \frac{4D}{\rho} \frac{\partial \xi}{\partial x_j} \frac{\partial}{\partial x_j} [S_v(1 - \xi)]. \tag{2.47}$$

Del trabajo de Scholtissek et al. [46] se puede deducir que la utilización del gradiente de la fracción de mezcla, g_ξ , podría solucionar problemas relacionados con la inestabilidad numérica una vez que la ec. (2.45) es transformada al espacio de flamelet. Esta variable se puede relacionar directamente con la tasa de disipación escalar a través de

$$\chi = 2D_\xi g_\xi^2. \tag{2.48}$$

Cuando se considera g_ξ directamente [45], la ecuación de transporte se ve de la siguiente forma

$$\rho u_y g_\xi = \frac{d}{dy} (\rho D_\xi g_\xi) + \dot{S}_v(1 - \xi), \tag{2.49}$$

donde u_y es la velocidad del flujo en la coordenada axial. Es evidente que la ec. (2.49) es mucho más sencilla que la ec. (2.45), y es con esta última con la que se trabajará en esta tesis, su transformación al espacio de flamelet se mostrará en la sección 3.2.

En esta tesis se trabajará en la clausura de los términos aún abiertos en las ecuaciones de flamelet. Debido a que tanto la velocidad del flujo como los perfiles de evaporación dependen de la configuración física del problema, en primera instancia y con el objetivo último de validar estas ecuaciones para llamas en spray se cerrarán estos términos para una llama de flujos opuestos. De esta manera es posible obtener un sistema cerrado.

En el siguiente capítulo se presenta con detalle el modelo matemático empleado en este trabajo.

Capítulo 3

Modelo matemático para llamas de flujos opuestos

En este capítulo se presentan los modelos para la descripción de llamas de flujos opuestos con spray. El primero haciéndolo en el espacio físico, mientras que el segundo haciendo uso del espacio de flamelet, con la fracción de mezcla, ξ como coordenada.

3.1. Ecuaciones gobernantes en el espacio físico

Dada la naturaleza bifásica del sistema a modelar primero se presentan las ecuaciones para la fase gaseosa (con una descripción Euleriana), para luego hacerlo con las de la fase líquida (con una descripción Lagrangiana).

3.1.1. Fase gaseosa

Las ecuaciones de balance de masa, momentum en dirección radial, especies químicas y energía para llamas en spray estacionarias en una configuración a contraflujo axisimétrica [45, 68], pueden escribirse como

$$\frac{1}{r} \frac{\partial(\rho u_r r)}{\partial r} + \frac{\partial(\rho u_y)}{\partial y} = \dot{S}_v, \quad (3.1)$$

$$\rho u_r \frac{\partial u_r}{\partial r} + \rho u_y \frac{\partial u_r}{\partial y} = -\frac{dp}{dr} + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial u_r}{\partial r} \right) + \dot{S}_m, \quad (3.2)$$

$$\rho u_y \frac{dY_k}{dy} = -\frac{d(\rho V_{ky} Y_k)}{dy} + \dot{\omega}_k + \dot{S}_v(\delta_{kf} - Y_k), \quad (3.3)$$

$$\rho C_p u_y \frac{dT}{dy} = \frac{d}{dy} \left(\lambda \frac{dT}{dy} \right) - \rho \frac{dT}{dy} \sum_{k=1}^N (C_{pk} V_{ky} Y_k) + \dot{\omega}_T + \dot{S}_e, \quad (3.4)$$

donde ρ es la densidad del gas, u_r y u_y son las velocidades radial y axial respectivamente, μ es la viscosidad del gas, $\dot{\omega}_k$ y $\dot{\omega}_T$ son los términos fuentes debido a reacciones químicas para las fracciones másicas y energía, δ_{kF} es el delta de Kronecker, y F se refiere al combustible, C_p y C_{pk} son los calores específicos a presión constante de la mezcla de gases y cada una de las k especies químicas, λ es la conductividad térmica, $\dot{S}_v$, $\dot{S}_m$ y $\dot{S}_e$ son los términos fuente debido a la evaporación de las gotas y V_{ky} es la velocidad de difusión de las k especies químicas en la dirección axial, y es calculada como

$$V_{ky} = -\frac{D_k}{X_k} \frac{dX_k}{dy} - \frac{D_{Tk}}{\rho T Y_k} \frac{dT}{dy} + \sum_{k'=1}^N \left(D_j \frac{Y'_k}{X'_k} \frac{dX'_k}{dy} + \frac{D_{Tk'}}{\rho T} \frac{dT}{dy} \right), \quad (3.5)$$

donde X_k , D_k y D_{Tk} son las fracciones molares, los coeficientes de difusión másico y de difusión térmica para cada una de las especies respectivamente. El término fuente debido a las reacciones químicas para la energía es

$$\dot{\omega}_T = - \sum_{k=1}^N \Delta h_{fk} \dot{\omega}_k, \quad (3.6)$$

donde Δh_{fk} es la entalpía de formación para la especie k . Todos los coeficientes de transporte son calculados de acuerdo a Kee et al. [69]. Y los términos fuentes debido a la evaporación,[68], pueden ser escritos como

$$\dot{S}_v = n \dot{m}, \quad (3.7)$$

$$\dot{S}_m = -n \left(m_l \frac{du_{rl}}{dt} + \dot{m} (u_r - u_{rl}) \right), \quad (3.8)$$

$$\dot{S}_e = -n (\dot{q} + \dot{m} [C_{pF} (T - T_s) + L]), \quad (3.9)$$

donde n es la densidad del número de gotas, $\dot{m}$ es el flujo másico, m_l es la masa de la gota, u_{rl} es la velocidad radial del gota, $\dot{q}$ el flujo de energía hacia la gota, C_{pF} el calor específico del combustible, T_s la temperatura en la superficie de la gota y L es el calor latente de vaporización.

La definición de la fracción de mezcla, ξ , es la misma que la presentada por Pitsch y Peters [51] y Olguin et al. [45], como un escalar que satisface la siguiente ecuación

de transporte

$$\rho u_y \frac{d\xi}{dy} = \frac{d}{dy} \left(\rho D_\xi \frac{d\xi}{dy} \right) + \dot{S}_v(1 - \xi), \quad (3.10)$$

donde D_ξ es el coeficiente de difusión. Para el gradiente de la fracción de mezcla

$$g_\xi = \frac{d\xi}{dy}, \quad (3.11)$$

se puede obtener una ecuación de transporte, [45], insertando la ec. (3.11) en la ec. (3.10)

$$\rho u_y g_\xi = \frac{d}{dy} (\rho D_\xi g_\xi) + \dot{S}_v(1 - \xi). \quad (3.12)$$

En el sistema de ecuaciones presentado los términos que se relacionan con la fase líquida son las fuentes de evaporación (ecs. (3.7), (3.8) y (3.9)), Las que se calculan con la ayuda del set de ecuaciones que se presenta a continuación.

3.1.2. Fase líquida

Para modelar la evaporación se usa un formulación híbrida Euleriana-Lagrangiana [70], además se considera que las gotas están formadas únicamente por combustible, que estas son simétricamente esféricas, que la vecindad a estas, el film, posee el mismo tipo de simetría, cuasi-estacionario, y, el spray es monodisperso [68], esto quiere decir que las gotas para una misma ubicación axial son idénticas, aunque esto no impide que pueda existir polidispersidad local. Las ecuaciones de balance de masa y energía, pueden escribirse como

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{4}{3} \pi R^3 \rho_l \right) = -\dot{m}, \quad (3.13)$$

y

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha_l \frac{1}{\varsigma^2} \frac{\partial}{\partial \varsigma} \left(r^2 \frac{\partial T}{\partial \varsigma} \right), \quad (3.14)$$

donde R es el radio instantáneo, ρ_l la densidad de la gota, α_l la conductividad térmica y ς es la coordenada radial interna dentro de la gota. Se puede modelar el flujo de masa evaporada de acuerdo a lo presentado por Abramzon y Sirignano [47], de la forma

$$\dot{m} = 2\pi \rho_f D_f R \tilde{Sh} \ln(1 + B_M), \quad (3.15)$$

donde ρ_f y D_f son la densidad y el coeficiente de difusión en el film respectivamente, B_M es el número de transferencia para la masa de Spalding y $\tilde{Sh}$ es el número de Sherwood modificado

$$\tilde{Sh} = 2 + \frac{(1 + \text{ReSc})^{1/3} [\text{máx}(1, \text{Re})]^{0,077} - 1}{(1 + B_M)^{0,7} \ln(B_M + 1)} B_M, \quad (3.16)$$

donde Re y Sc son los números de Reynolds y Schmidt.

La ecuación vectorial para la dinámica de la gota se obtiene a partir de un balance de fuerzas. Esta se puede expresar como

$$\frac{4}{3}\pi R^3 \rho_l \frac{d\mathbf{u}_l}{dt} = \pi R^2 \frac{1}{2} (\mathbf{u} - \mathbf{u}_l) |\mathbf{u} - \mathbf{u}_l| C_D + \frac{4}{3}\pi R^3 \rho_l \mathbf{G}, \quad (3.17)$$

donde $\mathbf{u}_l$ y $\mathbf{u}$ son los vectores de velocidad de la gota y el gas, $\mathbf{G}$ es el vector gravedad, que de ahora en adelante será despreciado y C_D es el coeficiente de arrastre, el que, si se asume un flujo de Stokes, se calcula

$$C_D = \frac{24}{\text{Re}} = \frac{12\nu}{|\mathbf{u} - \mathbf{u}_l| R}. \quad (3.18)$$

En la ec. (3.17) el término del lado izquierdo corresponde a las sumatoria total de las fuerzas, masa $\times$ aceleración, mientras que al lado derecho se tienen en primer lugar la fuerza de arrastre generada por diferencia de velocidad entre la gota y el gas alrededor de esta y la fuerza de gravedad.

Para la densidad del número de gotas se considera no interacción entre ellas, tampoco se considera generación o destrucción de las mismas, entonces, la ecuación Euleriana estacionaria es

$$\frac{\partial(nu_r)}{\partial r} + \frac{\partial(nu_y)}{\partial y} = 0. \quad (3.19)$$

Con este sistema de ecuaciones se tiene un modelo general para modelar combustión de spray.

3.2. Derivación y cierre de las ecuaciones de flamelet en spray

En esta sección se presenta el sistema de ecuaciones de flamelet general. Luego se presentan los términos no cerrados y las clausuras para estos en una configuración de flujos opuestos.

3.2.1. Ecuaciones de flamelet

En este trabajo se utilizarán las ecuaciones de flamelet en términos de g_ξ [45]. El cambio de coordenadas correspondiente es

$$\frac{d(\cdot)}{dy} = g_\xi \frac{d(\cdot)}{d\xi}. \quad (3.20)$$

Aplicando la ec. (3.20) en las ecs. (3.3) y (3.4), de acuerdo a lo presentado por Olguin et al. [45], las ecuaciones de flamelet en spray quedan

$$\begin{aligned} g_\xi^2 \rho \frac{D_\xi}{\text{Le}_k} \frac{d^2 Y_k}{d\xi^2} = & -\dot{\omega}_k + \frac{dY_k}{d\xi} g_\xi \frac{d}{d\xi} \left(\rho D_\xi \left(\frac{\text{Le}_k - 1}{\text{Le}_k} \right) g_\xi \right) + g_\xi \frac{d(\tilde{V}_{k\xi} g_\xi)}{d\xi} \\ & + \frac{dY_k}{d\xi} \dot{S}_v (1 - \xi) - \dot{S}_v (\delta_{kF} - Y_k) \end{aligned} \quad (3.21)$$

y

$$\begin{aligned} g_\xi^2 \rho D_\xi C_p \frac{d^2 T}{d\xi^2} = & -\dot{\omega}_T - \frac{dT}{d\xi} g_\xi^2 \rho D_\xi \frac{dC_p}{d\xi} + g_\xi^2 \rho \frac{dT}{d\xi} \sum_{k=1}^N (C_{pk} V_{k\xi} Y_k) \\ & + C_p \frac{dT}{d\xi} \dot{S}_v (1 - \xi) - \dot{S}_e, \end{aligned} \quad (3.22)$$

donde la velocidad de difusión de la especie k es

$$V_{k\xi} = -\frac{D_k}{Y_k} \frac{dY_k}{d\xi} + \frac{\tilde{V}_{k\xi}}{\rho Y_k} \quad (3.23)$$

y

$$\tilde{V}_{k\xi} = -\rho D_k \frac{Y_k}{\bar{W}} \frac{d\bar{W}}{d\xi} - \frac{D_{Tk}}{T} \frac{dT}{d\xi} + \rho Y_k \sum_{k'=1}^N \left(D_{k'} \frac{Y_{k'}}{X_{k'}} \frac{dX_{k'}}{d\xi} + \frac{D_{Tk'}}{\rho T} \frac{dT}{d\xi} \right), \quad (3.24)$$

donde $\bar{W}$ es el peso molecular de la mezcla. La ecuación de flamelet para el gradiente de la fracción de mezcla se obtiene de la misma forma que las ecuaciones de especies químicas y energía, [45], y esta queda

$$g_\xi^2 \rho D_\xi \frac{d^2 g_\xi}{d\xi^2} = g_\xi \hat{a} - g_\xi^3 \frac{d^2(\rho D_\xi)}{d\xi^2} - 2g_\xi^2 \frac{d(\rho D_\xi)}{d\xi} \frac{dg_\xi}{d\xi} + \frac{dg_\xi}{d\xi} \dot{S}_v (1 - \xi) - g_\xi \frac{d}{d\xi} (\dot{S}_v [1 - \xi]), \quad (3.25)$$

donde

$$\hat{a} = g_\xi \frac{d(\rho u_y)}{d\xi}. \quad (3.26)$$

En este set de ecuaciones, presentado por primera vez en [45], se tienen 3 términos abiertos, en las ecs. (3.21), (3.22) y (3.25) están los términos fuentes debido a la evaporación, $\dot{S}_v$ y $\dot{S}_e$. Además en la ec. (3.25) el término $\hat{a}$ tampoco está cerrado.

3.2.2. Términos no cerrados

Dado que la naturaleza de $\hat{a}$ y los términos fuente $\dot{S}_v$, $\dot{S}_e$ depende fuertemente de la configuración física, estas no pueden ser cerradas de forma general. A continuación se presenta su cierre específico para una configuración de flujos opuestos.

Cierre de $\hat{a}$ utilizando una función de corriente

Para cerrar el término $\hat{a}$, y solo para una configuración a contraflujo, es posible usar una función de corriente [68] para realizar una transformación de similaridad en la coordenada radial

$$f(\xi) = \int_0^\xi \frac{u_r}{r} d\xi'. \quad (3.27)$$

Usando esta ecuación en la ec. (3.1), y luego del trabajo algebraico correspondiente obtenemos

$$2\rho f' + g_\xi \frac{d(\rho u_y)}{d\xi} = \dot{S}_v. \quad (3.28)$$

De la ec. (3.28), $\hat{a}$ puede ser escrito como

$$\hat{a} = \dot{S}_v - 2\rho f', \quad (3.29)$$

donde f' es la derivada en la dirección ξ de la función f

$$f' = \frac{df}{d\xi} = \frac{u_r}{r}. \quad (3.30)$$

Con la ec. (3.28) también es posible obtener una expresión para u_y

$$u_y = \frac{1}{\rho} \left[\int_0^{\xi'} \frac{\dot{S}_v - 2\rho f'}{g_\xi} d\xi' + (\rho u_y)_{\xi=0} \right]. \quad (3.31)$$

Usando las ecs. (3.27) y (3.31) en la ec. (3.2), se obtiene la siguiente ecuación para f'

$$g_\xi \frac{d}{d\xi} (\mu g_\xi f'') = \left[\int_0^\xi \frac{\dot{S}_v - 2\rho f'}{g_\xi} d\xi' + (\rho u_y)_{\xi=0} \right] g_\xi f'' + \rho (f')^2 - \rho_0 a_{-\infty}^2 - \frac{\dot{S}_m}{r}, \quad (3.32)$$

donde dp/dr es expresado usando una ecuación de Euler de la siguiente forma

$$\rho \left(u_r \frac{\partial u_r}{\partial r} + u_y \frac{\partial u_r}{\partial y} \right) = -\frac{dp}{dr}. \quad (3.33)$$

Evaluando la ec. (3.33) en el flujo potencial externo, donde $u_r(\xi = 0) = a_{-\infty} r$

$$\rho_0 a_{-\infty} r \frac{\partial a_{-\infty} r}{\partial r} + \rho_0 u_y \frac{\partial u_r}{\partial y} = -\frac{dp}{dr}, \quad (3.34)$$

dada la transformación de similaridad realizada, la velocidad radial depende únicamente de la coordenada radial, por lo que su derivada en dirección axial es 0. Entonces la derivada radial de la presión queda finalmente como

$$-\rho_0 a_{-\infty}^2 r = -\frac{dp}{dr}, \quad (3.35)$$

quedando expresado como una función del gradiente de la velocidad en el borde de inyección de gotas, $a_{-\infty}$. En la clausura presentada un nuevo término abierto aparece en la ec. (3.32), el término fuente de momento debido a la evaporación, S_m , el que al igual que las otras fuentes abiertas, su clausura se presentará a continuación.

Cierre de los términos evaporativos

Además de f' , en este trabajo se derivan expresiones para las ecuaciones de la fase líquida en espacio de flamelet, en específico para la dinámica de la gota y la densidad del número de gotas, (3.17) y (3.19) respectivamente. Para esto una nueva variable es introducida, simulando a lo hecho por Continillo y Sirignano [68] en el espacio físico

$$\xi_r = \frac{r}{u_{r0}}, \quad (3.36)$$

con el fin de poder, al igual que en la fase gaseosa, independizar las ecuaciones de la coordenada radial con ayuda de ξ_r . También el siguiente cambio para la coordenada temporal es realizado

$$\tau = \int_0^t \frac{R_0}{R} dt', \quad (3.37)$$

con lo que

$$\frac{d}{dt} = \frac{R_0}{R} \frac{d}{d\tau}. \quad (3.38)$$

Esta nueva coordenada temporal es útil porque para un mismo paso de tiempo, $d\tau$, el paso de tiempo original, dt , va disminuyendo a medida que el radio decrece, de tal manera que la rapidez de evaporación de la gota, que se acrecienta a medida que esta es más pequeña, puede ser capturada de mejor manera.

Cuando la ec. (3.38) es aplicada a la ec. (3.17), la ecuación de la dinámica de la gota queda

$$\frac{d^2 \mathbf{x}}{d\tau^2} - \frac{1}{R} \left[\frac{dR}{d\tau} - \frac{9\nu}{2R_0\rho_l} \right] \frac{d\mathbf{x}}{d\tau} = \frac{9\nu}{2R_0^2\rho_l} \mathbf{u}. \quad (3.39)$$

Primero se trabajará con la dinámica de la gota para la coordenada radial de la ecuación vectorial, ec. (3.39). Para esto se ve modificada la definición de la velocidad radial de la fase gaseosa, ec. (3.27), quedando

$$\frac{d^2 \xi_r}{d\tau^2} - \frac{1}{R} \left[\frac{dR}{d\tau} - \frac{9\nu}{2R_0\rho_l} \right] \frac{d\xi_r}{d\tau} = \frac{9\nu}{2R_0^2\rho_l} \frac{df}{d\xi} \xi_r. \quad (3.40)$$

Si la condición inicial, ξ_{r0} , es constante, ξ_r no dependerá de r . Para la componente y , por otro lado, se utiliza el cambio de coordenada (3.20), donde las primeras y segundas

derivadas pueden ser expresadas como

$$\frac{dy}{d\tau} = \frac{1}{g_\xi} \frac{d\xi}{d\tau} \quad (3.41)$$

y

$$\frac{d^2y}{d\tau^2} = \frac{d}{d\xi} \left(\frac{1}{g_\xi} \right) \left(\frac{d\xi}{d\tau} \right) + \frac{1}{g_\xi} \frac{d^2\xi}{d\tau^2}. \quad (3.42)$$

Introduciendo las ecs. (3.41) y (3.42) en la ec. (3.39), la nueva ecuación para la posición axial es

$$\begin{aligned} \frac{d^2\xi}{d\tau^2} + g_\xi \frac{d}{d\xi} \left(\frac{1}{g_\xi} \right) \left(\frac{d\xi}{d\tau} \right)^2 - \frac{1}{R} \left[\frac{dR}{d\tau} - \frac{9\nu}{2R_0\rho_l} \right] \frac{d\xi}{d\tau} \\ = \frac{9\nu g_\xi}{2R_0^2\rho_l} \frac{1}{\rho} \left[\int_0^\xi \frac{\dot{S}_v - 2\rho f'}{g_\xi} d\xi' + (\rho u_y)_{\xi=0} \right]. \end{aligned} \quad (3.43)$$

Para terminar, se requiere una expresión Lagrangiana para n (ec. (3.19)). Esta ecuación se puede reescribir para n como

$$\left(u_r \frac{\partial n}{\partial r} + u_y \frac{\partial n}{\partial y} \right) + n \frac{\partial u_r}{\partial r} + n \frac{\partial u_y}{\partial y} = 0. \quad (3.44)$$

Emulando lo realizado por Gutheil y Sirignano [65], es posible obtener una solución analítica exacta para n , esta tiene la forma

$$n = \frac{n_0 \xi_{r0} u_{l0}}{\xi_r u_l}. \quad (3.45)$$

Se puede, con ayuda de la ec. (3.20), escribir la velocidad axial del flujo en términos de la fracción de mezcla,

$$u_y = \frac{dy}{dt} = \frac{dy}{d\xi} \frac{d\xi}{dt} = \frac{1}{g_\xi} u_\xi. \quad (3.46)$$

De esta forma, finalmente se tiene una expresión para la densidad del número de gotas que queda expresada como

$$n = \frac{n_0 \xi_{r0} u_{\xi 0}}{g_{\xi 0}} \frac{g_\xi}{\xi_r u_\xi}. \quad (3.47)$$

Con esto se tiene un sistema cerrado, donde los valores de referencia para la adimensionalización y las condiciones de contorno e iniciales se muestran en la siguiente sección.

Capítulo 4

Solución numérica

En esta sección se presenta el set de ecuaciones contra el cuál los modelos de clausura se validarán, para luego presentar las condiciones de contorno y las condiciones iniciales. Para finalmente explicar el método de discretización y el algoritmo de resolución del sistema.

4.1. Ecuación con transformación de similaridad

Con el objetivo de validar las ecuaciones de flamelet, y dado que la resolución de las ecuaciones bidimensionales de la sección 3.1 es computacionalmente costosa, se realiza la transformación de similaridad presentada por [68], la que tiene la forma

$$\eta = \int_0^y \rho dy', \quad (4.1)$$

e introduciendo la función de corriente

$$f = \int_0^\eta \frac{u_r}{r} d\eta', \quad (4.2)$$

es posible simplificar el sistema de ecuaciones en espacio físico a un sistema unidimensional, tal y como se muestra a continuación.

4.1.1. Fase gaseosa

Para la transformación del conjunto de ecuaciones se inicia con el balance de masa (ec. (3.1)), la que queda como

$$2\rho f' + \rho \frac{d(\rho u_y)}{d\eta} = \dot{S}_v, \quad (4.3)$$

donde f' es la derivada de la función f con respecto a η . De acá se obtiene una expresión para u_y

$$u_y = \frac{1}{\rho} \left[\int_0^\eta \frac{\dot{S}_v}{\rho} d\eta' - 2f \right], \quad (4.4)$$

donde el valor de $\eta = 0$ corresponde al punto de estancamiento y por ende, la constante de integración es 0. Luego, reemplazando las ecs. (4.2) y (4.4) en la ec. (3.2), se tiene una para f'

$$\frac{d}{d\eta}(\mu\rho f'') = \left[\int_0^\eta \frac{\dot{S}_v}{\rho} d\eta' - 2f \right] f'' + (f')^2 - \frac{\rho_0 a_\infty^2}{\rho} - \frac{\dot{S}_m}{\rho r}, \quad (4.5)$$

donde dp/dr nuevamente es expresado usando una ecuación de Euler, tal y como se muestra en la ec. (3.35). Con la transformación anteriormente mostrada, las ecuaciones de balance de especies químicas y de energía quedan como

$$\frac{d(\rho Y_{k\eta} Y_k)}{d\eta} + \left[\int_0^\eta \frac{\dot{S}_v}{\rho} d\eta' - 2f \right] \frac{dY_k}{d\eta} = \frac{\dot{\omega}}{\rho} + \frac{\dot{S}_v}{\rho} (\delta_{kF} - Y_k) \quad (4.6)$$

y

$$C_p \left[\int_0^\eta \frac{\dot{S}_v}{\rho} d\eta' - 2f \right] \frac{dT}{d\eta} = \frac{d}{d\eta} \left(\lambda \rho \frac{dT}{d\eta} \right) - \rho \frac{dT}{d\eta} \sum_{k=1}^N (C_{pk} V_{k\eta} Y_k) + \frac{\dot{\omega}_k}{\rho} + \frac{\dot{S}_e}{\rho}, \quad (4.7)$$

respectivamente. Con esto se tiene un sistema unidimensional para modelar llamas a contraflujo en el espacio físico.

4.1.2. Fase líquida

En el caso de la fase líquida, las únicas ecuaciones que han de ser transformadas son las de la dinámica de la gota y la densidad del número de gotas, ecs. (3.17) y

(3.19) respectivamente. Para esto, un tratamiento parecido al realizado en el análisis de flamelet se hará, donde la variable s , ec. (3.36), es empleada, de igual manera el mismo cambio de coordenada temporal (ec.(3.38)), se empleará.

Para la componente y es usado el cambio de coordenada de similaridad (ec. (4.1)), las primeras y segundas derivadas pueden ser expresadas como

$$\frac{dy}{d\tau} = \frac{1}{\rho} \frac{d\eta}{d\tau} \quad (4.8)$$

y

$$\frac{d^2y}{d\tau^2} = \frac{d}{d\eta} \left(\frac{1}{\rho} \right) \left(\frac{d\eta}{d\tau} \right) + \frac{1}{\rho} \frac{d^2\eta}{d\tau^2}, \quad (4.9)$$

introduciendo las ecs. (4.8) y (4.9) en la ec. (3.39), la ecuación para la posición axial es

$$\begin{aligned} \frac{d^2\eta}{d\tau^2} + \rho \frac{d}{d\eta} \left(\frac{1}{\rho} \right) \left(\frac{d\eta}{d\tau} \right)^2 - \frac{1}{R} \left[\frac{dR}{d\tau} - \frac{9\nu}{2R_0\rho_l} \right] \frac{d\eta}{d\tau} \\ = \frac{9\nu}{2R_0^2\rho_l} \left[\int_0^\eta \frac{\dot{S}_v}{\rho} d\eta' - 2f \right]. \end{aligned} \quad (4.10)$$

Y para la densidad del número de gotas se obtiene la siguiente expresión [68]

$$n = \frac{n_0 s_0 \eta'_{l0}}{\rho_0} \frac{\rho}{s \eta'_{l0}}. \quad (4.11)$$

De esta forma el sistema queda completamente cerrado donde los valores de referencia para su adimensionalización y las condiciones de contorno se presentan en la sección 4.2.

4.2. Valores de referencia, condiciones de contorno y condiciones iniciales

A continuación se presentan las condiciones de contorno para la fase gaseosa, y las condiciones iniciales para la fase líquida, para la configuración de flujos opuestos que se busca modelar.

4.2.1. Valores de referencia

Con el objetivo de independizarse del sistema de unidades, todas las ecuaciones presentadas en las secciones anteriores serán adimensionalizadas. Para esto se usan valores de referencia independiente para la fase gaseosa y la líquidas, los cuales son presentados en la tabla 4.1.

Tabla 4.1: Valores de referencia

Dimensión	Fase Gaseosa	Fase Líquida
Longitud	$\sqrt{\nu_0/a_0}$	R_0
Tiempo	$1/a_0$	R_0^2/α_l
Temperatura	T_0	T_{l0}
Presión	p_0	-
Masa	$\rho_0(\nu_0/a_0)^{1,5}$	$\frac{4}{3}\pi R_0^3 \rho_{l0}$

Donde el subíndice 0 se refiere a los valores de dichas propiedades en el lado por el cuál el combustible es inyectado, izquierdo.

4.2.2. Condiciones de contorno

Debido a que son usadas formulaciones Eulerianas para la fase gaseosa y Lagrangiana para la líquida, las condiciones necesarias para resolver el sistema son de distinta naturaleza, en el primer caso se requieren condiciones de contorno, mientras que para las gotas son necesarias condiciones iniciales para todas las propiedades, exceptuando la de temperatura, la cuál se resuelve para cada paso de tiempo de la gota, pero de manera Euleriana, donde la coordenada sobre la cual la temperatura se desarrolla es una coordenada radial interna de la gota, donde ς va desde el centro de la gota hasta el contorno de la misma, ec. (3.14). En primer lugar se especificarán las condiciones para la fase gaseosa, y luego las necesarias para la ecuación de energía de la gota.

Fase gaseosa

Dado que el sistema es unidimensional las condiciones de contorno son dos, una para la zona del spray y el aire, lado izquierdo, y otra para el de la inyección de

combustible gaseoso, lado derecho. El lado izquierdo para cada una de las coordenadas se denotará como

$$y = -\infty \quad \eta = -\infty \quad \xi = \xi_{-\infty}, \quad (4.12)$$

mientras que el lado opuesto se denota como

$$y = +\infty \quad \eta = +\infty \quad \xi = \xi_{+\infty}, \quad (4.13)$$

para la configuración que se estudia en este trabajo, se tiene que en el lado izquierdo, la fase gaseosa está originalmente compuesta únicamente por aire, mientras que en el extremo derecho se inyecta sólo combustible para asegurar la monotonicidad de la fracción de mezcla y , de esta manera, asegurar la resolución del sistema. Es por esto que

$$\xi_{-\infty} = 0 \quad y \quad \xi_{+\infty} = 1. \quad (4.14)$$

Ahora bien, para las ecuaciones de balance de energía (ecs. (3.4), (4.7) y (3.22)) y de especies químicas (ecs. (3.3), (4.6) y (3.21)), las condiciones de contorno son

$$-\infty : \quad T = T_{-\infty}, \quad Y_k = Y_{k,-\infty}, \quad (4.15)$$

y

$$+\infty : \quad T = T_{+\infty}, \quad Y_k = Y_{k,+\infty}. \quad (4.16)$$

Para las llamas estudiadas en este trabajo, las temperaturas de inyección a ambos extremos es de 300 K, mientras que las fracciones másicas de las especies químicas corresponden, como se mencionó anteriormente, en el lado de inyección de spray a aire puro, y en el otro extremo combustible, etanol. Para las ecuaciones de momentum (ecs. (3.2), (3.32) y (4.5)), a diferencia de las ecuaciones anteriores, las condiciones de contorno se establecen para variables diferentes, aunque relacionadas, u_r en el espacio físico, $df/d\xi$ en el de flamelet y $df/d\eta$ en el de similaridad, cabe mencionar que las últimas dos variables, las cuales se denotarán como f' , ya que son idénticas, para $df/d\xi$

se tiene

$$f(\xi) = \int_0^{\xi'} \frac{u_r}{r} d\xi' \rightarrow \frac{df}{d\xi} = \frac{u_r}{r}, \quad (4.17)$$

y para $df/d\eta$

$$f(\eta) = \int_0^{\eta'} \frac{u_r}{r} d\eta' \rightarrow \frac{df}{d\eta} = \frac{u_r}{r}. \quad (4.18)$$

Primero se definen las condiciones de contorno para ambas componentes de la velocidad, para esto, y como se usa una configuración a contraflujo, se sabe que el flujo externo a la zona de reacción es aproximadamente un flujo potencial. De acá se tiene que las condiciones de contorno son

$$-\infty : \quad u_y = -2a_{-\infty}y, \quad u_r = a_{-\infty}r, \quad (4.19)$$

$$+\infty : \quad u_y = -2a_{+\infty}y, \quad u_r = a_{+\infty}r, \quad (4.20)$$

y las condiciones para el gradiente de la función f son

$$-\infty : \quad f' = a_{-\infty}, \quad (4.21)$$

$$+\infty : \quad f' = a_{+\infty}, \quad (4.22)$$

los valores para el gradiente en el borde de inyección del spray varía dependiendo de la llama, 200/s, 300/s, 400/s y 500/s, mientras que para el otro extremo la condición en función del gradiente conocido se obtiene de igualar las presiones estáticas de ambos lados con el punto de estancamiento, despreciando la contribución de las gotas [68], obteniendo

$$a_{+\infty} = \sqrt{\frac{\rho_{-\infty}}{\rho_{+\infty}}} a_{-\infty} \Rightarrow f'_{+\infty} = \sqrt{\frac{\rho_{-\infty}}{\rho_{+\infty}}}, \quad (4.23)$$

donde la densidad del borde izquierdo corresponde a la densidad del aire y la del derecho es la del combustible. La velocidad del gas en el borde izquierdo es igual a 1 m/s.

Finalmente, para la ecuación del gradiente de la fracción de mezcla, en la ec. (3.25),

en el borde izquierdo se resuelve la ec. (3.12) evaluada en el mismo, quedando

$$\rho_0 u_{y,0} g_{\xi,0} = \left. \frac{d}{dy} (\rho D_{\xi} g_{\xi}) \right|_{\xi=0} + \dot{S}_{v,0} \quad (4.24)$$

y, para el derecho la condición de contorno es 0.

Fase líquida

Como se mencionó anteriormente para la gota, únicamente la ecuación de balance de energía requiere de condiciones de contorno. Para esto en el interior de la gota se emplea una condición de simetría

$$\left. \frac{\partial T}{\partial \varsigma} \right|_{\varsigma=0} = 0, \quad (4.25)$$

y desde el exterior al interior es transmitida por conducción

$$\left. \frac{\partial T}{\partial \varsigma} \right|_{\varsigma=R(t)} = \frac{\dot{q}}{4\pi R^2 \alpha_l \rho_l C_{pl}}, \quad (4.26)$$

donde C_{pl} es el calor específico de la gota, y el flujo de calor entre ambas fases se calcula como

$$B_T = (1 - B_M)^\phi - 1, \quad (4.27)$$

donde C_{pf} es el calor específico en el film y B_T el número de transferencia para la energía de Spalding

$$\dot{q} = \dot{m} \left(\frac{C_{pf}(T_\infty - T_s)}{B_T} - L \right), \quad (4.28)$$

donde B_M el número de transferencia para la masa de Spalding

$$\phi = \frac{C_{pl} \tilde{Sh}}{C_{pf} \tilde{NuLe}}, \quad (4.29)$$

donde Le es el número de Lewis y $\tilde{Nu}$ el número de Nusselt modificado

$$\tilde{Nu} = 2 + \frac{(1 + \text{RePr})^{1/3} [\max(1, \text{Re})]^{0,007} - 1}{(1 + B_T)^{0,7} \ln(B_T + 1)} B_T, \quad (4.30)$$

donde Pr es el número de Prandtl

$$L = L_{boil} \left(\frac{T_{crit} - T_s}{T_{crit} - T_{boil}} \right)^{0,38}, \quad (4.31)$$

y donde L_{boil} el calor latente en el punto de ebullición, y T_{crit} y T_{boil} son las temperaturas en el punto crítico y de ebullición respectivamente.

4.2.3. Condiciones iniciales

La temperatura con la que ingresan las gotas es, al igual que la fase gaseosa, de 300 K. El radio es de 10 μm , la posición axial corresponde al borde denotado como $-\infty$, la velocidad axial es la misma que la del gas. Para la transformación de similaridad, la velocidad, $(d\eta/dt)$, se obtiene usando la condición de contorno de la densidad, mientras que para el flamelet $(d\xi/dt)$ se usa el gradiente de la fracción de mezcla. Para la coordenada radial transformada, s , se tiene

$$\xi_{r0} = \frac{r_0}{u_{r0}} = \frac{r_0}{a_{-\infty_0} r_0} = \frac{1}{a_{-\infty}}, \quad (4.32)$$

mientras que para la velocidad en esta dirección tenemos

$$\left. \frac{d\xi_r}{dt} \right|_{t=0} = \left. \frac{dr}{dt} \right|_{t=0} \frac{1}{u_{r0}} + r_0 \frac{d}{dt} \left(\frac{1}{u_{r0}} \right) = \frac{u_{r0}}{u_{r0}} = 1. \quad (4.33)$$

Para la densidad del número de gotas, la condición inicial esta dada por,

$$n_0 = \frac{m_l}{M_l}, \quad (4.34)$$

donde m_l es la fracción de masa líquida por unidad de volumen y M_l es la masa de una gota. Notar que todas las condiciones, tanto de borde como de contorno, no han sido adimensionalizadas, para esto han de usarse los valores de referencia anteriormente presentados en la subsección (4.2.1).

En la figura 4.1 se presenta un esquema de la configuración de flujos opuestos usada

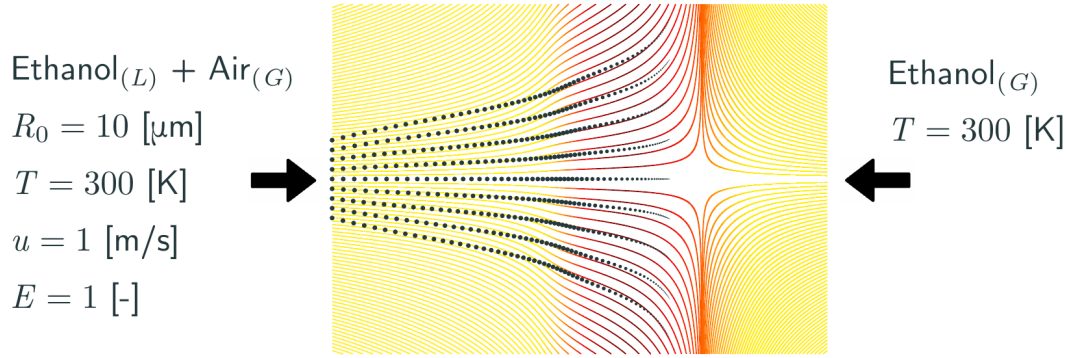


Figura 4.1: Esquema de llama de flujos opuestos

para las simulaciones, donde además se especifican los valores de las condiciones de contorno más relevantes.

4.3. Método de discretización

Para la discretización de ambos sistemas de ecuaciones (con transformación de similitud y de flamelet) el método de diferencias finitas es usado. La elección de este método se debe principalmente a su facilidad de implementación, esto a pesar de que requiera de mallas más finas que otros métodos. Gracias a la configuración usada (unidimensional) los tiempos de cálculo no son excesivos.

La idea principal del método consiste en escribir las ecuaciones diferenciales en un set de ecuaciones discretas. Dicho sistema se compone de una ecuación por cada elemento de la malla (más adelante se explicará en detalle la elección de esta). Para esto se usa la expansión en series de Taylor de la función ϕ evaluado en ξ alrededor de ξ_0 [71], la que se representa como

$$\phi(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \frac{d^n \phi(\xi_0)}{d\xi^n} (\xi - \xi_0)^n. \quad (4.35)$$

Para escribir las ecuaciones diferenciales continuas en ecuaciones discretas, se deben reescribir las derivadas tanto de primer como de segundo orden de manera discreta. Para esto existen varios esquemas, en particular para nuestro desarrollo se usarán diferencias centradas para las primeras y segundas derivadas. A continuación se muestra el desarrollo para la discretización de ambas derivadas. Primero se debe

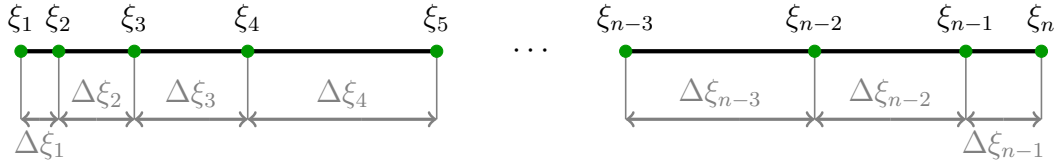


Figura 4.2: Esquema de una malla irregular unidimensional.

expandir la función ϕ alrededor de ξ_i en los puntos ξ_{i-1} y ξ_{i+1} . Para simplificar la notación de ahora en adelante se escribirá $\phi(\xi_i)$ como ϕ_i

$$\phi_{i-1} = \phi_i - (\xi_i - \xi_{i-1}) \left. \frac{d\phi}{d\xi} \right|_i + \frac{(\xi_i - \xi_{i-1})^2}{2} \left. \frac{d^2\phi}{d\xi^2} \right|_i + O(\xi_i - \xi_{i-1})^3, \quad (4.36)$$

$$\phi_{i+1} = \phi_i + (\xi_{i+1} - \xi_i) \left. \frac{d\phi}{d\xi} \right|_i + \frac{(\xi_{i+1} - \xi_i)^2}{2} \left. \frac{d^2\phi}{d\xi^2} \right|_i + O(\xi_{i+1} - \xi_i)^3, \quad (4.37)$$

donde $O(\Delta\xi)^3$ corresponden a los términos de orden 3 y superior. Para la primera derivada se deben restar ambas ecuaciones, despreciando los términos de orden 2 y superiores, los que al eliminar son los causantes del error del método, para luego despejar

$$\left. \frac{d\phi}{d\xi} \right|_i = \frac{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}}{\xi_{i+1} - \xi_{i-1}}, \quad (4.38)$$

y para la segunda derivada, estas ecuaciones, despreciando los términos de orden 3 y superiores, deben sumarse y luego despejar

$$\left. \frac{d^2\phi}{d\xi^2} \right|_i = \frac{2}{(\xi_i - \xi_{i-1})^2 + (\xi_{i+1} - \xi_i)^2} \left[\phi_{i-1} - 2\phi_i + \phi_{i+1} - \left. \frac{d\phi}{d\xi} \right|_i (\xi_{i-1} - 2\xi_i + \xi_{i+1}) \right], \quad (4.39)$$

donde la primera derivada puede ser reemplazada utilizando la ec. (4.38). Esta expresión es distinta a la que suele encontrarse habitualmente en la literatura, con un término extra debido a que la malla usada no es regular.

Para la elaboración de la malla se opta por la utilización de un espaciado irregular por motivos que se detallarán en la sección 6.2. En la fig. 4.2 se muestra una representación de la malla a usar.

4.4. Algoritmo de resolución

En general, cualquiera de las ecuaciones que se desea resolver puede ser escrita como

$$\alpha \frac{d^2 \phi}{d\xi^2} + \beta \frac{d\phi}{d\xi} + \gamma \phi + \delta = 0. \quad (4.40)$$

Si a esta ecuación se le aplican las discretizaciones presentadas en la sección anterior, y reescribiendo los coeficientes, se tiene

$$a_i \phi_{i-1} + b_i \phi_i + c_i \phi_{i+1} = d_i \quad ; \quad i = 2, N-1, \quad (4.41)$$

Los puntos 1 y N son las condiciones de contorno, y, dependiendo del tipo que sean (Dirichlet o Robin), su ecuación puede variar levemente. En el caso de las condiciones de Dirichlet, los coeficientes quedan

$$a_i = 0, \quad b_i = 1, \quad c_i = 0, \quad d_i = \phi_i \quad ; \quad i = 1, N, \quad (4.42)$$

donde, ϕ_i es la condición de borde. Para la única condición de Robin (ec. (4.24)) la derivada se discretiza con una diferencia adelantada. Representado la ecuación como $\beta \phi_1 + \alpha \phi \frac{d\phi}{d\xi} \Big|_1 + \phi^2 \frac{d\alpha}{d\xi} \Big|_1 = q_1$, los coeficientes quedan

$$a_1 = 0, \quad b_1 = \beta_1 + \phi_1 \frac{\alpha_2 - 2\alpha_1}{\xi_2 - \xi_1}, \quad c_i = \phi_1 \frac{\alpha_1}{\xi_2 - \xi_1}, \quad d_i = q_1. \quad (4.43)$$

Una vez descrito el sistema de forma discreta, su matriz tiene forma tridiagonal.

$$\begin{pmatrix} b_1 & c_1 & 0 & & \cdots & 0 \\ a_2 & b_2 & c_2 & 0 & & \vdots \\ 0 & a_3 & b_3 & c_3 & & \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\ 0 & \cdots & & 0 & a_n & b_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \phi_3 \\ \vdots \\ \phi_{n-1} \\ \phi_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ d_3 \\ \vdots \\ d_{n-1} \\ d_n \end{pmatrix}. \quad (4.44)$$

Entonces, para poder resolverlo se hace uso del algoritmo para matrices tridiagonal o algoritmo de Thomas [71]. Para esto se pueden arreglar la ec. (4.41), para $i = 2$

teniendo

$$\phi_2 = \frac{d_2 - a_2\phi_1}{b_2} - \frac{c_2}{b_2}\phi_3. \quad (4.45)$$

Definiendo dos nuevas variables

$$A_2 = \frac{d_2 - a_2\phi_1}{b_2} \quad (4.46)$$

y

$$B_2 = \frac{c_2}{b_2}, \quad (4.47)$$

la ec. (4.45) puede ser reescrita como

$$\phi_2 = A_2 - B_2\phi_3. \quad (4.48)$$

Haciendo lo propio para $i = 3$

$$\phi_3 = \frac{d_3 - a_3\phi_2}{b_3} - \frac{c_3}{b_3}\phi_4. \quad (4.49)$$

Reemplazando la ec. (4.48) en la ec. (4.49) se tiene

$$\phi_3 = \frac{d_3 - a_3A_2}{b_3 + a_3B_2} - \frac{c_3}{b_3 + a_3B_2}\phi_4. \quad (4.50)$$

Este desarrollo se puede replicar para los siguientes puntos, y, definiendo las siguientes variables

$$A_i = \frac{d_i - a_iA_{i-1}}{b_i + a_iB_{i-1}}, \quad (4.51)$$

$$B_i = \frac{c_i}{b_i + a_iB_{i-1}}, \quad (4.52)$$

la ecuación general para la resolución del sistema tridiagonal, partiendo la condición de contorno ϕ_N , es

$$\phi_i = A_i - B_i\phi_{i+1}. \quad (4.53)$$

A continuación se detalla el algoritmo del sistema completo para las ecuaciones en flamelet. En primer lugar se parte con una solución inicial para el sistema, la elección de esta afecta tanto el tiempo de calculo como la estabilidad de la simulación. Con esta solución se calculan las ecuaciones lagrangianas de la fase líquida para poder obtener las fuentes de masa, momentum y energía necesarias para la fase gaseosa. Después se resuelven de forma iterativa las ecuaciones de momentum (f') y la del gradiente de la fracción de mezcla (g_i). Esto implica que con la solución inicial se resuelven los sistemas discretos para cada ecuación, se compara la nueva solución con la anterior y se compara el error hasta que el este es menor a una tolerancia previamente establecida

$$\sum_{i=1}^N (\phi_i^{t+\Delta t} - \phi_i^t) < e_{max}. \quad (4.54)$$

Por último, se resuelven las ecuaciones para las especies químicas y energía, y se compara la solución de la ecuación de energía nueva con la anterior. Si el error es mayor a la tolerancia, todos los perfiles obtenidos (f' , g_ξ , Y_k , T) pasan a ser la nueva solución inicial y todas las variables se calculan nuevamente hasta lograr la convergencia del sistema. Todo el algoritmo de resolución está representado en la figura 4.3

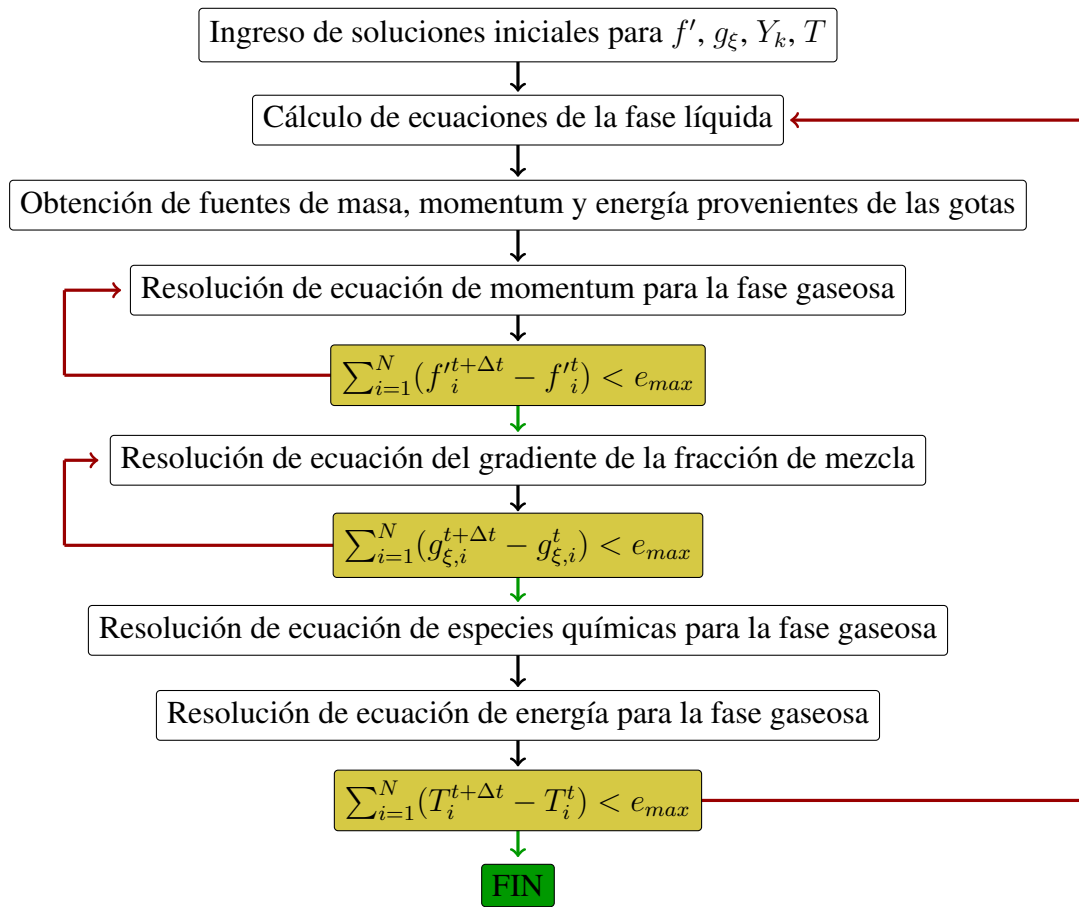


Figura 4.3: Esquema del algoritmo para la resolución de las ecuaciones de flamelet, las flechas verdes indican cumplimiento de la condición y las rojas el no cumplimiento de estas.

Capítulo 5

Marco de validación

Con el objetivo de validar el modelo de flamelet presentado en el capítulo 3, se usarán simulaciones en el espacio de similaridad (sistema presentado en la sección 4.1). Estos resultados se referenciarán con el subíndice S , y representan el valor más exacto posible que se puede obtener con el modelo de flamelet.

Para la validación se usarán 4 llamas. La llama base A está compuesta por un spray de gotas de $10\text{ }\mu\text{m}$ transportadas por un flujo de aire en el lado izquierdo. Por el lado derecho se inyecta un flujo de combustible puro. Esto, para asegurar la monotonicidad en la fracción de mezcla. La llama base tiene un strain rate de 100 1/s , parámetro que se variará de 100 en 100 para las siguientes 3 llamas (tabla 5.1). El resto de las condiciones de contorno e iniciales se presentaron en la sección 4.2.

Tabla 5.1: Llamas a simular

Flame	$a_{-\infty}[\text{1/s}]$
A	200
B	300
C	400
D	500

El strain rate máximo usado fue elegido debido a que este, 500 1/s , está cerca del valor de extinción, 627 1/s .

Para la validación se usarán 3 sets de ecuaciones, F_1 , F_2 y F_3 . Las ecuaciones que se resuelven en todos los sets son las ecuaciones de especies químicas, ec. (3.21), las de balance de energía, ec. (3.22), y la de g_ξ ec. (3.25).

- Para el set F_1 , además se resuelve la ecuación de f' , ec. (3.32), mientras que las fuentes de evaporación se proyectan desde el espacio físico, obtenidas con el set S . De esta manera el modelo de clausura para $\hat{a}$ es probado.
- Para F_2 , las fuentes de evaporación son calculadas con las ecuaciones presentadas en la sección 3.2.2, mientras que el perfil de f' es proyectado desde el espacio físico. En este caso el modelo de clausura para la fase líquida es evaluado.
- Finalmente, para el set F_3 , se resuelve tanto la ecuación para f' como las de la fase líquida, y así poder estudiar el modelo completo.

Capítulo 6

Resultados y discusión

En este capítulo se analizan las estructuras obtenidas con los sets de ecuaciones F_1 , F_2 y F_3 , los que se comparan con los obtenidos con el set de referencia S . En una segunda parte se presentan las limitaciones del modelo debido a problemas de carácter numérico. A su vez se postula un modelo simplificado que se espera pueda solventar dichos problemas en miras a la generación de librerías y la simulación de llamas turbulentas. Todo esto para finalmente mencionar los desafíos que quedan pendientes.

6.1. Evaluación de los modelos de clausura

En la fig. 6.1 se aprecia como para todas las llamas estudiadas, la resolución del set F_1 lleva a una buena predicción. Estos buenos resultados se ven trasladados de igual forma al perfil de $\hat{a}$ en la fig. 6.2 y en especial al de g_ξ en la fig. 6.3. Este último es principalmente importante debido a que es el término presente en las ecuaciones de flamelet, pudiendo en última instancia afectar a las estructuras. El único perfil que presenta una diferencia levemente mayor es el de $\hat{a}$ para la llama D en la zona donde la gota termina de evaporarse completamente. Aún así no afecta el perfil de g_ξ . Se puede concluir entonces que el set F_1 es un modelo de clausura adecuado.

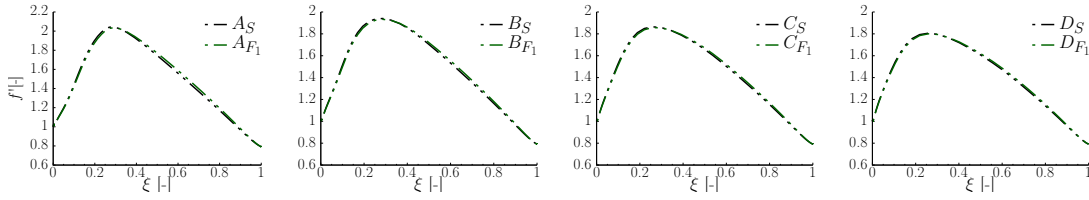
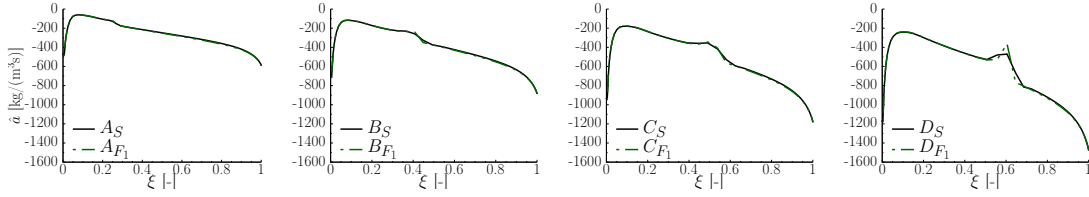
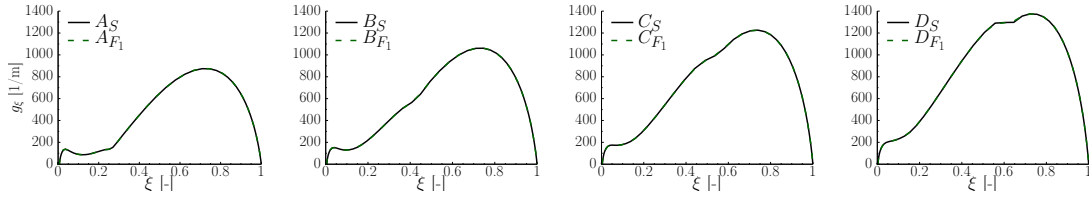
Figura 6.1: Perfiles de f' .Figura 6.2: Perfiles de $\hat{a}$.

Figura 6.3: Perfiles del gradiente de la fracción de mezcla.

En la fig. 6.4, se muestra que usando el set F_2 se obtienen buenas predicciones para todas las llamas a baja fracción de mezcla. Sin embargo, a medida que aumenta ξ , la predicción va empeorando, especialmente en la región cuando la evaporación se completa. Específicamente, se pueden distinguir dos tipos de diferencias entre los resultados obtenidos con F_2 y S . La primera es una diferencia en el valor máximo de los perfiles, la que se puede apreciar más claramente en las llamas C y D. Esto es un problema conocido, el cual es presentado por Archambault [72], y no está directamente asociado al modelo que se emplea para simular las gotas, sino que es una consecuencia del acoplamiento entre el modelo Lagrangiano utilizado para la fase líquida con su contraparte Euleriana para la fase gaseosa. En particular, está relacionado con la malla y la sensibilidad de las fuentes de evaporación a esta: las fuentes de masa, momentum y energía son calculadas por unidad de volumen y el valor de estas es dependiente del tamaño de la celda.

La segunda diferencia es un leve desplazamiento de la curva hacia la izquierda, lo cual se puede explicar con la ayuda de la fig. 6.5. En esta se aprecia que a medida que la gota se va evaporando, F_2 predice una evaporación levemente acelerada. Esto

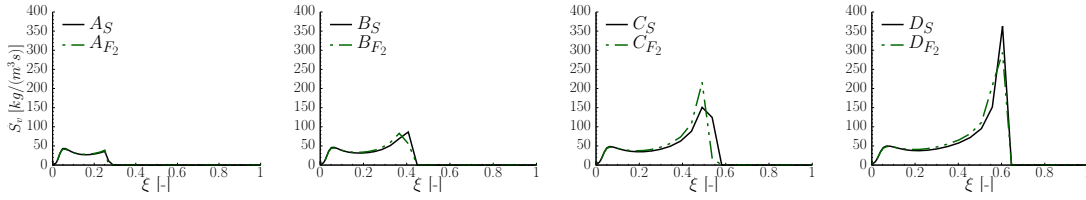


Figura 6.4: Perfiles de fuente de masa para las llamas.

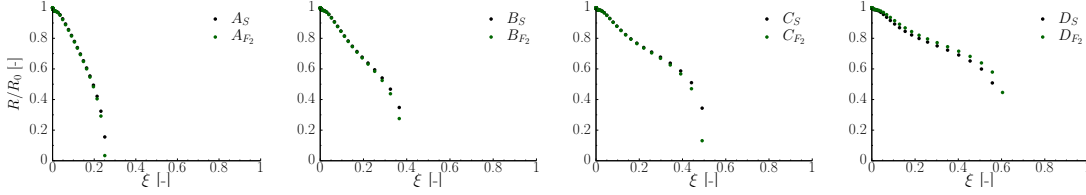


Figura 6.5: Radio de la gota.

se traduce en una mayor disminución del radio de la gota en comparación a S . Este fenómeno se acentúa en llamas en las cuales la evaporación termina de ocurrir en zonas medias del espacio de fracción de mezcla. Para entender por qué sucede esto, se analiza el perfil de la velocidad de la gota, fig. 6.6.

En la fig. 6.6 se puede apreciar que la velocidad se encuentra sobrepredecida en la zona cercana a la inyección y subpredecida a medida que esta se va alejando. Este comportamiento en la velocidad de la gota es producido por la naturaleza propia de la transformación de flamelet. En las zonas exteriores a la zona de combustión, se sabe que el flujo es aproximadamente potencial, y aquí casi no ocurre evaporación, por lo tanto la fracción de mezcla varía muy levemente. Esto implica que el modelo de flamelet no capta el flujo potencial que puede ser mayor o menor dependiendo de las condiciones de contorno en particular. Y es precisamente en esta zona donde la gota experimenta una mayor desaceleración, como se ve en las soluciones de S . El que la velocidad de la gota posea una mayor velocidad, en esta primera zona, implica que la fuerza de arrastre (que actúa a favor del movimiento de la gota) sea menor, por lo que su aceleración por consiguiente también será menor, y la velocidad máxima no será tan alta. Esto produce que la penetración de la gota sea menor, explicando así lo ocurrido en la fig. 6.5.

La fig. 6.7 muestra que F_2 reproduce de muy buena manera la fuente de momentum, $\dot{S}_m/r$, a pesar de que nuevamente las mayores diferencias en las zonas donde esta tiene sus menores valores (máximos absolutos), este punto es atribuible al problema de malla, y ocurre de forma más pronunciada en las llamas con un gradiente de velocidad mayor.

Finalmente, se tiene la fuente de energía. Para ella, como se ve en la fig. 6.8,

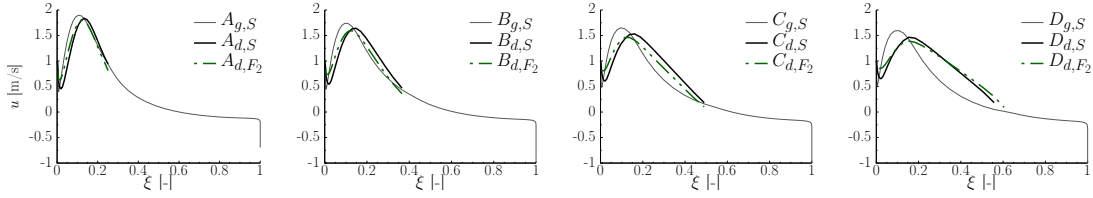


Figura 6.6: Perfiles de velocidad de la gota (d) y el gas (g).

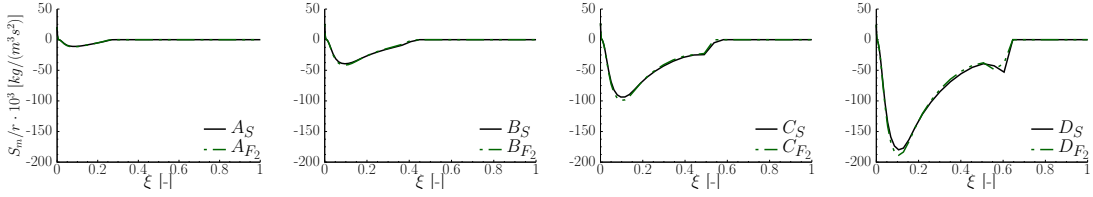


Figura 6.7: Perfiles de fuente de momentum.

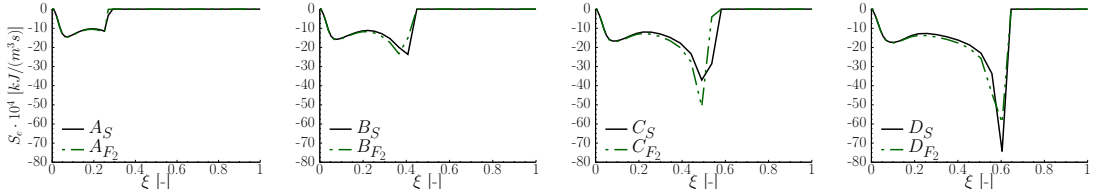


Figura 6.8: Perfiles de fuente de energía para las llamas.

otra vez se aprecia el efecto de la malla. Además se puede observar que para las llamas B y en especial la C, se tiene una mayor transferencia de calor desde la fase gaseosa a la líquida con F_2 en comparación con S . Si se observa la fig. 6.9, cabría esperar que la transferencia de calor desde la fase gaseosa a la líquida sea menor (debido a la menor diferencia de temperatura entre ambas fases). Pero como se puede apreciar en el ec. (3.9), la fuente de energía no depende únicamente de la diferencia de temperatura, sino que también lo hace de la cantidad de masa evaporada, $\dot{m}$. Y como se explicó anteriormente, el set F_2 predice una evaporación acelerada. Por lo que aunque la diferencia de temperatura entre ambas fases sea menor, el aumento en la cantidad de masa evaporada es la causante de la mayor transferencia de energía total desde el gas al líquido.

A pesar de que los perfiles de evaporación obtenidos con el set F_2 puedan presentar diferencias a los obtenidos con S , esto no se traduce en el perfil de g_ξ , fig. 6.10, prediciéndolo perfectamente. Por esto se puede concluir que F_2 también es adecuado.

Finalmente se prueba el set F_3 (set que corresponde al modelo completo, con el cierre para $\hat{a}$ y las fuentes de evaporación) en términos de las estructuras de la llama.

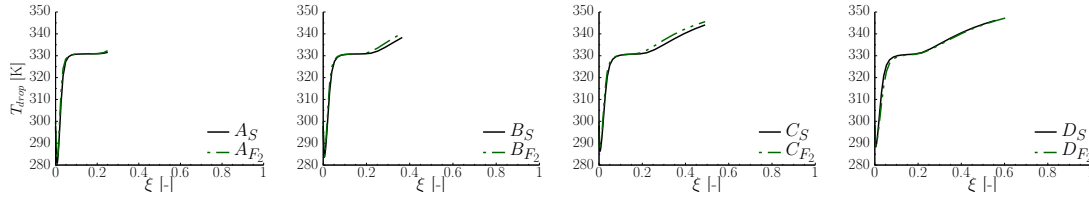


Figura 6.9: Perfiles de temperatura en la superficie de la gota.

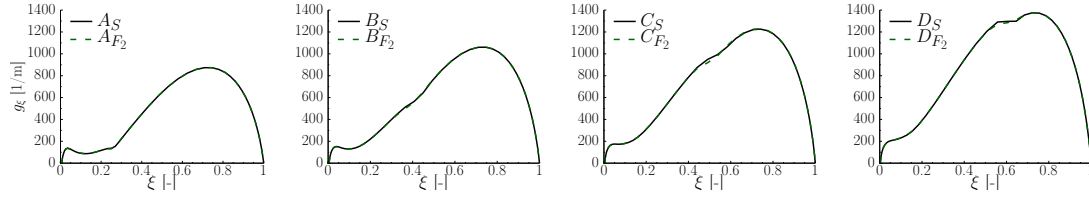


Figura 6.10: Perfiles del gradiente de la fracción de mezcla.

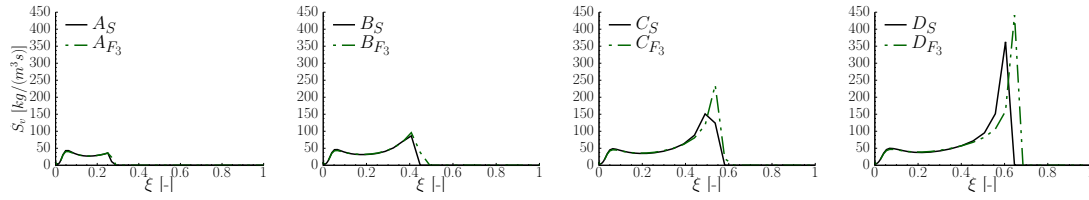


Figura 6.11: Perfiles de fuente de masa.

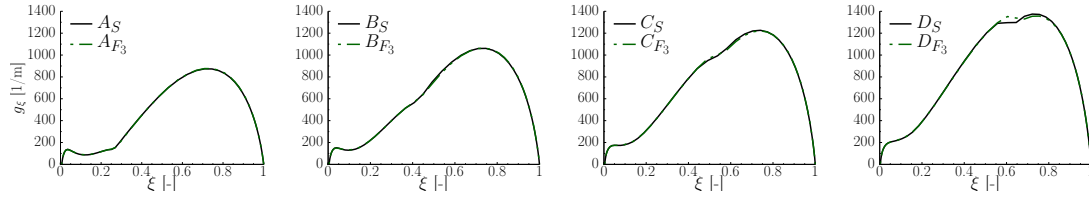


Figura 6.12: Perfiles del gradiente de la fracción de mezcla.

El desempeño del set F_3 también es bueno (a pesar de que persisten los problemas en la evaporación, los que se manifiestan muy levemente en g_ξ). Tanto en los perfiles de C_2H_2 (fig. 6.14) como en el de CO_2 (fig. 6.13) se llega a buenos resultados. A parte de esto perfiles se evaluaron perfiles de temperatura y otras especies químicas, obteniendo perfiles igualmente buenos.

6.1.1. Análisis del comportamiento de la gota

En esta sección se estudia el comportamiento de la gota en función del tiempo, obtenido con los sets S y F_3 .

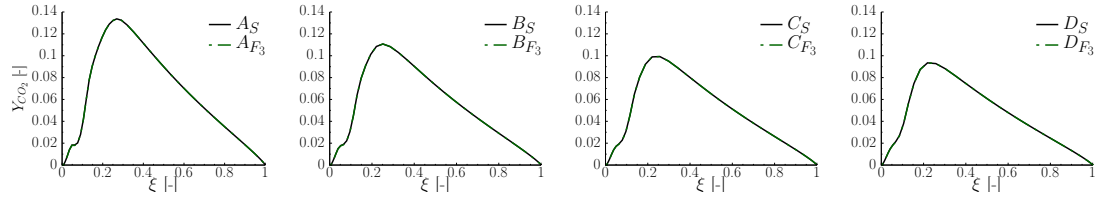


Figura 6.13: Perfiles de fracción másica de CO_2 del gas.

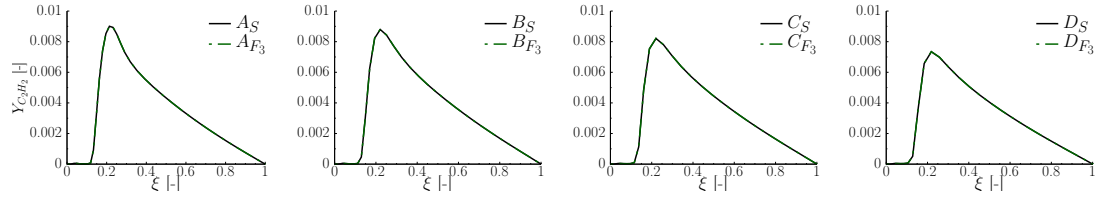


Figura 6.14: Perfiles de fracción másica de C_2H_2 del gas.

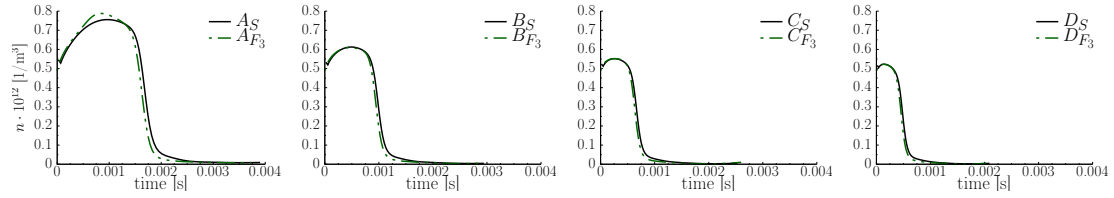


Figura 6.15: Densidad del número de gotas.

En la fig. 6.15 se muestra la densidad del número de gotas para cada llama, y los resultados obtenidos con F_3 son prácticamente iguales a los conseguidos con S . Se puede apreciar como la densidad es considerablemente mayor en las gotas con un strain rate mayor, fenómeno que se explicará con más detalle cuando se analicen los perfiles de velocidad en el espacio de flamelet.

En la fig. 6.16 se muestran las temperaturas en la superficie de la gota para cada llama. En la primera milésima de segundo la gota disminuye su temperatura, para luego aumentarla debido al intercambio de energía con la fase gaseosa. Esta última aumenta radicalmente desde el punto de inyección llegando a temperatura cercanas a los 2000 K. De cualquier modo, el aumento de temperatura de la gota no puede ser tan grande como el de la fase gaseosa ya que el combustible estabiliza su temperatura cuando esta alcanza su punto de ebullición. La disminución en la primera parte del perfil de temperatura de la gota se puede explicar con el modelo de evaporación. Ya que el flujo de calor no depende sólo de la diferencia de temperatura entre las fases, sino que además del calor latente de vaporización, como se puede ver en la ec. (6.1). Este valor únicamente es 0 cuando la temperatura en la superficie de la gota es igual a la

temperatura crítica del combustible (ec. (6.2)), para el etanol esta es 513,9 K. Por lo que en la primera zona, donde la diferencia de temperatura entre ambas fases es nula o muy pequeña, el flujo de calor será negativo, o sea, la gota experimenta una pérdida de calor, reduciendo su temperatura.

$$\dot{q} = \dot{m} \left(\frac{C_{pf}(T_{\infty} - T_s)}{B_T} - L \right) \quad (6.1)$$

$$L = L_{boil} \left(\frac{T_{crit} - T_s}{T_{crit} - T_{boil}} \right)^{0,38} \quad (6.2)$$

En la fig. 6.17 se aprecia como en las primeras llamas la gota permanece un mayor tiempo en zonas con $\xi < 0,001$. En estos gráficos también se puede ver que el tiempo de salida de la gota de esta primera zona está íntimamente ligado a la evaporación de la misma. Esto ya que a medida que la gota se evapora, aumenta la concentración de combustible en la fase gaseosa, por lo que el valor de la fracción de mezcla localmente aumenta. A medida que el gradiente de velocidad es mayor, existe un acortamiento de la zona de reacción en el espacio físico, permitiendo una penetración mayor de la gota, aún cuando su tiempo de vida sea menor.

Como en las llamas A y B, se tiene un gradiente de velocidad menor, la velocidad de las gotas es considerablemente más pequeña que la presente en las llamas C y D, esto se puede ver claramente en la fig. 6.18, en donde si bien todas las gotas tienen la

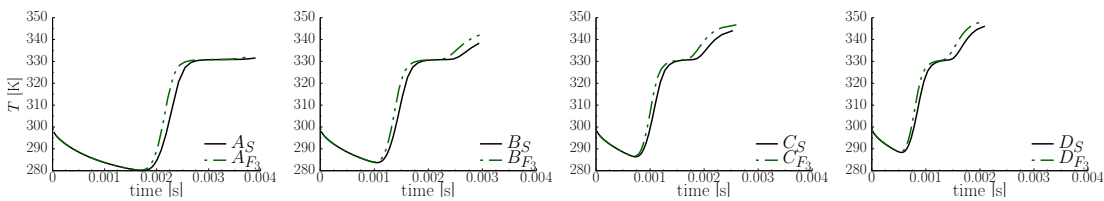


Figura 6.16: Temperatura de la gota (superficie) sobre el tiempo.

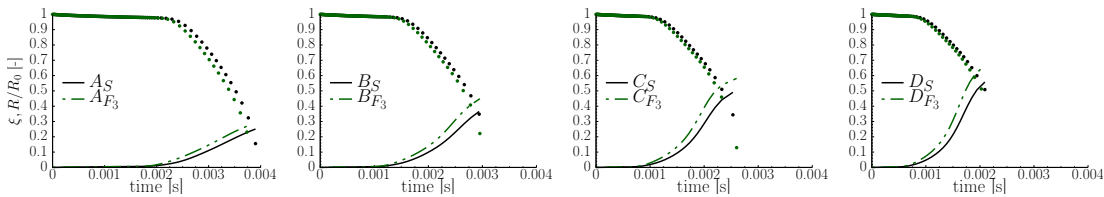


Figura 6.17: Radio de la gota (puntos) y su posición en el espacio de fracción de mezcla (líneas segmentadas).

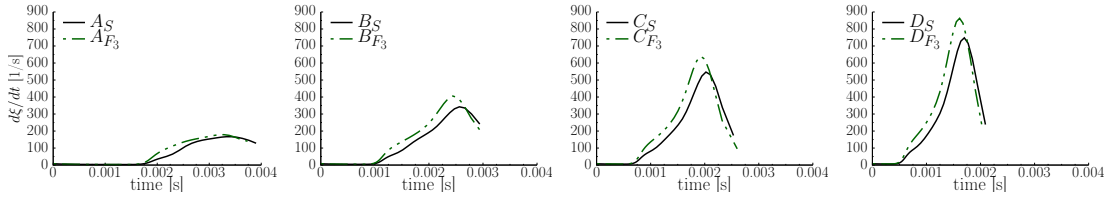


Figura 6.18: Velocidad en el espacio de fracción de mezcla sobre el tiempo.

misma velocidad de inyección (1 m/s), al poco tiempo de iniciada esta, en las llamas C y D, estas ya empiezan a acelerar, mientras que en las otras llamas esto se demora más. Por ejemplo en la llama B las gotas tardan hasta 3 veces más en iniciar este proceso de aceleración.

El que las gotas localmente aceleren o desaceleren localmente influye directamente en la densidad del número de estas. Si las gotas desaceleran implica que habrá una mayor concentración de estas. Esto ocurre porque al tener una velocidad local menor a la de inyección, por unidad de volumen entran más gotas de las que salen, por lo que hay acumulación, y esto es justamente lo que ocurre en la primera zona, como se puede ver en la fig., 6.18, donde primero existe una leve disminución de la velocidad para luego acelerar. Esta desaceleración no ocurre tan fuertemente en las llamas de alto gradiente de velocidad, por lo que el aumento del número de gotas ocurre en un lapso extremadamente corto de tiempo. Por el contrario, a medida que la gota acelera la concentración disminuye, ya que en esta zona el número de gotas que salen es mayor al número que entra.

Si bien existen ciertas diferencias entre los sets de ecuaciones S y F_3 en términos de los perfiles de evaporación esto no afectan las estructuras de los perfiles gaseosos, los que son de interés para la generación de las librerías.

6.2. Limitaciones y simplificaciones del modelo

En esta sección se van a presentar las limitaciones y problemas que presenta el modelo desarrollado, además de proponer una solución, teniendo en cuenta su potencial uso para la generación de librerías de flamelet.

El modelo presenta limitaciones a nivel numérico cuando la gota circula por zonas donde g_ξ tiene valores cercanos a 0. Naturalmente, el perfil de g_ξ es cercano a 0 (o exactamente 0) en los extremos, lo que genera problemas en el lado de izquierdo de la llama (por donde la gota necesariamente tiene que circular), como los presentados en la

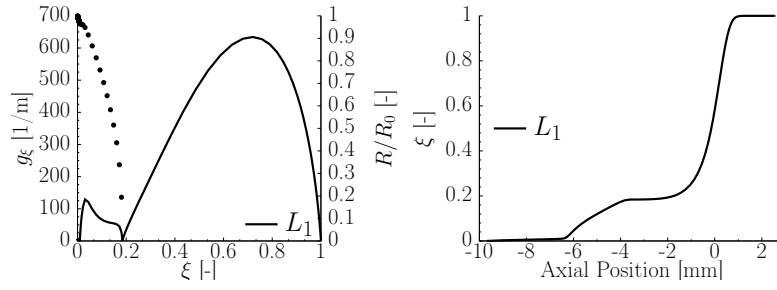


Figura 6.19: A la izquierda el gradiente de la fracción de mezcla y el radio de la gota en el espacio de flamelet, y a la derecha la fracción de mezcla en el espacio físico.

sección anterior. Para no perder información, es necesaria la implementación de mallas más finas en estas zonas, lo que aumenta el costo computacional.

En general existen otros 2 casos donde complicaciones similares se presentan. El primero cuando existen zonas de g_ξ cercano a 0 en el centro de la llama (por donde la gota tiene que circular), y cuando la gota logra atravesar toda la llama hasta llegar al otro extremo (lado derecho), zona donde g_ξ es exactamente 0. Para ilustrar estos se hará uso de 2 nuevas llamas. La llama L_1 es idéntica a las utilizadas en la sección anterior, pero con un strain rate inferior, 100 1/s. La llama L_2 , tendrá los mismos parámetros que L_1 , pero con un radio inicial de gota mayor, y una velocidad inicial menor. En esta última la gota llega al lado derecho debido a su mayor momentum inicial.

Tabla 6.1: Llamas a simular

Flame	$R_0[\mu\text{m}]$	$u_{y,0}[\text{m/s}]$	$m_d u_y _0 [\text{kg}\cdot\text{m/s}]$
L_1	10	1	3.4×10^{-12}
L_2	35	0.75	1.1×10^{-10}

En la llama L_1 existe una zona de $g_\xi \approx 0$ dentro de la estructura del flamelet, en una posición cercana a $\xi = 0,18$ (fig. 6.19). La mayor implicancia de esto es que, debido a la transformación de flamelet, se genera un efecto de compresión espacial. Es decir que un pequeño $\Delta\xi$ contiene la información de una gran extensión de espacio físico. Esto se ve claramente representado en la gráfica de la derecha de la fig. 6.19, donde casi un tercio del espacio donde se desarrolla la llama posee aproximadamente el mismo valor de ξ .

Esta situación es especialmente problemática cuando se agrega el modelo de evaporación en el espacio de flamelet, donde ni el set F_2 , ni el F_3 convergen. Esta no convergencia es atribuible a que la velocidad de la gota en espacio de flamelet ($d\xi/dt$)

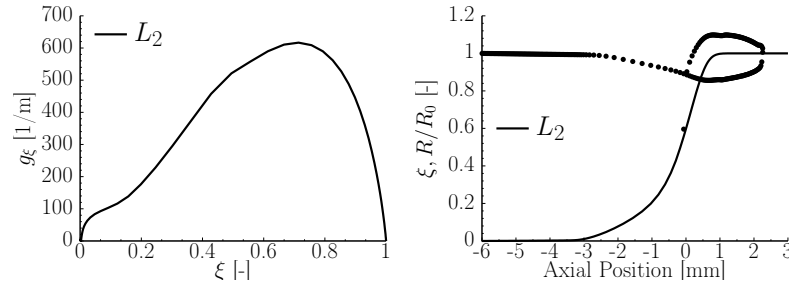


Figura 6.20: A la izquierda el gradiente de la fracción de mezcla en el espacio de flamelet, y a la derecha la fracción de mezcla y el radio de la gota en el espacio físico.

depende directamente del valor de g_ξ . Si el gradiente de la fracción de mezcla tiene valores cercanos a 0, igualmente lo tendrá la velocidad en el espacio de flamelet, ya que

$$\frac{d\xi}{dt} = \frac{d\xi}{dy} \frac{dy}{dt} = g_\xi \frac{dy}{dt}. \quad (6.3)$$

Esto provoca una evaporación concentrada en este punto, lo que en el espacio físico no ocurre, donde existe una evaporación distribuida.

La segunda situación de conflicto está ejemplificada con la llama L_2 , en donde la gota pasa a través del plano de estancamiento, y llega hasta la zona de flujo potencial del lado derecho. Esto debido a que la gota tiene más masa, y por ende un momento mayor. Como se ve en la fig. 6.20, la gota avanza hasta llegar a la zona donde la fracción de mezcla es 1.

El problema radica en que para una mismo valor de ξ , en este caso 1, la gota cambia considerablemente su radio. Primero, al estar evaporándose, esta disminuye su radio, pero a medida que se acerca a la zona de $\xi = 1$, la concentración de combustible es mayor. Es por esto que el combustible empieza a condensarse, haciendo que el radio de la gota aumente. Cuando esta cambia el sentido de su velocidad, sale de la zona de inyección de combustible gaseoso, llegando a zonas de menor concentración de este y de mayor temperatura, comenzando nuevamente el proceso de evaporación. Es importante mencionar, que tal y como presentaron Olguin et al. [73], el modelo de Clausius-Clapeyron bajo ciertas condiciones lleva a temperaturas de la gota por sobre la de ebullición, pudiendo ocasionar una sobrepredicción en la condensación del combustible.

Gran parte de la descripción de este proceso es imposible de capturar en el flamelet, ya que ocurre en un solo punto, $\xi = 1$, perdiendo información importante. Igual a lo ocurrido en la llama L_1 , esta no llega a converger para los sets F_2 y F_3 .

6.2.1. Marco de validación

Con el fin de evitar los problemas numéricos explicados anteriormente, y en miras de la generación de librerías, en esta sección se propone una simplificación del modelo presentado en esta tesis. Este consiste en suponer que la velocidad de las gotas es la misma que la del gas, lo que matemáticamente se traduce como

$$u_{d,y} = \frac{1}{\rho} \left[\int_0^{\xi'} \frac{\dot{S}_v - 2\rho f'}{g_\xi} d\xi' + (\rho u_y)_{\xi=0} \right] \quad (6.4)$$

y

$$u_{d,r} = f' s u_{r,0}, \quad (6.5)$$

por lo que no se hace necesaria la ecuación de la dinámica de gota, ec. (3.17). Esta idea en principio soluciona el problema debido a que al no requerir calcular la velocidad de la gota, esta no se verá afectada por los bajos valores de g_ξ . Además de que la gota nunca podrá llegar a la zona de flujo potencial del lado derecho.

Para estudiar el modelo simplificado se realizarán 2 análisis paramétricos. El primero variando el strain rate (que es como normalmente se llena el espacio de flamelet), y el segundo modificando el radio de la gota. El objetivo del primero es establecer una comparativa entre S , F_3 , y el nuevo set de flamelet simplificado (F_4). Para esto se hará uso de un set de llamas similar al empleado en la sección anterior, donde en esta ocasión la llama base tiene un strain rate de 100 1/s y se aumenta de 100 en 100 hasta 600 1/s (tabla 6.2).

Tabla 6.2: Llamas a simular

Flame	$a_{-\infty}$ [1/s]
α_1	100
α_2	200
α_3	300
α_4	400
α_5	500
α_6	600

En la llama α_1 no hay convergencia del set F_3 , por lo que solo se mostrarán los sets S y F_4 .

El segundo análisis se realiza, ya que cabría esperar que la simplificación perdiera

validez para radios de gota mayores. Esto porque gotas más grandes poseen mayor momentum, por lo que su tendencia a seguir el flujo debería ser menor. Se estudiarán 4 casos, todos con un strain rate de $100/s$, y variando el radio inicial de la gota, como se muestra en la tabla 6.3.

Tabla 6.3: Llamas a simular

Flame	$R_0[\mu\text{m}]$
β_1	10
β_2	15
β_3	20
β_4	25

Influencia del strain rate

En la fig. 6.21 se puede apreciar que para bajos strain rate, la gota alcanza una penetración levemente mayor, llegando a la llama α_3 donde los perfiles de radio de la gota son casi idénticos. Para las llamas de más alto strain rate, α_4 , α_5 y α_6 , los perfiles obtenidos con F_4 son casi los mismos entre si, debido a que la gota llega al plano de estancamiento, y dado que en esta zona la velocidad es 0, la gota no se puede mover de ahí, evaporándose completamente.

Como cabría esperar, a medida que aumenta el strain rate esta suposición no es capaz de predecir correctamente la estructura de la llama, ya que como se explicó, es imposible que con esta suposición se logren altas penetraciones, porque la gota no

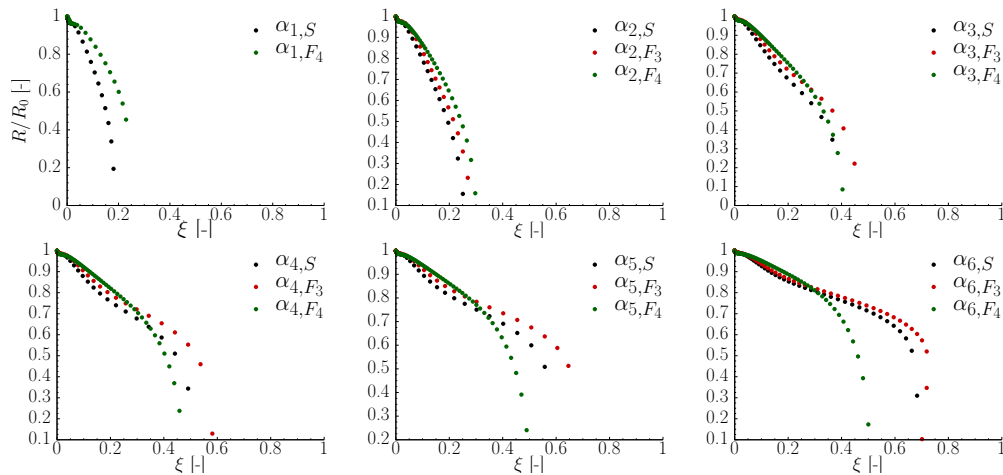


Figura 6.21: Radios de la gotas.

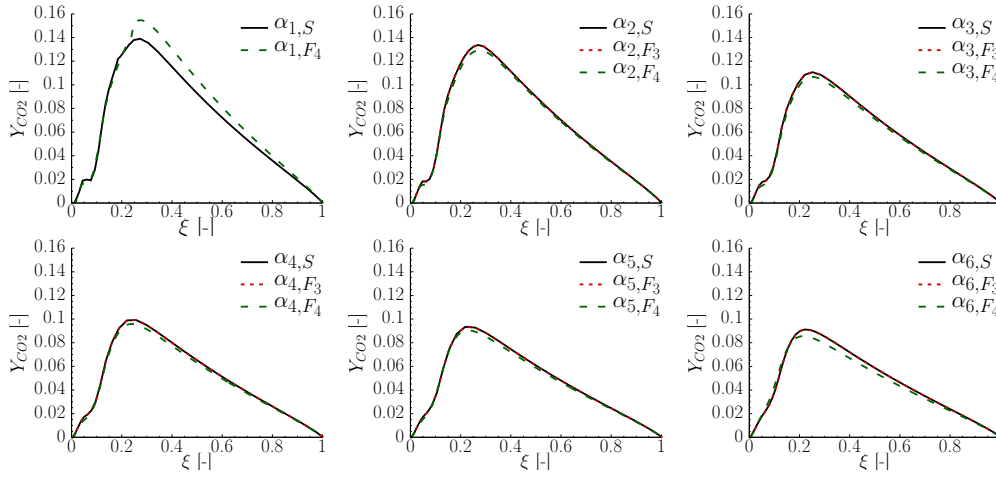


Figura 6.22: Perfiles de fracción másica de CO_2 del gas.

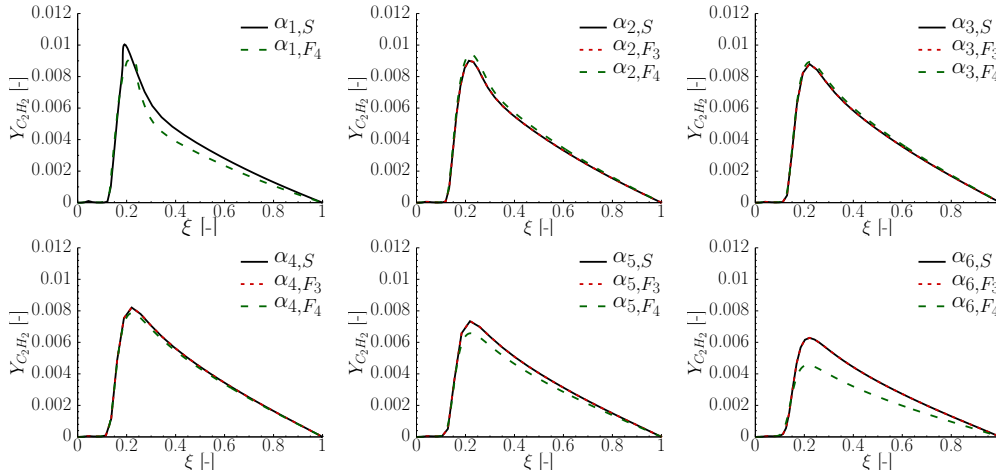


Figura 6.23: Perfiles de fracción másica de C_2H_2 del gas.

puede atravesar el plano de estancamiento, teniendo menores contracciones de todas las especies analizadas (figs 6.22 y 6.23).

La otra llama que no se predice tan bien es la α_1 , donde se predice una mayor penetración que la que ocurre calculando de velocidad de la gota directamente, esto se puede ver en las figs. 6.22 y 6.23. Para la llama α_1 se aprecia una sobrestimación del CO_2 , mientras que para las otras 5 una subpredicción. A pesar de estos errores, en general tanto cualitativa como cuantitativamente los perfiles de las especies químicas obtenidos con esta simplificación son razonablemente buenas incluso para el escenarios más adverso. En el caso de la temperatura (fig. 6.24), en general los resultados obtenidos son muy buenos, a excepción de la llama α_6 donde la temperatura es levemente menor, todo esto por el mismo efecto ya mencionado, menos penetración

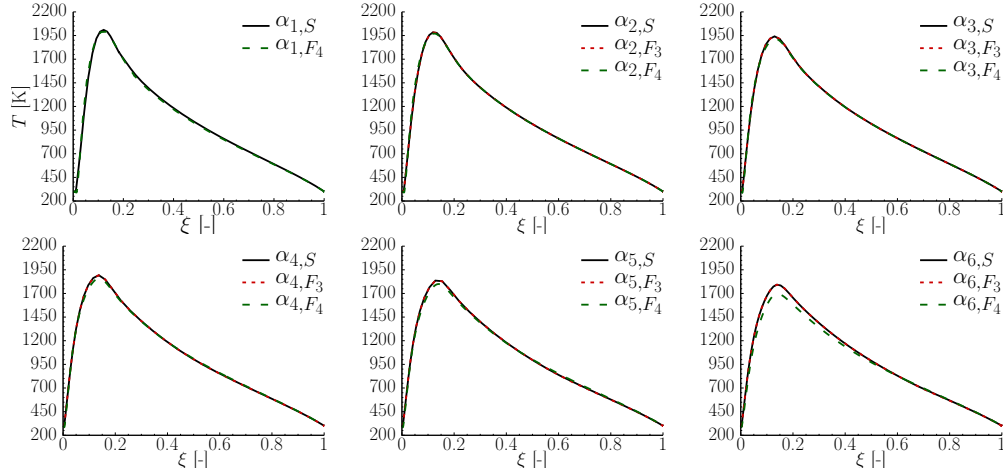


Figura 6.24: Perfiles de temperatura del gas.

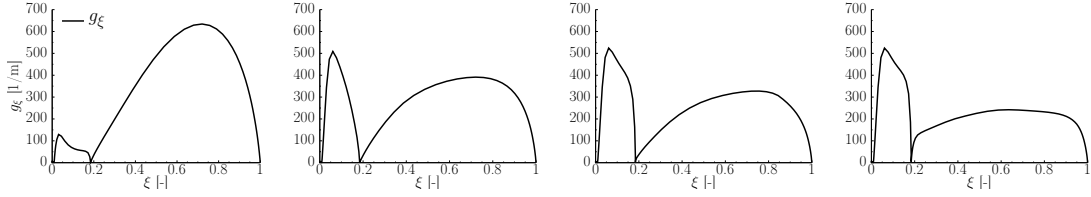


Figura 6.25: Perfiles del gradiente de fracción de mezcla con el modelo completo usando el set S .

de la gota implica menor cantidad de combustible para reaccionar en la zona derecha en comparación con F_3 .

Influencia del radio de la gota

Los resultados se compararán solo con S , ya que los perfiles de g_ξ para todos los casos presentan valores muy bajos para ξ cercano a 0,2 (fig. 6.25), lo que hace imposible su resolución con F_3 .

Tanto en los perfiles de temperatura (fig. 6.26), como en el de las especies químicas (figs. 6.27 y 6.28), se ve que a medida que se aumenta el radio de la gota, los resultados son peores, por lo que la suposición es menos válida.

Es importante notar que a medida que se aumenta el radio de la gota cada vez las predicciones realizadas con el modelo simplificado se alejan cada vez más de su equivalente en el espacio físico.

Otro aspecto interesante de estos resultados es que en general los perfiles son muy similares entre si, esto se debe a que la trayectoria es, en forma, igual para todas las

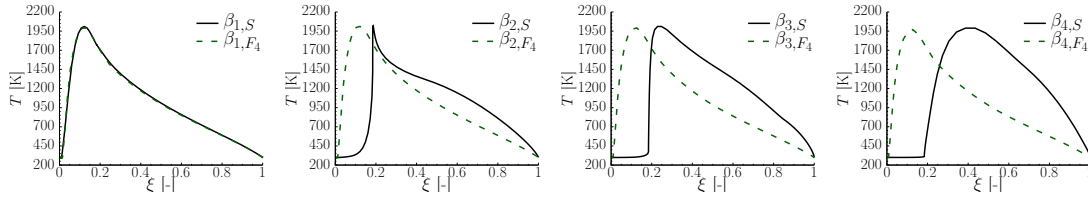


Figura 6.26: Perfiles de temperatura del gas.

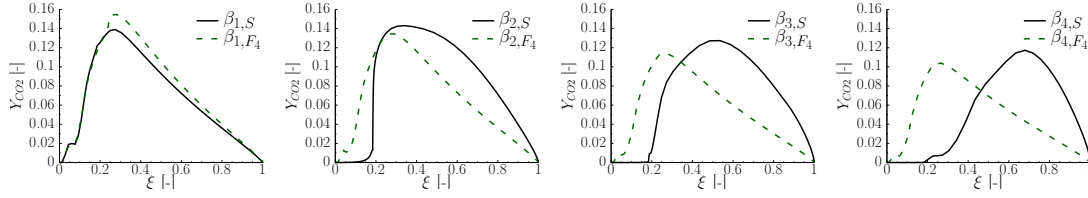


Figura 6.27: Perfiles de fracción másica de CO_2 del gas.

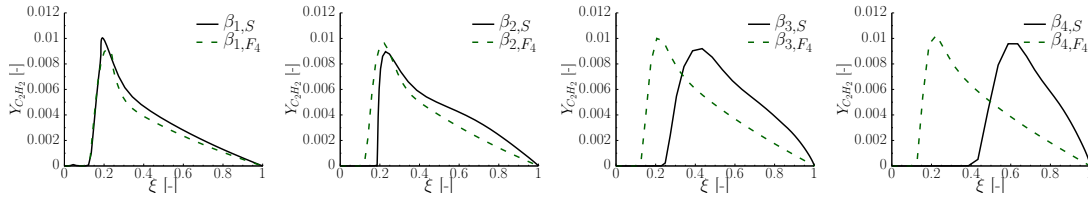


Figura 6.28: Perfiles de fracción másica de C_2H_2 del gas.

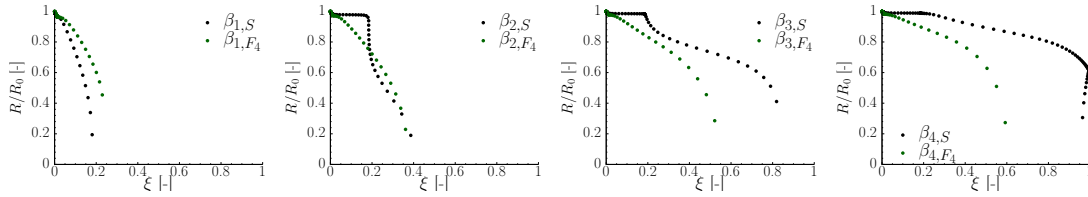


Figura 6.29: Radios de la gotas.

llamas (fig. 6.29), a diferencia de la que se produce sin la simplificación. Esto se traduce en perfiles de evaporación cualitativamente muy parecidos. Esto solo reafirma la idea de que esta simplificación es realmente útil solo cuando se trabaja con radios de gotas pequeños.

Capítulo 7

Conclusiones

En esta tesis se desarrolla una formulación completamente cerrada de la ecuaciones de flamelet para llamas de spray en una configuración de flujos opuestos, lo que, comparado con formulaciones previas, implica cerrar el término relacionado con la velocidad del flujo y los términos fuentes debido a la evaporación.

Para el cierre del primero, se hace uso de una transformación de similaridad para la coordenada radial en la ecuación de conservación de momentum, y de esta manera se obtiene una formulación unidimensional que puede transformarse directamente a espacio de flamelet. Con esta ecuación se puede entonces obtener el campo de velocidad y consecuentemente $\hat{a}$. Para el cierre de los términos fuente asociados a la evaporación, por otro lado, se hace uso de un modelo Lagrangiano para la fase líquida. Este modelo, junto con la similaridad asumida, permite cerrar completamente el sistema en el espacio de fracción de mezcla. Obteniendo, de esta forma, un set de ecuaciones de flamelet completamente independiente del espacio físico.

Para la validación del modelo desarrollado, se genera primero un set de llamas laminares de etanol/aire, las cuales se simulan en espacio físico y posteriormente se proyectan en espacio de fracción de mezcla. Estas consideran un amplio espectro de strain rates, desde valores bajos hasta valores cercanos a la extinción. En primer lugar se evalúa el desempeño únicamente del modelo de clausura para el gradiente de la velocidad, al cual se le llama F_1 , luego se hace lo propio con el modelo para los términos fuente debido a la evaporación, al que se refiere como F_2 y finalmente se realiza la validación del modelo completo, designado como F_3 . Los resultados muestran que los sets F_1 y F_2 describen la llama de manera apropiada, aunque para el último se aprecian leves diferencias respecto a las estructuras de referencia proyectadas desde

el espacio físico. Estas diferencias son atribuibles a problemas numéricos asociados con el acople de descripciones Lagrangianas y Eulerianas, los cuales ya han sido previamente identificados en la literatura relacionada. Para el set F_3 , el modelo es capaz de predecir los perfiles de las propiedades de las llamas muy bien en comparación con su equivalente en el sistema de similaridad. En relación con la descripción de la dinámica de la gota en espacio de flamelet, en este análisis se concluye que, dada la naturaleza del flamelet, en el espacio de fracción de mezcla no se puede captar la zona de flujo potencial, por lo que el set F_3 no predice correctamente la velocidad de inyección de las gotas a la zona de combustión. Esto implica que la gota se evapora antes, produciendo diferencias entre los perfiles de evaporación, lo que de cualquier modo no se traduce en cambios importantes en el perfil de g_ξ .

Si bien en este trabajo las ecuaciones de flamelet se cierran completamente para esta configuración, la implementación y resolución del modelo presenta dificultades de carácter numérico, las que hacen difícil obtener convergencia bajo ciertas condiciones. Estas se hacen presente cuando la gota pasa por zonas con valores de g_ξ cercanos o iguales a 0. Con el objetivo de obtener una formulación que se pueda utilizar para la elaboración de librerías, se propone un modelo simplificado donde la velocidad de la gota siempre es igual a la velocidad del gas, lo que elimina los problemas numéricos ya descritos asociados con la formulación completa.

El modelo simplificado propuesto captura las características principales de las llamas estudiadas, pero una completa evaluación requiere la elaboración de librerías y su uso en la simulación de otras llamas en el marco de un modelo de flamelet, lo que se proyecta como trabajo futuro. Por otro lado está la misión de solventar el problema de la no monotonía de la fracción de mezcla para llamas con inyección de combustible completamente en spray.

Apéndice A. Nomenclatura

Símbolos

a	Tasa de deformación (<i>Strain rate</i>)
a_{CF}	Número de moles de carbono en la especie k
B_M	Número de transferencia de masa de Spalding
B_T	Número de transferencia de energía de Spalding
C_D	Coefficiente de arrastre
C_p	Calor específico
D	Coefficiente de difusión másico
D_T	Coefficiente de difusión térmico
F	Combustible
f	Función de corriente
$\mathbf{G}$	Vector aceleración de gravedad
g_ξ	Gradiente de la fracción de mezcla
g_c	Gradiente de la variable de progreso
h_k	Entalpía de la especie k
L	Calor latente de vaporización
Le	Número de Lewis
$\bar{M}$	Peso molecular
$\dot{m}$	Flujo másico
m_l	Masa de la gota
n	Densidad del número de gotas
$\tilde{N}u$	Número de Nusselt modificado
O	Oxidante
P	Producto de la reacción química
p	Presión
Pr	Número de Prandtl

Q	Flujo de calor
$\dot{q}$	Flujo de calor hacia la gota
q_R	Flujo de calor
R	Radio instantáneo de la gota
r	Coordenada radial
Re	Número de Reynolds
s	Coeficiente estequiométrico
$\dot{S}_e$	Término fuente de energía debido a la evaporación
$\dot{S}_m$	Término fuente de momentum debido a la evaporación
$\dot{S}_v$	Término fuente de masa debido a la evaporación
Sc	Número de Schmidt
$\tilde{Sh}$	Número de Sherwood modificado
T	Temperatura
t	Tiempo
$\mathbf{u}$	Vector velocidad
u_i	Componente i de la velocidad del gas
$\tilde{V}_i$	Componente i de la velocidad de difusión
V_{ky}	Componente axial de la velocidad de difusión de la especie k
$\bar{W}$	Peso molecular de la mezcla de gases
$\mathbf{x}$	Vector de la posición de la gota
x_i	Componente i del sistema de coordenadas
X_k	Fracción molar de la especie k
y	Coordenada axial
Y_c	Variable de progreso
Y_k	Fracción másica de la especie k

Letras Griegas

α	Conductividad térmica
χ	Tasa de disipación escalar
δ_{kF}	Delta de Kronecker
η	Coordenada de similaridad
κ_ξ	Curvatura de la fracción de mezcla
κ_c	Curvatura de la variable de progreso
λ	Conductividad térmica
μ	Viscosidad dinámica

ν	Viscosidad cinemática
$\dot{\omega}_k$	Término fuente de masa debido a las reacciones químicas para la especie k
$\dot{\omega}_T$	Término fuente de energía debido a las reacciones químicas
ρ	Densidad
τ	Coordenada temporal en el espacio de composición
ς	Coordenada radial interna de la gota
ξ	Fracción de mezcla
ξ_r	Coordenada tangencial a la fracción de mezcla

Subíndices

$+\infty$	Condición de contorno en el lado derecho
$-\infty$	Condición de contorno en el lado izquierdo
0	Condición inicial
$\perp$	Coordenada perpendicular
<i>boil</i>	Punto de ebullición
<i>crit</i>	Punto de crítico
F	Combustible
f	Film de la gota
k	Especie química k
l	Fase líquida
O	Oxidante
r	Coordenada radial
s	Superficie de la gota
st	Estequiométrico
y	Coordenada axial

Bibliografía

- [1] I. E. Agency, World Energy Balances 2019, 2019.
- [2] L. John Wiley, Sons, Laminar Non-Premixed Flames, 2012, pp. 125–205.
- [3] D. Veynante, L. Vervisch, Turbulent combustion modeling, Progress in Energy and Combustion Science 28 (2002) 193 – 266.
- [4] R. Cant, E. Mastorakos, An Introduction to Turbulent Reacting Flows, Imperial College Press, 2008.
- [5] S. Pope, Small scales, many species and the manifold challenges of turbulent combustion, Proceedings of the Combustion Institute 34 (2013) 1 – 31.
- [6] M. Smooke, The computation of laminar flames, Proceedings of the Combustion Institute 34 (2013) 65 – 98.
- [7] N. Peters, Multiscale combustion and turbulence, Proceedings of the Combustion Institute 32 (2009) 1 – 25.
- [8] J. Buckmaster, P. Clavin, A. Linan, M. Matalon, N. Peters, G. Sivashinsky, F. Williams, Combustion theory and modeling, Proceedings of the Combustion Institute 30 (2005) 1 – 19.
- [9] R. Bilger, S. Pope, K. Bray, J. Driscoll, Paradigms in turbulent combustion research, Proceedings of the Combustion Institute 30 (2005) 21 – 42.
- [10] E. Gutheil, Issues in computational studies of turbulent spray combustion, in: B. Merci, D. Roekaerts, A. Sadiki (Eds.), Experiments and Numerical Simulations of Diluted Spray Turbulent Combustion, volume 17 of *ERCOFTAC Series*, Springer International Publishing, 2011, pp. 1–39.

- [11] P. Jenny, D. Roekaerts, N. Beishuizen, Modeling of turbulent dilute spray combustion, *Progress in Energy and Combustion Science* 38 (2012) 846 – 887.
- [12] S. Pope, *Turbulent Flows*, Cambridge University Press, 2000.
- [13] P. Davidson, *Turbulence: An Introduction for Scientists and Engineers*, Oxford University Press, 2004.
- [14] T. Poinso, D. Veynante, *Theoretical and Numerical Combustion*, Second Edition, R.T. Edwards, Inc., 2005.
- [15] A. Klimenko, R. Bilger, Conditional moment closure for turbulent combustion, *Progress in Energy and Combustion Science* 25 (1999) 595 – 687.
- [16] D. Haworth, Progress in probability density function methods for turbulent reacting flows, *Progress in Energy and Combustion Science* 36 (2010) 168 – 259.
- [17] S. Pope, {PDF} methods for turbulent reactive flows, *Progress in Energy and Combustion Science* 11 (1985) 119 – 192.
- [18] A. Klimenko, S. Pope, The modeling of turbulent reactive flows based on multiple mapping conditioning, *Physics of Fluids* 15 (2003).
- [19] U. Maas, S. Pope, Simplifying chemical kinetics: Intrinsic low-dimensional manifolds in composition space, *Combustion and Flame* 88 (1992) 239 – 264.
- [20] V. Bykov, U. Maas, The extension of the ildm concept to reaction–diffusion manifolds, *Combustion Theory and Modelling* 11 (2007) 839–862.
- [21] J. van Oijen, A. Donini, R. Bastiaans, J. ten Thije Boonkkamp, L. de Goey, State-of-the-art in premixed combustion modeling using flamelet generated manifolds, *Progress in Energy and Combustion Science* 57 (2016) 30 – 74.
- [22] N. Peters, Laminar diffusion flamelet models in non-premixed turbulent combustion, *Progress in Energy and Combustion Science* 10 (1984) 319 – 339.
- [23] H. Pitsch, C. M. Cha, S. Fedotov, Flamelet modelling of non-premixed turbulent combustion with local extinction and re-ignition, *Combustion Theory and Modelling* 7 (2003) 317–332.

- [24] C. Hasse, N. Peters, A two mixture fraction flamelet model applied to split injections in a DI diesel engine, *Proceedings of the Combustion Institute* 30 (2005) 2755 – 2762.
- [25] E. Knudsen, H. Pitsch, A general flamelet transformation useful for distinguishing between premixed and non-premixed modes of combustion, *Combustion and Flame* 156 (2009) 678 – 696.
- [26] P.-D. Nguyen, L. Vervisch, V. Subramanian, P. Domingo, Multidimensional flamelet-generated manifolds for partially premixed combustion, *Combustion and Flame* 157 (2010) 43 – 61.
- [27] S. Popp, F. Hunger, S. Hartl, D. Messig, B. Coriton, J. H. Frank, F. Fuest, C. Hasse, LES flamelet-progress variable modeling and measurements of a turbulent partially-premixed dimethyl ether jet flame, *Combustion and Flame* 162 (2015) 3016 – 3029.
- [28] A. Scholtissek, W. L. Chan, H. Xu, F. Hunger, H. Kolla, J. H. Chen, M. Ihme, C. Hasse, A multi-scale asymptotic scaling and regime analysis of flamelet equations including tangential diffusion effects for laminar and turbulent flames, *Combustion and Flame* 162 (2015) 1507 – 1529.
- [29] M. M. Ameen, V. Magi, J. Abraham, An evaluation of the assumptions of the flamelet model for diesel combustion modeling, *Chemical Engineering Science* 138 (2015) 403 – 413.
- [30] I. Dhuchakallaya, P. Rattanadecho, P. Watkins, Auto-ignition and combustion of diesel spray using unsteady laminar flamelet model, *Applied Thermal Engineering* 52 (2013) 420 – 427.
- [31] L. Verhoeven, W. Ramaekers, J. van Oijen, L. de Goey, Modeling non-premixed laminar co-flow flames using flamelet-generated manifolds, *Combustion and Flame* 159 (2012) 230 – 241.
- [32] V. Mittal, D. J. Cook, H. Pitsch, An extended multi-regime flamelet model for IC engines, *Combustion and Flame* 159 (2012) 2767 – 2776. Special Issue on Turbulent Combustion.

- [33] E. Knudsen, H. Pitsch, Capabilities and limitations of multi-regime flamelet combustion models, *Combustion and Flame* 159 (2012) 242 – 264.
- [34] C. Bekdemir, L. Somers, L. de Goey, Modeling diesel engine combustion using pressure dependent flamelet generated manifolds, *Proceedings of the Combustion Institute* 33 (2011) 2887 – 2894.
- [35] C. Felsch, M. Gauding, C. Hasse, S. Vogel, N. Peters, An extended flamelet model for multiple injections in diesel engines, *Proceedings of the Combustion Institute* 32 (2009) 2775 – 2783.
- [36] M. Ihme, C. M. Cha, H. Pitsch, Prediction of local extinction and re-ignition effects in non-premixed turbulent combustion using a flamelet/progress variable approach, *Proceedings of the Combustion Institute* 30 (2005) 793 – 800.
- [37] C. Pierce, P. Moin, Progress-variable approach for large-eddy simulation of non-premixed turbulent combustion, *Journal of Fluid Mechanics* 504 (2004) 73–97.
- [38] H. Barths, C. Hasse, N. Peters, Computational fluid dynamics modelling of non-premixed combustion in direct injection diesel engines, *International Journal of Engine Research* 1 (2000) 249–267.
- [39] C. Hollmann, E. Gutheil, Flamelet-modeling of turbulent spray diffusion flames based on a laminar spray flame library, *Combustion Science and Technology* 135 (1998) 175–192.
- [40] S. Hu, P. Wang, R. W. Pitz, M. D. Smooke, Experimental and numerical investigation of non-premixed tubular flames, *Proceedings of the Combustion Institute* 31 (2007) 1093 – 1099.
- [41] H. Olguin, E. Gutheil, Derivation and evaluation of a multi-regime spray flamelet model, *Zeitschrift für Physikalische Chemie* (2014).
- [42] B. Franzelli, B. Fiorina, N. Darabiha, A tabulated chemistry method for spray combustion, *Proceedings of the Combustion Institute* 34 (2013) 1659 – 1666.
- [43] H. Olguin, Theoretical and Numerical Analysis of Laminar Spray Flames for Use in Turbulent Spray Combustion Modeling, PhD Thesis, Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, 2015.

- [44] L. Gomet, V. Robin, A. Mura, Lagrangian modelling of turbulent spray combustion under liquid rocket engine conditions, *Acta Astronautica* 94 (2014) 184 – 197.
- [45] H. Olguin, A. Scholtissek, S. Gonzalez, F. Gonzalez, M. Ihme, C. Hasse, E. Gutheil, Closure of the scalar dissipation rate in the spray flamelet equations through a transport equation for the gradient of the mixture fraction, *Combustion and Flame* 208 (2019) 330 – 350.
- [46] A. Scholtissek, P. Domingo, L. Vervisch, C. Hasse, A self-contained progress variable space solution method for thermochemical variables and flame speed in freely-propagating premixed flamelets, *Proceedings of the Combustion Institute* 37 (2019) 1529 – 1536.
- [47] B. Abramzon, W. Sirignano, Droplet vaporization model for spray combustion calculations, *International Journal of Heat and Mass Transfer* 32(9) (1989) 1605–1618.
- [48] S. Burke, Diffusion flames, *Industrial and Engineering Chemistry* 20 (1928) 998–1004.
- [49] A. Masri, R. Bilger, R. Dibble, Turbulent nonpremixed flames of methane near extinction: Probability density functions, *Combustion and Flame* 73 (1988) 261 – 285.
- [50] R. Bilger, The structure of turbulent nonpremixed flames, *Symposium (International) on Combustion* 22 (1989) 475 – 488.
- [51] H. Pitsch, N. Peters, A consistent flamelet formulation for non-premixed combustion considering differential diffusion effects, *Combustion and Flame* 114 (1998) 26 – 40.
- [52] W. Han, A. Scholtissek, C. Hasse, The role of tangential diffusion in evaluating the performance of flamelet models, *Proceedings of the Combustion Institute* 37 (2019) 1767 – 1774.
- [53] A. Scholtissek, S. Popp, S. Hartl, H. Olguin, P. Domingo, L. Vervisch, C. Hasse, Derivation and analysis of two-dimensional composition space equations for

- multi-regime combustion using orthogonal coordinates, *Combustion and Flame* 218 (2020) 205 – 217.
- [54] D. Carbonell, C. Perez-Segarra, P. Coelho, A. Oliva, Flamelet mathematical models for non-premixed laminar combustion, *Combustion and Flame* 156 (2009) 334 – 347.
- [55] Y. Hu, H. Olguin, E. Gutheil, A spray flamelet/progress variable approach combined with a transported joint pdf model for turbulent spray flames, *Combustion Theory and Modelling* 21 (2017) 1–28.
- [56] E. Gutheil, Numerical analysis of the autoignition of methanol, ethanol, n-heptan and n-octane sprays with detailed chemistry, *Combustion Science and Technology* 105 (1995) 265–278.
- [57] Y. Hu, H. Olguin, E. Gutheil, Transported joint probability density function simulation of turbulent spray flames combined with a spray flamelet model using a transported scalar dissipation rate, *Combustion Science and Technology* 189 (2017) 322–339.
- [58] H.-W. Ge, I. Düwel, H. Kronmayer, R. W. Dibble, E. Gutheil, C. Schulz, J. Wolfrum, Laser-based experimental and monte carlo PDF numerical investigation of an ethanol/air spray flame, *Combustion Science and Technology* 180 (2008) 1529–1547.
- [59] H.-W. Ge, E. Gutheil, Simulation of a turbulent spray flame using coupled PDF gas phase and spray flamelet modeling, *Combustion and Flame* 153 (2008) 173 – 185.
- [60] C. Hollmann, E. Gutheil, Modeling of turbulent spray diffusion flames including detailed chemistry, *Symposium (International) on Combustion* 26 (1996) 1731 – 1738.
- [61] K. Luo, J. Fan, K. Cen, New spray flamelet equations considering evaporation effects in the mixture fraction space, *Fuel* 103 (2013) 1154 – 1157.
- [62] B. Franzelli, A. Vié, M. Ihme, On the generalisation of the mixture fraction to a monotonic mixing-describing variable for the flamelet formulation of spray flames, *Combustion Theory and Modelling* 19 (2015) 773–806.

- [63] H. Olguin, E. Gutheil, Theoretical and numerical study of evaporation effects in spray flamelet modeling, in: B. Merci, E. Gutheil (Eds.), *Experiments and Numerical Simulations of Turbulent Combustion of Diluted Sprays*, volume 19 of *ERCOTAC Series*, Springer International Publishing, 2014, pp. 79–106.
- [64] H. Olguin, E. Gutheil, Influence of evaporation on spray flamelet structures, *Combustion and Flame* 161 (2014) 987 – 996.
- [65] E. Gutheil, W. Sirignano, Counterflow spray combustion modeling with detailed transport and detailed chemistry, *Combustion and Flame* 113 (1998) 92 – 105.
- [66] E. Gutheil, Multiple solutions for structures of laminar counterflow spray flames, *Progress in Computational Fluid Dynamics* 5 (2005) 414–419.
- [67] A. Scholtissek, F. Dietzsch, M. Gauding, C. Hasse, In-situ tracking of mixture fraction gradient trajectories and unsteady flamelet analysis in turbulent non-premixed combustion, *Combustion and Flame* 175 (2017) 243 – 258.
- [68] G. Continillo, W. Sirignano, Counterflow spray combustion modeling, *Combustion and Flame* 81 (1990) 325 – 340.
- [69] R. J. Kee, J. Warnatz, J. A. Miller, A FORTRAN Computer Code Package for the Evaluation of Gas Phase Viscosities, Heat Conductivities, and Diffusion Coefficients., Technical Report, Sandia National Laboratories, Livermore, 1983. Sandia Report SAND83-8209.
- [70] B. Abramzon, W. Sirignano, Droplet vaporization model for spray combustion calculations, *International Journal of Heat and Mass Transfer* 32 (1989) 1605 – 1618.
- [71] H. K. Versteeg, W. Malalasekera, *An introduction to computational fluid dynamics*, Pearson Prentice Hall, Harlow, 1995.
- [72] M. R. Archambault, A maximum entropy moment closure approach to modeling the evolution of spray flows, Ph.D. thesis, Stanford University, 1999.
- [73] H. Olguin, P. Hindenberg, E. Gutheil, Numerical and theoretical analysis of laminar counterflowing spray flames for use in turbulent combustion modeling, *Fluids Engineering Division Summer Meeting* (2014).