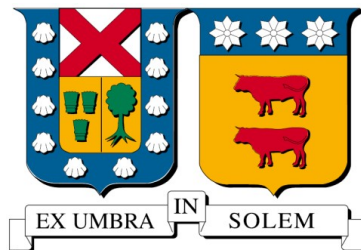


UNIVERSIDAD TÉCNICA FEDERICO SANTA MARÍA
DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA MECÁNICA
VALPARAÍSO-CHILE



“SOLUCIONES DE LAS ECUACIONES DE
FLAMELET DE SPRAY PARA REGÍMENES
TRANSITORIOS Y DOMINIOS DE
COMPOSICIÓN NO MONÓTONOS”

FELIPE ESTEBAN HUENCHUGUALA GONZÁLEZ

TESIS DE GRADO PARA OPTAR AL GRADO DE:
DOCTOR EN INGENIERÍA MECÁNICA

PROFESOR GUÍA: DR. HERNÁN OLGUÍN

PROFESOR EVALUADOR INTERNO: DR. CARLOS ROSALES

PROFESOR EVALUADOR INTERNO: DR. CHRISTOPHER COOPER

PROFESOR EVALUADOR EXTERNO: DR. PEDRO RESZKA (UNIVERSIDAD
ADOLFO IBAÑEZ)

JUNIO - 2026



CONSTANCIA DE VALIDACIÓN Y CONFIDENCIALIDAD DE MONOGRAFÍA A REPOSITORIO ACADÉMICO

1.- IDENTIFICACIÓN DEL TRABAJO ACADÉMICO

Tipo de monografía (marcar una opción): ☐ Memoria o trabajo de título ☒ Tesis de Postgrado

Título del trabajo: Soluciones de las ecuaciones de flamelet de spray para regímenes transitorios y dominios de composición no monótonos

Nombre del candidato(a): Felipe Esteban Huenchguala González

Carrera / Grado: Doctorado en Ingeniería Mecánica

Campus: Casa Central **Departamento:** Ingeniería Mecánica

2.- VALIDACIÓN DEL PROFESOR GUÍA/DIRECTOR DE TESIS

Yo, Hernán Olguín, en mi calidad de profesor(a) guía/director(a) del trabajo académico mencionado anteriormente

DEJO CONSTANCIA que:

- He revisado esta versión del documento y corresponde a la versión final aprobada del trabajo.
- El trabajo cumple con los requisitos académicos y de formato establecidos por la institución.

3.- EVALUACIÓN DE CONFIDENCIALIDAD POR PROPIEDAD INDUSTRIAL (marcar una opción)

☒ El trabajo **NO contiene** información que amerite confidencialidad y puede ser publicado de inmediato en repositorio con acceso abierto.

☐ El trabajo **CONTIENE** información con potenciales implicancias de propiedad industrial o intelectual y requiere un periodo de confidencialidad (**embargo**) por (**marcar una opción**):

☐ 6 meses ☐ 12 meses ☐ 2 años ☐ 3 años ☐ 5 años ☐ 10 años

Fundamentación de la necesidad de confidencialidad (obligatorio si se solicita embargo):

4.- FIRMAS

Profesor(a) guía o director(a) de memoria o tesis:

Fecha: 03/07/2026

Firma:

Estudiante o Candidato(a):

Fecha: 03/07/2026

Firma:

Este formulario debe ser insertado como página 2 de la memoria o tesis, completado y firmado por estudiante y profesor(a) antes de la entrega en portal PRISMA de Biblioteca USM.



UNIVERSIDAD TÉCNICA FEDERICO SANTA MARÍA

TITULO DE LA TESIS: “Soluciones de las ecuaciones de flamelet de spray para regímenes transitorios y dominios de composición no monótonos”

AUTOR: Felipe Esteban Huenchuguala González

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

Dr. Hernán Olguín



.....

Dr. Carlos Rosales



.....

Dr. Christopher Cooper



.....

Dr. Pedro Reszka



.....

Valparaíso, Chile. Junio de 2026

Agradecimientos

En primer lugar, quiero agradecer a mi profesor guía, Dr. Hernán Olguín, por su dedicación, paciencia, apoyo y permanente disposición para discutir ideas, revisar resultados y orientar el rumbo de este trabajo. Su enfoque riguroso y sus altos estándares han contribuido de manera decisiva no sólo al desarrollo de esta tesis, sino también a mi crecimiento personal y como investigador.

A mis padres, Cecilia y Francisco, por su apoyo constante a lo largo de mi formación, así como por la confianza depositada en mis decisiones y por el entorno que han construido, el cual hizo posible que pudiera concentrarme plenamente en mi desarrollo académico.

A mi familia y amigos, quienes me acompañaron e hicieron más llevadero este proceso. Agradezco también a mis compañeros de postgrado por las conversaciones, colaboraciones y críticas constructivas que enriquecieron este trabajo, en especial a Francisco, con quien he trabajado de manera cercana y constante, y cuya colaboración fue fundamental para avanzar y culminar esta tesis. Asimismo, agradezco a Luis por permitirme utilizar su solución analítica como base para el desarrollo de este trabajo.

Por último, agradezco el apoyo financiero proporcionado por ANID a través de la Beca de Doctorado Nacional N°21201826, así como al Departamento de Postgrado de la Universidad Técnica Federico Santa María, cuyo respaldo fue esencial para el desarrollo de esta tesis.

Resumen

En la teoría de flamelet, una llama turbulenta puede representarse como un ensamble de estructuras laminares. Los escalares reactivos asociados (como la temperatura y las fracciones másicas de las especies químicas) pueden describirse mediante ecuaciones formuladas en un espacio de composición adecuado, las llamadas ecuaciones de flamelet. Este marco ha sido ampliamente utilizado en el estudio de llamas gaseosas, permitiendo un entendimiento detallado de su comportamiento bajo una gran variedad de condiciones. Sin embargo, su aplicación al estudio de llamas de spray ha sido considerablemente más limitada. En particular, la resolución de las ecuaciones de flamelet en presencia de spray se ha restringido a configuraciones con perfiles de evaporación estacionarios y a formulaciones que asumen perfiles de fracción de mezcla monótonos, aún cuando en llamas de spray esta presenta un máximo interno cuya ubicación y valor no son conocidos *a priori*. En esta tesis se desarrollan nuevos algoritmos y códigos numéricos que permiten resolver las ecuaciones de flamelets de spray bajo condiciones más generales, ampliando el espacio de soluciones accesible mediante este formalismo.

En primer lugar, se estudian flamelets de spray transitorios mediante el acoplamiento directo de las formulaciones de ambas fases en el espacio de composición, introduciendo una descripción Lagrangiana de la fase líquida formulada en dicho espacio. Este enfoque, implementado numéricamente en el código desarrollado, permite acceder por primera vez a un conjunto de soluciones transitorias de las ecuaciones de flamelet de spray, incluyendo fenómenos que no pueden capturarse bajo hipótesis estacionarias como la extinción.

Se analizan flamelets gaseosos perturbados por sprays monodispersos generados mediante inyección continua y discontinua, observándose que esta última conduce a estructuras oscilatorias con temperaturas hasta 46 K superiores y amplía significativamente los rangos de radios y velocidades iniciales que conducen a flamelets

encendidos (16 % y 25 %, respectivamente). Asimismo, se obtienen por primera vez soluciones correspondientes a fenómenos de extinción y re-ignición.

Adicionalmente, se aborda la resolución de flamelets en dominios de fracción de mezcla no monótonos mediante la implementación de una solución analítica basada en perfiles de evaporación de la forma $\dot{S}_v(y) = Ay^2 + By + C$. Esta formulación permite determinar el dominio de Z y resolver las ecuaciones en configuraciones que no pueden ser abordadas mediante los enfoques disponibles hasta la fecha.

En conjunto, los desarrollos presentados, tanto en términos de la formulación como de la implementación numérica, permiten extender el rango de aplicabilidad de la teoría de flamelet a configuraciones de spray más realistas, revelando comportamientos y estructuras que no pueden capturarse mediante formulaciones tradicionales.

Palabras Claves: ecuaciones de flamelet de spray, efectos evaporativos, inyección de gotas discontinua, extinción y re-ignición, fracción de mezcla no monótona

Índice general

Agradecimientos	I
Resumen	III
1. Introducción	1
1.1. La combustión como problema multiescala	1
1.2. Estructura de flamelet	2
1.3. Ecuaciones de flamelet	3
1.4. Objetivos	5
2. Estado del arte	7
2.1. Ecuaciones de flamelet para llamas gaseosas no premezcladas	7
2.1.1. <i>Flame sheet model</i>	7
2.1.2. Fracción de mezcla	12
2.1.3. Ecuaciones de flamelet para llamas gaseosas no premezcladas .	15
2.2. Ecuaciones de flamelet para llamas de spray	21
3. Modelo matemático	27
3.1. Formulación transitorias de flamelet de spray	27
3.1.1. Ecuaciones de flamelet para la fase gaseosa	28
3.1.2. Descripción Lagrangiana para la fase líquida	33
3.2. Solución analítica para la estimación de la fracción de mezcla máxima .	38
4. Algoritmos para la resolución de las ecuaciones de flamelet de spray	41
4.1. Algoritmo de resolución para flamelet transitorios	41
4.2. Algoritmo de resolución para flamelet con fracción de mezcla máxima desconocida	44

4.3.	Implementación numérica: integración temporal y discretización espacial	47
4.3.1.	Integración temporal: esquema de Euler semi-implícito	47
4.3.2.	Discretización espacial: método de diferencias finitas	49
5.	Verificación de los algoritmos	53
5.1.	Modelo de verificación: llama de flujos opuestos	53
5.1.1.	Modelo en espacio físico	54
5.1.2.	Transformación de similaridad	55
5.1.3.	Extensión formulación de flamelet de fase líquida	57
5.2.	Verificación del código transitorio	58
5.2.1.	Comparación flamelet-llama de flujos opuestos	58
5.2.2.	Limitaciones del código	59
5.3.	Verificación del código con fracción de mezcla máxima desconocida . .	62
5.3.1.	Evaluación de la solución analítica en la ecuación de transporte	62
5.3.2.	Comparación flamelet-llama de flujos opuestos	65
6.	Soluciones de flamelet de spray	68
6.1.	Flamelets de spray transitorios	68
6.1.1.	Flamelets gaseosos perturbados por spray	68
6.1.2.	Influencia de la estrategia de inyección de gotas en la estructura de flamelets	70
6.1.3.	Generalización de las observaciones	75
6.1.4.	Extinción	77
6.1.5.	Re-ignición	79
6.2.	Flamelets con fracción de mezcla máxima desconocida	81
6.2.1.	Estructuras de flamelet	81
6.2.2.	Propuesta de generación de librerías	85
7.	Conclusiones	87
	Bibliografía	90

Índice de figuras

2.1. Solución de Burke-Schumann en función de la fracción de mezcla. . . .	11
2.2. Curva en forma de S. Q e I representan los límites de extinción e ignición respectivamente.	17
2.3. Ilustración de la definición de la variable de composición efectiva: a) fracción de mezcla gaseosa y razón líquido-gas en el espacio físico, y b) representación del <i>manifold</i> unidimensional en el espacio (Z_g, Z_l) . .	24
4.1. Trayectorias de distintos grupos de gotas en el espacio de composición a lo largo del tiempo. El grosor de las líneas representa el radio instantáneo de las gotas.	42
4.2. Esquema del algoritmo de resolución para el flamelet transitorio. El proceso consiste en un bucle temporal principal (τ) que contiene un sub-bucle para la fase líquida ($\Delta\tau_l$) y un bucle iterativo interno para la fase gaseosa. Las flechas verdes indican el cumplimiento de una condición, mientras que las naranjas su incumplimiento.	43
4.3. Esquema del algoritmo iterativo para la resolución del flamelet con $Z_{\max}$ variable. El método acopla la solución numérica de las ecuaciones de flamelet con la estimación analítica de $Z_{\max}$ hasta alcanzar la convergencia. Las flechas verdes indican el cumplimiento de una condición, mientras que las naranjas su incumplimiento.	46
4.4. Esquema de una malla irregular unidimensional.	49
5.1. Esquema de la configuración de flujos opuestos.	54
5.2. Estructura de una llama de flujos opuestos gaseoso perturbado por un spray a 200/s (izquierda) y 300/s (derecha). La líneas representan la configuración de flujos opuestos, mientras que los puntos representan el flamelet.	58

5.3. Perfiles de g_Z y radio instantáneo de la gota (izquierda) y la fracción de mezcla (derecha), para una llama de flujos opuestos con $a = 100/s$, $R_0 = 10 \mu m$ y $u_0 = 0,75 m/s$	60
5.4. Perfiles de g_Z (izquierda) y del radio instantáneo de la gota junto con la fracción de mezcla (derecha), para una llama de flujos opuestos con $a = 100/s$, $R_0 = 30 \mu m$ y $u_0 = 0,75 m/s$	61
5.5. Representación esquemática de una estructura de flamelet simétrico. . .	63
5.6. Esquema del perfil de evaporación parabólico en el espacio físico, Ec. (5.20), y su distribución de Z asociada	64
5.7. Contribuciones de la ecuación de Z , Ec. (3.49), y el perfil de Z . Para la conveniencia del lector, la ecuación es presentada en la parte superior de la figura.	64
5.8. Perfiles de evaporación importados de llamas de flujos opuestos (línea continuas) y perfiles de evaporación cuadrático (línea segmentada) con $a = 200/s$ (izquierda) y $500/s$ (derecha).	66
5.9. Estructuras del flamelet obtenidas usando los perfiles de evaporación de la Fig. 5.8, es decir, usando perfiles de evaporación importado de llamas de flujos opuestos (líneas continuas) y perfiles de evaporación cuadrático (líneas segmentada) con $a = 200/s$ (izquierda) y $500/s$ (derecha).	66
6.1. Perfiles de temperatura, fuente de evaporación y fracciones másicas de CO_2 y CO para llamas de flujos opuestos de spray (línea continua) y gaseosas perturbada por spray (línea segmentada).	69
6.2. Perfiles de R/R_0 , $\dot{S}_v$ y χ para los flamelets C_0 , C_1 y C_2 ($a = 850/s$). La línea gris vertical representa $Z_{st} \approx 0,1$	71
6.3. Temperatura (izquierda) y tasa de disipación escalar (derecha) en el punto estequiométrico para los flamelets C_0 , C_1 y C_2	72
6.4. Contribuciones de la ecuación de g_Z (Ec. (3.29)) para los flamelets C_1 (izquierda) y C_2 (derecha) en el punto estequiométrico. Por conveniencia la ecuación es presentada en la parte superior de la figura.	73
6.5. Contribuciones de la descomposición de los términos de la tasa de deformación y difusión (Ec. (6.2), izquierda) y de los términos asociados a la evaporación (Ec. (6.3), derecha) para el flamelet C_2 en el punto estequiométrico.	73

6.6. Perfiles de $\dot{S}_v$ en dos instantes: $\tau_1 = 0,5$ ms (antes de que el pico alcance Z_{st} , línea continua), y $\tau_2 = 0,65$ ms (después de sobrepasarlo, línea segmentada).	74
6.7. T_{st} para los flamelets C_0 extendido (izquierda) y C_2 extendido (derecha), variando la velocidad y radio iniciales de las gotas. Las áreas blancas indican flamelets extintos.	76
6.8. Perfiles de R/R_0 , $\dot{S}_v$ y χ para flamelets de C_2 extendido con $R_0 = 7$, $10,5$ y $14 \mu\text{m}$. La línea gris vertical representa $Z_{st} \approx 0,1$	77
6.9. Temperatura (izquierda) y tasa de disipación escalar (derecha) en el punto estequiométrico, sobre el tiempo para los flamelets C_2^1 y C_2^2	78
6.10. Penetración máxima de del spray sobre el tiempo para los flamelets C_2^1 y C_2^2	79
6.11. Tasa de disipación escalar (línea continua) y temperatura (línea segmentada) en el punto estequiométrico sobre el tiempo para los flamelets $C_{2,A}$ (izquierda) y $C_{2,B}$ (derecha). A ambos flamelets se les aplica un aumento temporal de la tasa de deformación, desde $850/\text{s}$ hasta $985/\text{s}$ durante $0,5$ ms. El área gris indica el intervalo con alta tasa de deformación.	80
6.12. Perfiles de temperatura de los flamelet con distintos valores de $\dot{S}_{v,\text{max}}$, con un tasas de deformación de $a = 200/\text{s}$ (izquierda), $300/\text{s}$ (centro), y $400/\text{s}$ (derecha).	82
6.13. Perfiles de T , $\dot{S}_v$, Y_{CO} , y Y_{CO_2} para flamelets con $\dot{S}_{v,\text{max}} = 40 \text{ kg}/(\text{m}^3\text{s})$, con un tasas de deformación de $a = 200/\text{s}$ (izquierda), $300/\text{s}$ (centro), y $400/\text{s}$ (derecha).	83
6.14. Contribuciones de la ecuación de energía, Ec. (3.23), para flamelets con $\dot{S}_{v,\text{max}} = 40 \text{ kg}/(\text{m}^3\text{s})$, con un tasas de deformación de $a = 200/\text{s}$ (izquierda), $300/\text{s}$ (centro), y $400/\text{s}$ (derecha). Por conveniencia la ecuación es presentada en la parte superior de la figura.	84
6.15. Contribuciones de la ecuación de energía, Ec. (3.23), para una llama de flujos opuestos de spray (izquierda) y una gaseosa perturbada por un spray (derecha).	84
6.16. Mapas de contorno de Y_{CO_2} en el espacio de (Z, Y_C) (diferentes tasas de deformación) para $\dot{S}_{v,\text{max}} = 40$ (izquierda), 60 (centro) y $80 \text{ kg}/(\text{m}^3\text{s})$ (derecha).	85

6.17. Mapas de contorno de Y_{CO} en el espacio de (Z, Y_C) (diferentes tasas de deformación) para $\dot{S}_{v,max} = 40$ (izquierda), 60 (centro) y 80 kg/(m³s) (derecha). 86

Capítulo 1

Introducción

1.1. La combustión como problema multiescala

La combustión es un proceso fisicoquímico presente en una amplia variedad de sistemas industriales como motores de combustión interna, turbinas de gas, hornos y calderas. Su capacidad para liberar grandes cantidades de energía de forma rápida y controlada, junto con su adaptabilidad a diferentes escalas, la convierte en un fenómeno indispensable en aplicaciones que requieren altas temperaturas, elevada densidad energética o tiempos de respuestas reducidos. En consecuencia, las tecnologías basadas en combustión son pilares esenciales en la infraestructura energética y productiva global [1].

La creciente preocupación por el impacto ambiental del uso de combustibles fósiles ha impulsado la búsqueda de fuentes energéticas más sostenibles. En este contexto, diversas alternativas han sido exploradas para reducir la huella de carbono de los sistemas de combustión, incluyendo hidrógeno, amoníaco y combustibles sintéticos. Entre ellas, los biocombustibles líquidos, como el etanol o el biodiésel (líquidos a condiciones atmosféricas), se presentan como opciones particularmente atractivas debido a su origen renovable y a su compatibilidad con la infraestructura existente [2–4]. No obstante, dicha incorporación aún plantea desafíos técnicos y científicos que deben abordarse para optimizar su rendimiento y reducir su impacto ambiental. En particular, resulta fundamental comprender en profundidad la compleja interacción entre los procesos físicos y químicos que caracterizan a la combustión de sprays.

Desafortunadamente, la combustión turbulenta constituye uno de los problemas

más desafiantes de estudiar. Por un lado, la turbulencia en sí misma es un fenómeno que no está completamente comprendido, y por otro, la incorporación de reacciones químicas altamente no lineales introduce nuevas escalas temporales y espaciales que pueden diferir en varios órdenes de magnitud [5–7]. Por ejemplo, a diferencia de un flujo no reactivo, la combustión requiere que el combustible y el oxidante alcancen un mezclado a nivel molecular para que las reacciones químicas puedan tener lugar. En un entorno turbulento, este proceso ocurre principalmente en las interfaces entre las estructuras de pequeña escala, donde los gradientes de concentración se intensifican. Una vez iniciada la reacción, la difusión de calor y especies químicas desde la zona de reacción modifica nuevamente dichos gradientes y altera el campo de densidad y velocidad del flujo, generando un acoplamiento complejo entre transporte turbulento y cinética química. En presencia de combustibles líquidos, la situación se vuelve aún más desafiante, ya que la atomización y evaporación de gotas introducen procesos multifásicos adicionales que acoplan dinámica de partículas, transferencia de masa y calor, y reacción química [8, 9].

Como consecuencia de esta superposición de fenómenos el estudio de las llamas turbulentas es complejo, ya que es imposible aislar y estudiar de manera independiente los efectos del flujo, difusión, reacción química y, en el caso de combustibles líquidos, la evaporación. Por el contrario, estos procesos se encuentran íntimamente acoplados y varían simultáneamente en el espacio y en el tiempo, dificultando la identificación de los mecanismos físicos dominantes. En este contexto, resulta útil buscar descripciones basadas en estructuras locales elementales que preserven la física esencial de la combustión, pero que permitan un análisis más claro y sistemático de la interacción entre transporte y reacción.

1.2. Estructura de flamelet

Bajo condiciones de alto número de Damköhler ($Da \gg 1$, con $Da = \tau_{\text{flujo}}/\tau_{\text{química}}$), típicas de muchas configuraciones de interés práctico, los tiempos característicos de las reacciones químicas son mucho menores que los asociados a las escalas turbulentas del flujo. Esta marcada separación de escalas conduce a la formación de capas reactivas muy delgadas, en las cuales los procesos de difusión molecular y reacción química dominan sobre la dinámica turbulenta local, de modo que la estructura interna de estas capas permanece esencialmente laminar [10]. Estas estructuras

elementales, denominadas flamelets, constituyen el eje central de la teoría homónima, según la cual una llama turbulenta puede interpretarse como un ensamble de tales estructuras [10, 11]. Desde un punto de vista físico, cada una de ellas preserva la interacción fundamental entre transporte y cinética química, al tiempo que comprime la complejidad asociada a las grandes escalas del flujo en un único parámetro, la tasa de deformación a .

Una de las características más relevantes de los flamelets es que permiten reducir la dimensionalidad del problema. En particular, en los límites asintóticos de llamas difusivas o premezcladas, su estructura puede describirse predominantemente en la dirección normal a la capa reactiva, lo que permite representar la estructura tridimensional de la llama mediante una formulación esencialmente unidimensional [6, 10]. En este marco, los gradientes de las propiedades termoquímicas, tales como la temperatura y las especies químicas, se alinean con el gradiente de un único escalar. En el caso de llamas difusivas, dicho escalar corresponde a la fracción de mezcla, Z [10, 12], mientras que en llamas premezcladas se utiliza la variable de progreso, Y_C [13, 14]. Esta representación permite analizar de forma clara y sistemática los balances locales entre difusión, advección y reacción de los escalares reactivos, difíciles de aislar en una llama turbulenta.

Finalmente, en muchas configuraciones de combustión difusiva, las escalas de la químicas son considerablemente menores que las asociadas al transporte dentro del flamelet (difusivo y convectivo), por lo que la estructura de la llama suele encontrarse cercana al equilibrio químico local y puede aproximarse mediante flamelets estacionarios. Sin embargo, en algunos flujos turbulentos las escalas locales de transporte pueden variar significativamente, dando lugar a regiones donde esta aproximación deja de ser válida. En tales situaciones, los efectos de no equilibrio deben ser considerados y pueden manifestarse en fenómenos como ignición, extinción o reignición del flamelet [6, 10].

1.3. Ecuaciones de flamelet

El estudio de las estructuras de flamelet se realiza mediante la resolución de las denominadas ecuaciones de flamelet, formuladas en el espacio de composición, donde la elección de las coordenadas depende del régimen de combustión: las formulaciones clásicas para llamas no premezcladas utilizan la fracción de mezcla como variable

independiente principal [10, 12], mientras que en premezcladas se emplea la variable de progreso como única coordenada [13, 14].

El éxito en el uso las ecuaciones de flamelets en llamas gaseosas ha motivado su extensión a llamas de spray [15–21]. Aunque en apariencia similares a las ecuaciones Peters [10], derivadas para condiciones de inyección de combustible en fase gaseosa, la inclusión de términos evaporativos introduce una complejidad conceptual y paramétrica considerable. Mientras que los flamelets gaseosos sin curvatura dependen esencialmente de un único parámetro, la tasa de deformación, a , las estructuras de flamelet con spray se definen en un espacio multidimensional que incluye la razón combustible líquido-aire, E , así como las condiciones iniciales de las gotas, radio R_0 y velocidad u_0 [22–28].

Por otro lado, existe un obstáculo fundamental al momento de resolver directamente las ecuaciones de flamelet de spray: la aparición de perfiles no monótonos de fracción de mezcla, cuyo valor máximo $Z_{\max}$ es *a priori* desconocido [24, 29]. Esta indeterminación implica que el dominio en el cual deben resolverse las ecuaciones de flamelet tampoco es conocido, impidiendo un cierre matemático del problema y dificultando su resolución numérica directamente en el espacio de composición.

Frente a esta dificultad, la mayoría de los estudios ha optado por abandonar el espacio de composición y resolver las estructuras en el espacio físico, usando la configuración de flujos opuestos [16, 22–28, 30–32], para luego proyectarlas al espacio de composición. Sin embargo, esta estrategia introduce una nueva complicación: se ha demostrado que las llamas en flujos opuestos pueden presentar múltiples estructuras para un mismo conjunto de condiciones de contorno [33–35].

Con el fin de evitar el problema del dominio desconocido, la literatura ha explorado dos estrategias alternativas para resolver las ecuaciones, ambas con limitaciones importantes. La primera consiste en forzar el dominio de la fracción de mezcla entre cero y uno, interpretando el flamelet como una llama gaseosa perturbada por un spray [15, 20], formulación que, hasta antes de esta tesis, se ha restringido a condiciones estacionarias. Sin embargo, bajo esta configuración las estructuras obtenidas presentan un balance dominado principalmente por reacción y difusión [20], característico de llamas gaseosas, mientras que el efecto convectivo inducido por la evaporación, que suele dominar en llamas de spray [16–18], queda relegado a un segundo plano.

La segunda estrategia propone redefinir la coordenada del espacio de composición utilizando variables monótonas por construcción, como la variable de composición efectiva [19] o la fracción de mezcla acumulada [21]. Aunque estas definiciones

resuelven el problema matemático de la no monotonicidad, no existe garantía de que los gradientes de los escalares reactivos se alineen con los gradientes de estas variables [36], condición necesaria para obtener una descripción unidimensional.

En resumen, si bien las ecuaciones de flamelet de spray están presentes en la literatura, las soluciones disponibles son escasas y se restringen a configuraciones muy particulares, lo que impide su estudio sistemático bajo las distintas condiciones relevantes presentes en llamas de spray. Esta limitación no radica en la formulación matemática en sí, sino en la ausencia de herramientas numéricas capaces de resolver de manera robusta el acoplamiento entre la dinámica de las gotas y el flujo gaseoso dentro del marco de flamelets. En este contexto, uno de los desafíos centrales consiste en desarrollar herramientas computacionales que permitan describir consistentemente este acoplamiento, así como definir rigurosamente el dominio del espacio de composición sobre el cual se resuelven las ecuaciones. La presente tesis aborda este problema mediante el desarrollo de estrategias numéricas y códigos computacionales orientados a la obtención de nuevas soluciones de las ecuaciones de flamelet de spray.

1.4. Objetivos

El **objetivo principal** de esta tesis es desarrollar las herramientas numéricas y computacionales que permitan obtener soluciones de las ecuaciones de flamelet de spray bajo condiciones que no han sido abordadas previamente en la literatura. En particular, se consideran: i) flamelets de spray transitorios, y ii) flamelets de spray en dominios de fracción de mezcla no monótonos. Estos objetivos se desarrollan en dos partes:

Parte 1. Desarrollar e implementar una formulación numérica para flamelets de spray con efectos transitorios, basada en el acople explícito de un modelo Lagrangiano de la fase líquida con las ecuaciones de flamelet de la fase gaseosa en el espacio de composición.

Este desarrollo permite superar la restricción de evaporación estacionaria presente en formulaciones previas, habilitando la obtención de soluciones transitorias asociadas a estrategias de inyección discontinua y su estudio bajo condiciones como la extinción y re-ignición.

Parte 2. Desarrollar e implementar una estrategia para la determinación de $Z_{\max}$, a partir de una solución analítica.

Esta estrategia permite definir de manera consistente el dominio de resolución de las ecuaciones de flamelet de spray en el espacio de composición, habilitando la obtención sistemática de soluciones en configuraciones que no habían sido abordadas previamente.

En conjunto, estos desarrollos permiten, por primera vez, la obtención sistemática de soluciones de las ecuaciones de flamelet de spray en configuraciones transitorias y en dominios de composición no monótonos.

A continuación, en el Capítulo 2 se revisa el estado del arte sobre las ecuaciones de flamelet para llamas gaseosas no premezcladas y su extensión a configuraciones con spray. El Capítulo 3 presenta los modelos matemáticos, que incluyen tanto la formulación transitoria de flamelets de spray como aquella asociada a fracciones de mezcla con máximo desconocido.

Sobre la base de estas formulaciones, en el Capítulo 4 se desarrollan los algoritmos de resolución propuestos, los cuales constituyen uno de los aportes centrales de esta tesis. En el Capítulo 5 se presenta la verificación numérica de los códigos implementados, mediante la comparación con configuraciones de referencia y el análisis de sus principales limitaciones.

En el Capítulo 6 se presentan las soluciones de las ecuaciones de flamelet obtenidas con ambos algoritmos. En primer lugar, se estudia la dinámica transitoria de flamelets de spray sometidos a inyección discontinua, mostrando la aparición de soluciones periódicamente oscilantes y analizando la influencia de parámetros como el radio y la velocidad inicial de las gotas. En segundo lugar, se investigan las soluciones de la formulación con fracción de mezcla máxima desconocida, resolviendo las ecuaciones para distintos valores de la tasa de deformación y perfiles de evaporación, y analizando los balances asociados. Finalmente, el Capítulo 7 resume las conclusiones principales del trabajo.

Capítulo 2

Estado del arte

En este capítulo se revisa la literatura respecto a las ecuaciones de flamelet no premezclada. En la primera sección se presentan los fundamentos de la teoría, desde el *flame sheet model* de Burke y Schumann [37] hasta las ecuaciones más recientes para describir llamas gaseosas. Esta base conceptual es indispensable para contextualizar la segunda sección, donde se discute el estado del arte de las ecuaciones de flamelets de spray, sus limitaciones y los desafíos que motivan la presente tesis.

2.1. Ecuaciones de flamelet para llamas gaseosas no premezcladas

En las llamas no premezcladas el combustible y el oxidante ingresan por separado en la cámara de combustión, de modo que el proceso de difusión controla directamente la reacción química. La estructura de este tipo de llamas puede describirse mediante una variable escalar conservada: la fracción de mezcla, Z , que cuantifica la composición local del gas. Esto permite reformular el problema en el espacio de composición, adoptando Z como coordenada independiente. Esta transformación constituye la base de la teoría moderna de flamelets, ya que permite desacoplar parcialmente la complejidad geométrica del flujo de la descripción química de la llama.

2.1.1. *Flame sheet model*

El análisis pionero fue realizado por Burke y Schumann [37], quienes introdujeron el concepto de *flame sheet*. En su trabajo, la mezcla de combustible y oxidante se

encuentra completamente controlada por los procesos difusivos, y la reacción química se asume infinitamente rápida. Esta hipótesis implica que, en cuanto combustible y oxidante se encuentran, reaccionan de manera instantánea.

Como consecuencia, la región donde efectivamente ocurre la combustión colapsa en una superficie de espesor nulo, la *flame sheet*, que actúa como frontera entre dos dominios mutuamente excluyentes: uno donde únicamente existe combustible (y los productos de la reacción) y otro donde solo persiste oxidante (y los productos). Esta idealización no solo simplifica el problema físico, sino que también permite representar la cinética química mediante una única reacción global



donde F es el combustible, Ox el oxidante, P los productos y s es el coeficiente estequiométrico. Además, las tasas de reacción para el combustible, el oxidante y la temperatura, $\dot{\omega}_F$, $\dot{\omega}_{Ox}$ y $\dot{\omega}_T$, respectivamente, y el calor liberado por la reacción Q , pueden relacionarse a través de

$$\dot{\omega}_{Ox} = s\dot{\omega}_F \quad \text{y} \quad \dot{\omega}_T = -Q\dot{\omega}_F. \quad (2.2)$$

Usando estas relaciones, junto con la Ley de Fick para la difusión de las especies químicas, las ecuaciones de conservación para las fracciones másicas de combustible Y_F , oxidante Y_{Ox} y energía (expresada en términos de la temperatura T) se escriben como [7, 38]

$$\frac{\partial(\rho Y_F)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} Y_F) = \nabla \cdot (\rho D_F \nabla Y_F) + \dot{\omega}_F, \quad (2.3)$$

$$\frac{\partial(\rho Y_{Ox})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} Y_{Ox}) = \nabla \cdot (\rho D_{Ox} \nabla Y_{Ox}) + s\dot{\omega}_F \quad (2.4)$$

y

$$\frac{\partial(\rho T)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} T) = \nabla \cdot \left(\frac{\lambda}{C_p} \nabla T \right) - \frac{Q}{C_p} \dot{\omega}_F, \quad (2.5)$$

donde ρ es la densidad del gas, $\mathbf{u}$ es el campo de velocidades, D_F y D_{Ox} son los coeficientes de difusión del combustible y el oxidante, respectivamente, λ es la conductividad térmica y C_p es el calor específico a presión constante.

El siguiente paso clave consiste en asumir que los coeficientes de difusión

molecular y térmica son idénticos

$$D_F = D_{Ox} = \frac{\lambda}{\rho C_p} = D. \quad (2.6)$$

Este supuesto no solo simplifica el análisis, sino que habilita la construcción de combinaciones lineales de Y_F , Y_{Ox} y T que eliminan el término fuente asociado a las reacciones químicas. Estas combinaciones, conocidas como variables de Shvab-Zeldovich, se definen como

$$z_1 = sY_F - Y_{Ox}, \quad (2.7)$$

$$z_2 = \frac{C_p T}{Q} + Y_F, \quad (2.8)$$

$$z_3 = \frac{sC_p T}{Q} + Y_{Ox}. \quad (2.9)$$

Al sustituir estas variables en las ecuaciones de transporte, Ecs. (2.3)-(2.5), se obtiene que cada z_j satisface exactamente la misma ecuación de convección-difusión sin términos de reacción. Es decir

$$\frac{\partial(\rho z_j)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} z_j) = \nabla \cdot (\rho D \nabla z_j). \quad (2.10)$$

Al reducir la reacción a una discontinuidad infinitamente delgada, todas las dificultades de la cinética química desaparecen, permitiendo representar el sistema completo mediante ecuaciones lineales.

Sin embargo, aunque las tres variables z_j están gobernadas por la misma ecuación de transporte, Ec. (2.10), no comparten las mismas condiciones de contorno. En la entrada de oxidante (subíndice 0), se tiene

$$z_1 = -Y_{Ox,0}, \quad z_2 = \frac{C_p T_0}{Q}, \quad z_3 = \frac{sC_p T_0}{Q} + Y_{Ox,0}, \quad (2.11)$$

mientras que en la entrada de combustible (subíndice 1)

$$z_1 = sY_{F,1}, \quad z_2 = \frac{C_p T_1}{Q} + Y_{F,1}, \quad z_3 = \frac{sC_p T_1}{Q}. \quad (2.12)$$

Para resolver esta disparidad, se introduce una normalización lineal para cada

variable z_j utilizando sus respectivos valores en los flujos de entrada [7, 38]

$$Z_j = \frac{z_j - z_{j,0}}{z_{j,1} - z_{j,0}}. \quad (2.13)$$

Esta transformación convierte a todas las variables normalizadas Z_j en cantidades que satisfacen no solo la misma ecuación de convección-difusión, sino también las mismas condiciones de contorno: $Z_j = 0$ en la entrada de oxidante y $Z_j = 1$ en la de combustible. Dado que obedecen la misma ecuación lineal y las mismas condiciones de borde, por el principio de unicidad se tiene

$$Z = Z_1 = Z_2 = Z_3. \quad (2.14)$$

Esta variable escalar única es la fracción de mezcla, la cual caracteriza completamente la composición local del gas dentro del marco del *flame sheet*. Su relevancia conceptual es enorme ya que permite transformar un problema tridimensional en el espacio físico en un problema unidimensional en el de composición.

Dado que se está bajo la hipótesis de química infinitamente rápida, los reactivos no pueden coexistir y reaccionan inmediatamente al entrar en contacto dentro de una zona de reacción infinitamente delgada. En consecuencia, la llama queda compuesta por regiones separadas por la superficie estequiométrica, Z_{st} : una rica en oxidante ($Z < Z_{st}$), donde no hay combustible, y otra rica en combustible ($Z > Z_{st}$), donde no hay oxidante. Esto permite relacionar las fracciones másicas de las especies y la temperatura directamente con Z y con las condiciones de entrada de las corrientes de oxidante y combustible. Al reemplazar las condiciones de borde de los z_j , Ecs. (2.11) y (2.12), en la Ec. (2.13), y considerando que en Z_{st} no hay ni combustible ni oxidante, las variables termoquímicas pueden expresarse como funciones lineales por tramos de la fracción de mezcla [6, 7, 38]. En la región pobre en combustible ($Z < Z_{st}$), los perfiles son

$$Y_F(Z) = 0, \quad (2.15)$$

$$Y_{Ox}(Z) = Y_{Ox,0} \left(1 - \frac{Z}{Z_{st}} \right), \quad (2.16)$$

$$T(Z) = (1 - Z)T_0 + ZT_1 + \frac{QY_{F,1}}{C_p}Z, \quad (2.17)$$

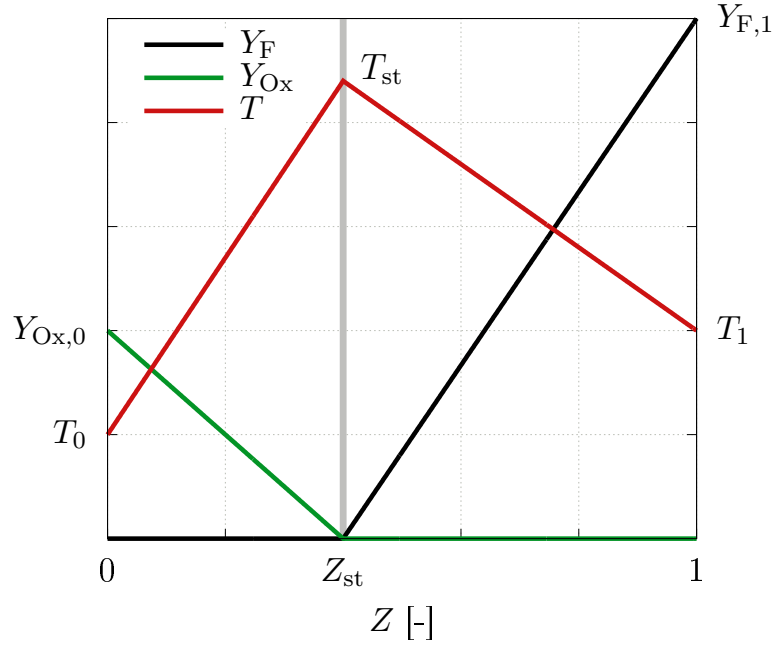


Figura 2.1: Solución de Burke-Schumann en función de la fracción de mezcla.

mientras que en la región rica en combustible ($Z > Z_{st}$) se obtiene

$$Y_F(Z) = Y_{F,1} \left(\frac{Z - Z_{st}}{1 - Z_{st}} \right), \quad (2.18)$$

$$Y_{Ox}(Z) = 0, \quad (2.19)$$

$$T(Z) = (1 - Z)T_0 + ZT_1 + \frac{QY_{F,1}}{C_p} Z_{st} \frac{(1 - Z)}{(1 - Z_{st})}. \quad (2.20)$$

La Fig. 2.1 ilustra esquemáticamente estas soluciones, mostrando los perfiles característicos para las especies y el perfil de temperatura con su máximo en la posición estequiométrica.

Si bien el *flame sheet model* es fundamental desde un punto de vista conceptual, posee una importante limitación: la hipótesis de química infinitamente rápida. Esta simplificación impide describir fenómenos controlados por la cinética química, como la extinción, evidenciando la necesidad de incorporar zonas de reacción de espesor finito. No obstante, la relevancia del modelo de Burke-Schumann no reside en su precisión predictiva, sino en la idea fundamental que introduce. Demostró que es posible caracterizar la compleja estructura termoquímica de una llama no premezclada mediante un único escalar conservado: la fracción de mezcla. Esta idea constituye

la piedra angular sobre la que se construyen los modelos de flamelet modernos, que incorporan química detallada. Dada la centralidad de este concepto, antes de introducir las ecuaciones de flamelet se dedicará la siguiente sección a definir con rigor la fracción de mezcla.

2.1.2. Fracción de mezcla

La definición de la fracción de mezcla debe ser consistente con el nivel de detalle usado en la descripción química. La formulación más clásica, derivada de la variable de Shvab-Zeldovich, z_1 , (ver Ec. (2.7)) y válida para una reacción global de un paso, se construye a partir de las fracciones másicas de los reactantes principales

$$Z = \frac{sY_F - Y_{Ox} + Y_{Ox,0}}{sY_{F,1} + Y_{Ox,0}}. \quad (2.21)$$

Sin embargo, esta definición se vuelve inadecuada cuando se emplean mecanismos de reacción detallados. En una llama real, el combustible no se convierte instantáneamente en los productos finales, sino que se logra mediante múltiples reacciones elementales que generan especies intermedias, como CO o H₂, cuya dinámica puede dominar amplias regiones de la llama. En zonas donde el combustible ya se ha consumido ($Y_F = 0$) pero aún existen especies intermedias, la definición clásica de Z deja de reflejar cambios reales en la composición. La variable deja de ser sensible a cambios adicionales en la composición, perdiendo su capacidad de parametrizar el estado local de la mezcla. Por lo tanto, deja de ser útil como coordenada del espacio de composición.

Dado que las reacciones químicas no crean ni destruyen átomos, la alternativa consiste en definir la fracción de mezcla a partir de una magnitud conservada en cualquier proceso químico: la fracción másica de algún elemento químico.

Una de las primeras aplicaciones de este principio fue la de Masri et al. [39], quienes propusieron una formulación para llamas de metano (CH₄) basada en el balance de hidrógeno

$$Z = \frac{Y_H - Y_{H,0}}{Y_{H,1} - Y_{H,0}}, \quad (2.22)$$

donde $Y_{H,0}$ y $Y_{H,1}$ son las fracciones másicas totales del hidrógeno en las entradas de oxidante y combustible, respectivamente. La fracción másica local de ese elemento, Y_H , se puede expresar como la suma de las contribuciones de todas las especies que

contienen de hidrógeno [39]

$$Y_H = \frac{4W_H}{W_{CH_4}}Y_{CH_4} + \frac{2W_H}{W_{H_2O}}Y_{H_2O} + \frac{2W_H}{W_{H_2}}Y_{H_2} \quad (2.23)$$

Aquí, W_k representa la masa molecular (o atómica) de la especie (o elemento) k . Con la Ec. (2.23) se garantiza que Z actúe como un indicador adecuado del estado de la mezcla, independientemente del mecanismo de reacción.

Más adelante, Bilger [40] generalizó este enfoque para proponer una fracción de mezcla aplicable a cualquier hidrocarburo. El principio consiste en construir un escalar como una combinación lineal de las fracciones másicas de los elementos carbono, hidrógeno y oxígeno (C, H y O, respectivamente), ponderadas de forma que tome valor nulo en el flujo de oxidante y unitario en el flujo de combustible.

Para un combustible genérico $C_{\nu_C}H_{\nu_H}O_{\nu_O}$, su formulación es

$$Z = \frac{\left(\frac{2Y_C}{\nu_C W_C} + \frac{Y_H}{2\nu_H W_H} - \frac{Y_O}{\nu_O W_O} \right) - \left(-\frac{Y_{O,0}}{\nu_O W_O} \right)}{\left(\frac{2Y_{C,1}}{\nu_C W_C} + \frac{Y_{H,1}}{2\nu_H W_H} \right) - \left(-\frac{Y_{O,0}}{\nu_O W_O} \right)}, \quad (2.24)$$

donde los subíndices 0 y 1 denotan las condiciones en las entradas de oxidante y combustible, respectivamente. Este enfoque asegura que Z evolucione suavemente de 0 a 1 a través de la llama, incluso con mecanismos de reacción detallados.

No obstante, la formulación más general de la fracción de mezcla se obtiene directamente a partir del principio de conservación de masa de los elementos. Para ello, se define primero la fracción másica de un elemento cualquiera, ξ_j , donde j indica el elemento, como la suma de las contribuciones de todas las N especies químicas que lo contienen

$$\xi_j = \frac{m_j}{m} = \sum_{i=1}^N \frac{a_{ij}W_j}{W_i}Y_i. \quad (2.25)$$

con a_{ij} siendo el número de átomos del elemento j en la especie i e Y_i la fracción másica de la especie i . Esta cantidad es estrictamente conservada, por lo que puede normalizarse para construir un escalar entre 0 y 1

$$Z_j = \frac{\xi_j - \xi_{j,0}}{\xi_{j,1} - \xi_{j,0}}. \quad (2.26)$$

Las definiciones de Masri et al. [39] o Bilger [40] pueden interpretarse como

combinaciones lineales de estos escalares elementales [6, 41], lo que demuestra la generalidad de este marco.

En la combustión de hidrocarburos y alcoholes es habitual escoger el carbono como elemento indicador, ya que está directamente asociado al combustible. Por ello, en adelante denotaremos por Z la fracción de mezcla basada en carbono, Z_C .

La utilidad de esta definición es que su ecuación de transporte no contiene términos fuente. Para derivarla, se parte del balance de masa para cada especie k

$$\rho \frac{\partial Y_k}{\partial t} + \rho \mathbf{u} \cdot \nabla Y_k = -\nabla \cdot (\rho \mathbf{V}_k Y_k) + \dot{\omega}_k, \quad (2.27)$$

donde $\mathbf{V}_k$ es la velocidad de difusión de la especie k . Aquí se adoptará la ley de Fick, $\mathbf{V}_k = -D_k/Y_k \nabla Y_k$, donde D_k es el coeficiente de difusión de la especie, aunque este modelo de difusión puede reemplazarse por otros más complejos, como se muestra en el trabajo de Olguin y Gutheil [18] para llamas con spray.

El paso clave consiste en tomar una combinación lineal de estas ecuaciones de conservación, Ec. (2.27), ponderándolas por la masa de carbono presente en cada especie. Tras multiplicar por $a_{Ck}W_C/W_k$ y sumar sobre todas las especies ($k = 1, \dots, N$), se obtiene la ecuación de balance para la fracción másica elemental de carbono, ξ

$$\rho \frac{\partial \xi}{\partial t} + \rho \mathbf{u} \cdot \nabla \xi = \nabla \cdot \left(\rho \sum_{k=1}^N \frac{a_{Ck}W_C}{W_k} D_k \nabla Y_k \right). \quad (2.28)$$

Notablemente, la suma ponderada de los términos fuente debido a las reacciones químicas es igual a cero. Esto no es una aproximación, sino una consecuencia directa del principio de conservación de masa de las especies en las reacciones químicas.

El término difusivo (lado derecho de la Ec. 2.28) es complejo, pues constituye una suma ponderada sobre todas las especies. Para simplificarlo, se adopta la hipótesis clásica de coeficiente de difusión iguales, $D_k = D_Z$. Con ello, y tras normalizar ξ , la ecuación de transporte para Z toma la forma

$$\rho \frac{\partial Z}{\partial t} + \rho \mathbf{u} \cdot \nabla Z = \nabla \cdot (\rho D_Z \nabla Z). \quad (2.29)$$

Esta derivación pone de manifiesto un dilema conceptual: la ecuación canónica para Z requiere asumir coeficientes de difusión idénticos, lo cual contradice la física real, ya que las especies difunden a velocidades distintas ($Le_k \neq 1$).

Para resolver esta paradoja, Pitsch y Peters [12] propusieron definir Z directamente

como un escalar que, por construcción satisfaga la ecuación de transporte, Ec. (2.29), sin necesidad de derivarlo a partir de los elementos. Con este enfoque, se evita la hipótesis de $Le = 1$, pero a cambio Z se desacopla de su significado físico tradicional. Por ejemplo, el valor de Z correspondiente a la mezcla estequiométrica deja de ser un valor fijo, sino que un parámetro del campo escalar Z .

De esta forma, ya sea definido a partir de la conservación de un elemento (bajo $Le = 1$) o siguiendo la propuesta de Pitsch y Peters, Z constituye una coordenada robusta del espacio de composición y permite formular las ecuaciones de flamelet en dicho espacio.

2.1.3. Ecuaciones de flamelet para llamas gaseosas no premezcladas

La derivación de las ecuaciones de flamelet, propuestas originalmente por Peters [10], se basa en una transformación de las ecuaciones de transporte desde el espacio físico $(\mathbf{x}, t)$ al espacio de composición (Z, Z_2, Z_3, τ) . Este cambio de coordenadas constituye el paso central de la formulación, ya que permite describir la estructura interna de la llama siguiendo la variación de los escalares reactivos a lo largo de la fracción de mezcla, Z . Dicha descripción se realiza desde la zona con solo oxidante ($Z = 0$) hasta la de puro combustible ($Z = 1$). Para completar el sistema de coordenadas, se introducen dos variables adicionales, Z_2 y Z_3 , que parametrizan las direcciones tangenciales a la superficie de llama, junto con la coordenada temporal transformada τ .

Matemáticamente, este cambio de coordenada se realiza mediante la regla de la cadena aplicada a los operadores diferenciales temporales y espaciales. Las transformaciones correspondientes son

$$\frac{\partial(\cdot)}{\partial t} = \frac{\partial(\cdot)}{\partial \tau} + \frac{\partial Z}{\partial t} \frac{\partial(\cdot)}{\partial Z} + \sum_{n=2}^3 \frac{\partial Z_n}{\partial t} \frac{\partial(\cdot)}{\partial Z_n}, \quad (2.30)$$

$$\nabla(\cdot) = \nabla Z \frac{\partial(\cdot)}{\partial Z} + \sum_{n=2}^3 \nabla Z_n \frac{\partial(\cdot)}{\partial Z_n}. \quad (2.31)$$

Es importante destacar que esta transformación es exacta, no introduce aproximaciones física ni simplificaciones. Solo reescribe las mismas ecuaciones de conservación en un sistema coordinado más adecuado para describir este tipo de estructuras.

Una vez establecida la transformación matemática, la simplificación clave del modelo que permite asumir una estructura unidimensional consiste en considerar que el flamelet opera bajo condiciones de alto número de Damköhler ($Da \gg 1$). En este régimen, la escala temporal de la química es mucho menor que la del flujo, por lo que la reacción se encuentra confinada en una zona extremadamente delgada en la vecindad de la superficie estequiométrica. Si, además, el espesor de esta capa es pequeño en comparación con la escala de Kolmogorov, la estructura de la llama queda dentro de un campo de flujo localmente cuasi-laminar. En estas condiciones, los gradientes dominantes se concentran en la dirección normal a la superficie de la llama (dirección de ∇Z), mientras que los gradientes tangenciales pueden despreciarse.

Asumiendo además un número de Lewis unitario para todas las especies ($Le_k = 1$) y propiedades termofísicas constantes, al aplicar este cambio de coordenadas a las ecuaciones gobernantes de las especies químicas y la temperatura, las ecuaciones de flamelet, presentadas por Peters [10], son

$$\rho \frac{\partial Y_k}{\partial \tau} = \rho \frac{\chi}{2} \frac{\partial^2 Y_k}{\partial Z^2} + \dot{\omega}_k, \quad (2.32)$$

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial \tau} = \rho C_p \frac{\chi}{2} \frac{\partial^2 T}{\partial Z^2} + \dot{\omega}_T. \quad (2.33)$$

En estas ecuaciones se describe la evolución de la estructura interna del flamelet sometido a una deformación impuesta por el flujo externo, cuantificada por la tasa de disipación escalar

$$\chi = 2D_Z |\nabla Z|^2. \quad (2.34)$$

Esta variable acopla la microestructura de la llama con el campo de flujo externo. Con dimensiones de uno sobre tiempo, χ puede interpretarse como el inverso del tiempo característico de la difusión a través de la estructura del flamelet. La respuesta de la llama frente a variaciones en χ se representa mediante la “curva en forma de S” [10] (Fig. 2.2), que relaciona χ_{st} , la tasa de disipación evaluada en el punto estequiométrico, con la temperatura máxima del flamelet. La parte superior de la curva corresponde a las soluciones de llama encendida y estable. A medida que χ_{st} aumenta, la llama se debilita y su temperatura máxima disminuye hasta alcanzar un punto de inflexión crítico, conocido como el límite de extinción (χ_q). Una vez que se supera este valor crítico, la conducción de calor hacia ambos lados no puede ser compensada por la

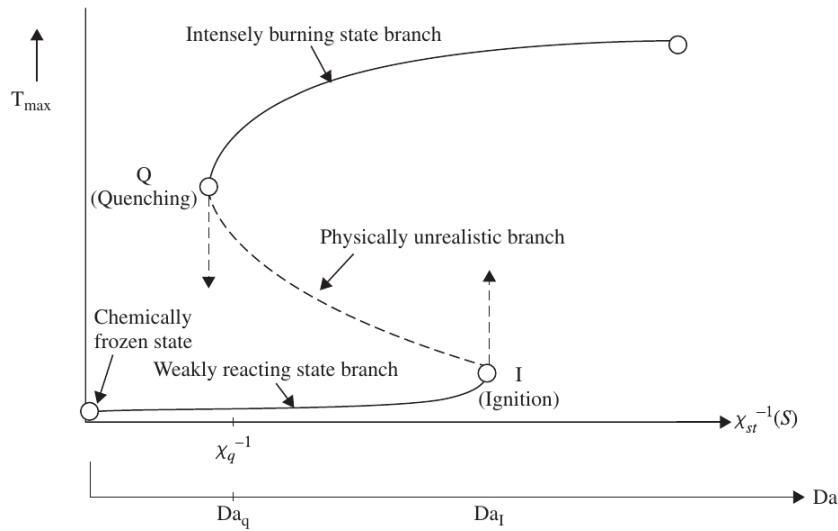


Figura 2.2: Curva en forma de S. Q e I representan los límites de extinción e ignición respectivamente [41].

generación de calor por la reacción química, extinguiendo la llama.

La “curva en forma de S” no solo describe la respuesta de la llama al estiramiento, sino que revela cinco regímenes de comportamiento físico distintos, identificados por Peters [10]. Estos se pueden clasificar en dos grandes categorías: los estados estables, que constituyen la base de los modelos estándar, y los estados transitorios, que describen procesos dinámicos como la ignición y la extinción. Dichos estados, se muestran esquemáticamente en la Fig. 2.2, y se explican en detalle a continuación.

Estados estacionarios y cuasi-estacionarios. Los estados más conocidos corresponden a estas dos ramas de la curva. La rama inferior representa la mezcla no reactiva (estado 1), una solución trivial de mezclado puro. La rama superior corresponde a los estados de combustión cuasi-estacionaria (estado 2). En esta rama los términos transitorios son despreciables, por lo que una descripción estacionaria es suficiente. Por esta razón, estas estructuras de flamelet se utilizan para construir las librerías de los modelos ya consolidados, que han sido aplicados con gran éxito en la simulación de llamas turbulentas gaseosas [42–57].

Estados transitorios: ignición, extinción y re-ignición. Los estados restantes describen procesos inherentemente transitorios y de mayor complejidad, lo que ha dificultado su estudio sistemático. En primer lugar, la ignición (estado 3) conecta la

rama inferior con la superior, dando lugar a la formación de una llama encendida a partir de una mezcla no reactiva. Este estado ha comenzado a recibir mayor atención en trabajos recientes [58, 59]. Por otra parte, el proceso de extinción (estado 4), que ocurre al superar el límite χ_q , y la re-ignición (estado 5), que puede producirse si la tasa de disipación escalar disminuye durante un evento de extinción, suelen analizarse de manera conjunta y han sido estudiados de forma más extensa en la literatura [48, 60–65]. De manera análoga a los modelos estacionarios, algunos trabajos pioneros han explorado la construcción de librerías de flamelets transitorios para su uso en simulaciones de llamas turbulentas [60, 66–68], aunque esta área sigue siendo un campo de investigación activo.

Las ecuaciones de Peters, Ecs. (2.32) y (2.33), han servido como punto de partida para numerosas extensiones que buscan incorporar una física más detallada. Una de las más significativas es la inclusión de efectos de difusión diferencial, abordada por Pitsch y Peters [12]. Para ello, se reemplaza la simple ley de Fick por un modelo de difusión multicomponente más detallado, como la aproximación de Curtiss-Hirschfelder [69], con una velocidad de corrección $\mathbf{V}^C$ para asegurar la conservación de la masa [70]

$$\mathbf{V}_k = -\frac{1}{X_k} D_k \nabla X_k + \underbrace{\sum_{j=1}^N \frac{Y_j}{X_j} D_j \nabla X_j}_{\mathbf{V}^C}, \quad (2.35)$$

donde X_k es la fracción molar de la especie k . La incorporación de esta descripción más precisa del transporte da lugar a ecuaciones de flamelet considerablemente más complejas, que incluyen términos adicionales relacionados con la variación del peso molecular medio ($\bar{W}$)

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial Y_k}{\partial \tau} = & \frac{\rho}{\text{Le}_k} \frac{\chi}{2} \frac{\partial^2 Y_k}{\partial Z^2} + \dot{\omega}_k + \frac{\rho}{\text{Le}_k} \frac{\chi}{2} \frac{Y_k}{\bar{W}} \frac{\partial^2 \bar{W}}{\partial Z^2} - \sqrt{\frac{\chi}{2D_Z}} \frac{\partial}{\partial Z} \left(\rho \sqrt{\frac{\chi}{2D_Z}} V_Z^C Y_k \right) \\ & - \sqrt{\frac{\chi}{2D_Z}} \frac{\partial}{\partial Z} \left(\rho D_Z \left(\frac{\text{Le}_k - 1}{\text{Le}_k} \right) \sqrt{\frac{\chi}{2D_Z}} \right) \frac{\partial Y_k}{\partial Z} \\ & - \sqrt{\frac{\chi}{2D_Z}} \frac{\partial}{\partial Z} \left(\rho D_Z \frac{Y_k}{\bar{W}} \sqrt{\frac{\chi}{2D_Z}} \right) \frac{\partial \bar{W}}{\partial Z}. \end{aligned} \quad (2.36)$$

Otra de las extensiones más importantes es la inclusión de efectos inducidos por cambios en la dirección del frente de llama [71, 72], caracterizados por la curvatura de

las isosuperficies de fracción de mezcla, $\kappa_Z = -\nabla \cdot \mathbf{n}_Z$, donde $\mathbf{n}_Z$ es el vector normal a dichas superficies. La ecuación de flamelet para las especies químicas, considerando únicamente este efecto adicional, es [71]

$$\rho \frac{\partial Y_k}{\partial \tau} = \frac{\rho}{Le_k} \frac{\chi}{2} \frac{\partial^2 Y_k}{\partial Z^2} + \dot{\omega}_k + \rho \sqrt{\frac{D_Z \chi}{2}} \kappa_Z \frac{\partial Y_k}{\partial Z}. \quad (2.37)$$

Versiones que incorporan simultáneamente difusión diferencial y curvatura están disponibles en la literatura [72]. Además de las ya mencionadas, otros trabajos han ampliado progresivamente las ecuaciones de flamelet para capturar efectos adicionales relevantes en configuraciones prácticas. Entre estas extensiones se encuentran:

- **Transporte térmico:** incorporación del efecto Soret (termodifusión) en la definición de la velocidad de difusión de las especies químicas [73].
- **Configuraciones complejas:** adaptación a sistemas con múltiples entradas de combustible u oxidante [42, 74, 75].
- **Efectos no adiabáticos:** extensión de la formulación para usar la fracción de mezcla y una entalpía modificada como coordenadas [53].

Esta capacidad de extensión, tanto para análisis estacionarios [48, 76] como transitorios [48, 58–65], ha consolidado a la teoría de flamelets como una de las herramientas más poderosas y versátiles para el estudio de llamas no premezcladas.

Para cerrar el sistema de ecuaciones de flamelet es necesario proporcionar una clausura para la tasa de disipación escalar. Para configuraciones de flujo idealizadas, es posible obtener soluciones analíticas para χ directamente a partir de la ecuación de transporte de Z (Ec. (2.29)). Estos casos canónicos son la capa de mezcla y la llama de contraflujo.

Capa de mezcla transitoria (Unsteady mixing layer). Este caso representa la interacción de dos flujos paralelos sin un campo de velocidad convectivo impuesto, donde el mezclado es puramente difusivo. Al despreciar el término convectivo en la Ec. (2.29) y asumir $\rho^2 D_Z = (\rho^2 D_Z)_{\text{ref}}$, la solución para la evolución temporal de χ es [10]

$$\chi(Z, t) = \frac{1}{2\pi t} \exp \left[-2(\text{erfc}^{-1}(2Z))^2 \right]. \quad (2.38)$$

Llama de flujos opuestos estacionaria. Este caso es de mayor relevancia práctica, pues describe una llama en un campo de deformación. Modelando el campo de velocidad como un flujo potencial estacionario ($u = -ax$, donde a es la tasa de deformación) y manteniendo la suposición sobre $\rho^2 D_Z = (\rho^2 D_Z)_{\text{ref}}$, la solución para χ se vuelve independiente del tiempo y depende únicamente de la tasa de deformación a [10]

$$\chi(Z) = \frac{a}{\pi} \exp \left[-2(\text{erfc}^{-1}(2Z))^2 \right]. \quad (2.39)$$

Esta última expresión es fundamental, ya que relaciona directamente un parámetro del flujo (a) con la variable que controla la microestructura de la llama (χ), sirviendo como base para muchos modelos de combustión turbulenta.

Un enfoque alternativo, más flexible que las soluciones analíticas, consiste en resolver una ecuación de transporte para la propia tasa de disipación escalar. Hasse y Peters [42] fueron pioneros en esta área al derivar una ecuación para χ

$$\frac{\partial \chi}{\partial \tau} + \frac{1}{4} \left(\frac{\partial \chi}{\partial Z} \right)^2 - 2a\chi = \frac{\chi}{2} \frac{\partial^2 \chi}{\partial Z^2}. \quad (2.40)$$

En esta formulación, la tasa de deformación a actúa como un parámetro de entrada que modela la influencia del flujo externo.

La principal ventaja del enfoque basado en ecuaciones de transporte es su capacidad para incorporar sistemáticamente una física más compleja. Un ejemplo notable es el trabajo de Scholtissek et al. [43], quienes extendieron el modelo para incluir efectos de difusividad variable (ρD_Z variable) y de curvatura de la llama (κ_Z). Esto conduce a una ecuación de transporte significativamente más elaborada para una variable relacionada, $\hat{\chi} = (\nabla Z)^2 = \chi/2D_Z$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{\chi}}{\partial \tau} = & -\frac{D_Z}{2} \left(\frac{\partial \hat{\chi}}{\partial Z} \right)^2 + \hat{\chi} \frac{\partial}{\partial Z} \left(D_Z \frac{\partial \hat{\chi}}{\partial Z} \right) + \frac{\hat{\chi}}{\rho} \frac{\partial(\rho D_Z)}{\partial Z} \frac{\partial \hat{\chi}}{\partial Z} + 2\hat{\chi}^2 \frac{\partial}{\partial Z} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial(\rho D_Z)}{\partial Z} \right) \\ & - 2\hat{\chi}^{3/2} \kappa_Z \frac{\partial D_Z}{\partial Z} - 2\hat{\chi}^{2/3} D_Z \frac{\partial \kappa_Z}{\partial Z} - 2a\hat{\chi}. \end{aligned} \quad (2.41)$$

Esta madurez en las formulaciones de flamelet para llamas gaseosas contrasta marcadamente con el estado del arte para llamas de spray. Si bien se han propuesto extensiones para incorporar la presencia de la fase líquida, los estudios disponibles son considerablemente más limitados y se restringen, en su mayoría, a configuraciones simplificadas. En este contexto, el estudio de flamelets de spray bajo condiciones más

generales, incluyendo efectos transitorios y configuraciones con fracciones de mezcla no monótonas, presenta desafíos significativos que aún no han sido abordados de manera sistemática en la literatura.

2.2. Ecuaciones de flamelet para llamas de spray

La extensión de las ecuaciones de flamelets para incorporar los efectos de evaporación constituye un área de investigación relativamente reciente [15–21]. En todas estas propuestas, el punto de partida continúa siendo el uso de la fracción de mezcla como coordenada. Esta elección persiste incluso en configuraciones donde la evaporación puede generar zonas localmente premezcladas, lo que introduce un desafío conceptual y matemático [18].

La modificación fundamental al pasar de llamas gaseosas a llamas con spray es la inclusión explícita de la evaporación de las gotas. Este proceso introduce un término fuente adicional en la ecuación de transporte de la fracción de mezcla [15, 16], lo que implica que esta deje de ser un escalar conservado

$$\rho \frac{\partial Z}{\partial t} + \rho \mathbf{u} \cdot \nabla Z = \nabla \cdot (\rho D_Z \nabla Z) + \dot{S}_v(1 - Z), \quad (2.42)$$

donde $\dot{S}_v$ representa la fuente de masa debido a la evaporación. En consistencia con la ecuación de fracción de mezcla, las ecuaciones para las fracciones másicas de las especies químicas, Y_k , y la temperatura, T , incorporan términos fuente adicionales que representan la interacción con la fase líquida [20]

$$\begin{aligned} g_Z^2 \rho \frac{D_Z}{Le_k} \frac{d^2 Y_k}{dZ^2} = & -\dot{\omega}_k + \frac{dY_k}{dZ} g_Z \frac{d}{dZ} \left(\rho D_Z \left(\frac{Le_k - 1}{Le_k} \right) g_Z \right) + g_Z \frac{d(\tilde{V}_{kZ} g_Z)}{dZ} \\ & + \frac{dY_k}{dZ} \dot{S}_v(1 - Z) - \dot{S}_v(\delta_{kL} - Y_k), \end{aligned} \quad (2.43)$$

y

$$\begin{aligned} g_Z^2 \rho D_Z C_p \frac{d^2 T}{dZ^2} = & -\dot{\omega}_T - \frac{dT}{dZ} g_Z^2 \rho D_Z \frac{dC_p}{dZ} + g_Z^2 \rho \frac{dT}{dZ} \sum_{k=1}^N (C_{pk} V_{kZ} Y_k) \\ & + C_p \frac{dT}{dZ} \dot{S}_v(1 - Z) - \dot{S}_e, \end{aligned} \quad (2.44)$$

donde V_{kZ} y $\tilde{V}_{kZ}$ representan velocidades de difusión, $\dot{S}_e$ es la fuente de energía debido

a la evaporación, y δ_{kL} es el delta de Kronecker, con L denotando la especie gaseosa asociada a la fase líquida, normalmente el combustible.

En conjunto, estas modificaciones introducen un mayor grado de acoplamiento y complejidad en el sistema de ecuaciones de flamelet. En este contexto, la presencia de los términos de evaporación hace particularmente relevante un cierre adecuado para la tasa de disipación escalar, χ .

Dentro de las formulaciones más recientes, Olguin et al. [20], siguiendo la sugerencia de Scholtissek et al. [77], cierran la tasa de disipación escalar, χ , mediante una ecuación de transporte para el gradiente de la fracción de mezcla, $g_Z = |\nabla Z|$. Este cierre no es un detalle menor: al utilizar g_Z como variable de entrada del flamelet, se obtiene un sistema de ecuaciones que, aunque sigue siendo altamente acoplado y no lineal, resulta más robusto y computacionalmente manejable que si se intentara derivar una ecuación de transporte para χ en presencia del término de evaporación.

La ecuación para el gradiente de la fracción de mezcla, g_Z , describe cómo la propia estructura de la llama es afectada tanto por el flujo como por la evaporación [20]

$$\begin{aligned} g_Z^2 \rho D_Z \frac{d^2 g_Z}{dZ^2} = & g_Z \hat{a} - g_Z^3 \frac{d^2(\rho D_Z)}{dZ^2} - 2g_Z^2 \frac{d(\rho D_Z)}{dZ} \frac{dg_Z}{dZ} \\ & + \frac{dg_Z}{dZ} \dot{S}_v(1-Z) - g_Z \frac{d}{dZ}(\dot{S}_v(1-Z)), \end{aligned} \quad (2.45)$$

donde $\hat{a} = \mathbf{n}_Z \cdot \nabla(\rho \mathbf{u}) \cdot \mathbf{n}_Z$ es una tasa de deformación modificada que, como en el caso gaseoso, funciona como un parámetro de entrada del modelo. Resulta significativo que, al anular todos los términos asociados a la evaporación ($\dot{S}_v = 0$ y $\dot{S}_e = 0$), el sistema completo se reduzca idénticamente a la formulación para llamas gaseosas con difusión diferencial de Pitsch y Peters [12], lo que constituye una validación fundamental del modelo, como demuestran Olguin et al. [20].

La resolución directa de este sistema de ecuaciones altamente acoplado ha puesto en evidencia numerosos desafíos. Los primeros estudios [16–18] no buscaron resolver las ecuaciones en el espacio de composición, sino que realizaron un análisis *a priori* utilizando datos de simulaciones estacionarias en el espacio físico. Este enfoque reveló un punto clave: Olguin y Gutheil [16] demostraron que la estructura clásica de difusión-reacción de los flamelets gaseosos puede ser alterada de manera sustancial por la evaporación, hasta el punto de que los términos relacionados con la fase líquida pueden dominar la física del flamelet.

Posteriormente, diversos trabajos lograron resolver las ecuaciones de flamelet en

el espacio de composición [15, 19–21]. Sin embargo, esto fue posible mediante una simplificación importante: la dinámica de las gotas no se resolvía de forma acoplada. En lugar de ello, se imponían perfiles de evaporación estacionarios prescritos, lo que elimina la retroalimentación entre la fase líquida y la fase gaseosa. Por esta razón, estas formulaciones no capturan la complejidad física real del acople bidireccional. En virtud de lo anterior, la literatura carece aún de una solución de las ecuaciones de flamelet de sprays que incluya un tratamiento dinámico, autoconsistente y completamente acoplado de la fase líquida.

Adicionalmente, existe otro obstáculo: la no monotonicidad de la fracción de mezcla. Más específicamente, en una llama de spray de flujos opuestos se inyecta oxidante (aire) por ambos lados, mientras que el combustible líquido se introduce únicamente por uno de ellos. La evaporación añade combustible gaseoso dentro del dominio, dando lugar a un perfil de Z que presenta un máximo $Z_{\max}$ desconocido, ubicado en el interior de la configuración, y que decrece hacia ambos bordes hasta alcanzar $Z = 0$ (ver Z_g en la imagen de la izquierda de la Fig. 2.3). Dado que esta curva no es monótona, Z deja de ser una coordenada adecuada. Un mismo valor de Z puede corresponder a estados termoquímicos distintos dependiendo de si se encuentra en la parte creciente o decreciente del perfil, lo que invalida la formulación tradicional del flamelet.

Con el fin de evitar esta singularidad, Luo et al. [15] y Olguin et al. [20] optaron por imponer la evaporación sobre una llama gaseosa ya establecida, forzando así un perfil monótono de Z entre cero y uno. Esta estrategia permite construir un flamelet, pero no representa la física real de una llama de spray, cuya estructura está determinada principalmente por la interacción entre procesos difusivos, químicos y convectivos inducidos por la evaporación [16–18]. En esta configuración, sin embargo, este último resulta poco relevante. En otras palabras, más que resolver el problema, esta aproximación lo evita.

Una alternativa conceptualmente distinta consiste en abandonar la fracción de mezcla clásica y definir una nueva variable de composición que sea monótona por construcción. En esta línea, Franzelli et al. [78] propusieron una nueva coordenada para el espacio de composición utilizando dos variables: la fracción de mezcla gaseosa Z_g (equivalente al Z tradicional) y la fracción de mezcla líquida Z_l , definida como la

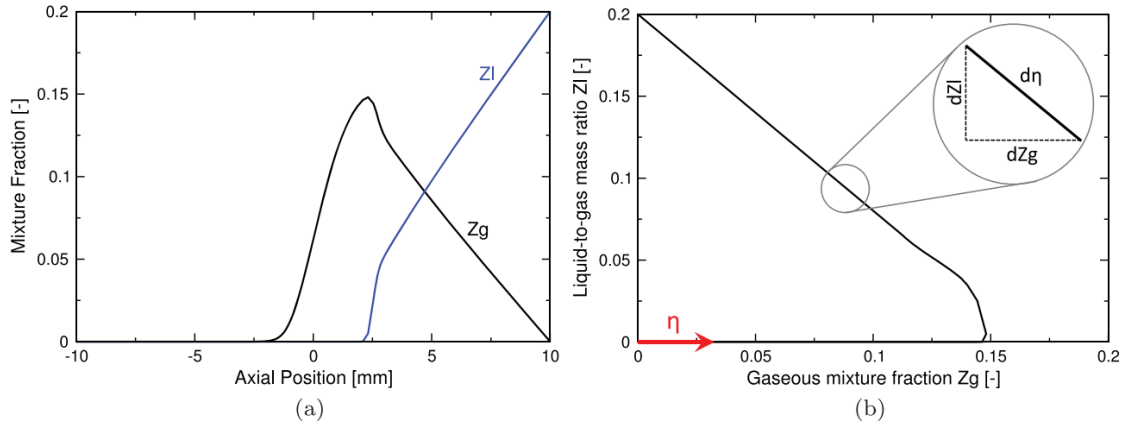


Figura 2.3: Ilustración de la definición de la variable de composición efectiva: a) fracción de mezcla gaseosa y razón líquido-gas en el espacio físico, y b) representación del *manifold* unidimensional en el espacio (Z_g, Z_l) [19]

razón entre la masa líquida y la masa gaseosa local

$$Z_l = \frac{\alpha_l \rho_l}{(1 - \alpha_l) \rho} \approx \frac{\alpha_l \rho_l}{\rho}, \quad (2.46)$$

con $\alpha_l = 4n_l\pi R^3/3$ siendo la fracción de volumen de la fase líquida, donde n_l es la densidad del número de gotas, y R el radio de estas.

En el espacio bidimensional (Z_g, Z_l) , una llama de flujos opuestos describe un conjunto de estados que forman un *manifold* unidimensional correspondiente al conjunto de soluciones físicamente posibles (Fig. 2.3). Al restringir el espacio de composición a este *manifold*, es posible definir una nueva coordenada monótona η , que corresponde a la métrica de dicha curva en el espacio (Z_g, Z_l) . En términos geométricos, η mide la distancia recorrida a lo largo del *manifold*, por lo que aumenta de forma continua a medida que se avanza sobre el conjunto de estados de la solución. Su definición matemática se obtiene a partir de la longitud de arco

$$d\eta = \sqrt{(dZ_g)^2 + (dZ_l)^2}. \quad (2.47)$$

De forma análoga, Maionchi et al. [21] propusieron la fracción de mezcla acumulada, Z_C , que construye una variable monótona, no a través de una métrica geométrica, sino mediante una integral ponderada que “suaviza” el perfil no monótono de Z (no confundir con la fracción de mezcla basada en carbono). Aquí, η representa

la coordenada normal al frente de llama, y la variable Z_C se define como

$$Z_C(\eta) = \frac{1}{Z_C^T} \int_{-\infty}^{\eta} \frac{\exp(-s^2/2)}{\sqrt{2\pi}} Z(s) ds, \quad (2.48)$$

donde

$$Z_C^T = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp(-s^2/2)}{\sqrt{2\pi}} Z(s) ds. \quad (2.49)$$

Si bien ambas estrategias (las de Franzelli et al. [78] y Maionchi et al. [21]) resuelven el problema de la no monotonicidad desde un punto de vista matemático, comparten dos inconvenientes principales: i) en principio es incierto si los gradientes de los reactivos escalares están alineados con los de estas coordenadas en llamas tridimensionales, por lo que no se garantiza la unidimensionalidad, y ii) presentan una complejidad práctica considerable. Su definición depende de información global o histórica (longitudes de arco o integrales acumuladas), lo que dificulta enormemente su implementación en simulaciones de llamas turbulentas, donde se requieren variables locales y fácilmente transportables. Su aplicabilidad práctica continúa siendo un desafío abierto [30].

En conclusión, la literatura se ha concentrado principalmente en soluciones estacionarias, por lo que el análisis de casos de interés, como aquellos asociadas a fenómenos de extinción o re-ignición, permanece limitado. Asimismo, la complejidad asociada al espacio de composición ha sido, en gran medida, evitada o tratada mediante simplificaciones que restringen la capacidad de describir de manera consistente la física de llamas con spray.

En este contexto, la principal limitación no radica en la ausencia de formulaciones, sino en la dificultad de obtener soluciones de las ecuaciones de flamelet de spray bajo condiciones generales. En particular, la falta de herramientas numéricas capaces de abordar de manera consistente el acoplamiento entre la fase líquida y la fase gaseosa, así como de definir adecuadamente el dominio de resolución en el espacio de composición, ha impedido su estudio sistemático.

Esta tesis aborda estas limitaciones mediante el desarrollo de herramientas numéricas y computacionales que permiten la obtención sistemática de soluciones de las ecuaciones de flamelet de spray en configuraciones previamente no exploradas:

1. flamelets transitorios con acoplamiento entre la fase líquida y la fase gaseosa en el espacio de composición, y

2. flamelets en un espacio de fracción de mezcla no monótono.

El siguiente capítulo presenta el modelo matemático empleado para la obtención de estas soluciones.

Capítulo 3

Modelo matemático

Este capítulo presenta el marco matemático empleado como base para el desarrollo de las herramientas numéricas que permiten obtener soluciones de las ecuaciones de flamelet de spray en configuraciones que no habían sido abordadas previamente. En particular, se consideran dos problemas: flamelets de spray transitorios y flamelets con perfiles de fracción de mezcla no monótonos.

Las formulaciones correspondientes a cada caso se detallan en las Secciones 3.1 y 3.2, respectivamente. Tanto dichas formulaciones como los resultados asociados han sido publicados en [79] y [36].

3.1. Formulación transitorias de flamelet de spray

Dado que un flamelet de spray corresponde a un flujo multifásico, su descripción requiere un tratamiento diferenciado para cada una de las fases involucradas. En este contexto, resulta fundamental contar con una formulación que permita describir de manera consistente el acoplamiento entre la fase líquida y la fase gaseosa dentro del marco de flamelets.

En este trabajo, se adopta un enfoque Euleriano–Lagrangiano, en el cual la fase gaseosa se modela en un marco Euleriano, mientras que la fase líquida se describe mediante un enfoque Lagrangiano. Esta elección permite incorporar de manera explícita la dinámica de las gotas en el espacio de composición, lo que resulta clave para la obtención de soluciones transitorias.

En consecuencia, la formulación se presenta en dos partes complementarias: la Sección 3.1.1 detalla la derivación de las ecuaciones correspondientes a la fase gaseosa,

mientras que la Sección 3.1.2 introduce el modelo para la fase líquida.

3.1.1. Ecuaciones de flamelet para la fase gaseosa

El punto de partida corresponde a las ecuaciones de conservación en el espacio físico, a partir de las cuales se construye la formulación en el espacio de composición. Las ecuaciones de transporte para las fracciones másicas de las especies químicas, Y_k , y la temperatura, T , se escriben como

$$\rho \frac{\partial Y_k}{\partial t} + \rho \mathbf{u} \cdot \nabla Y_k = -\nabla \cdot (\rho \mathbf{V}_k Y_k) + \dot{\omega}_k + \dot{S}_v(\delta_{kL} - Y_k) \quad (3.1)$$

y

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho C_p \mathbf{u} \cdot \nabla T = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) - \rho \sum_{k=1}^N (C_{pk} \mathbf{V}_k Y_k) \cdot \nabla T + \dot{\omega}_T + \dot{S}_e, \quad (3.2)$$

respectivamente.

Para cerrar este sistema, se requiere un modelo para la velocidad de difusión de cada especie, $\mathbf{V}_k$. En este trabajo se emplea el modelo de Hirschfelder y Curtiss [69] (impulsada por gradientes de las fracciones molares), además se considera termodifusión (efecto Soret, impulsada por gradientes de temperatura) y una velocidad de corrección para garantizar la conservación global de la masa [70]

$$\mathbf{V}_k = -\frac{D_k}{X_k} \nabla X_k - \frac{D_{Tk}}{\rho T Y_k} \nabla T + \mathbf{V}^C, \quad (3.3)$$

donde D_k es el coeficiente de difusión de la especie k , X_k su fracción molar, y D_{Tk} es el coeficiente de difusión térmica. La velocidad de corrección, $\mathbf{V}^C$, se calcula de modo que el flujo de difusión total sea nulo ($\sum Y_k \mathbf{V}_k = 0$)

$$\mathbf{V}^C = \sum_{j=1}^N \left(\frac{D_j Y_j}{X_j} \nabla X_j + \frac{D_{Tj}}{\rho T} \nabla T \right). \quad (3.4)$$

A diferencia del enfoque clásico basado en transformación de coordenadas (Ecs. (2.30) y (2.31)), aquí se adopta el formalismo más reciente de Olguin et al. [80, 81, 82], basado en una descripción Lagrangiana de la evolución temporal de la estructura de la llama. Aunque el formalismo original se desarrolla en un espacio de composición

bidimensional, en esta tesis se empleará una simplificación unidimensional, donde la fracción de mezcla Z actúa como la única coordenada que describe la estructura interna de la llama.

Con el fin de simplificar la derivación, se reescriben primero las ecuaciones de transporte en una forma compacta y general. La ecuación para Z se expresa como

$$\frac{\partial Z}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla Z = \Gamma_Z, \quad (3.5)$$

donde el término Γ_Z agrupa los términos de difusión y fuente por evaporación. A partir del campo escalar de Z , se define el vector unitario normal a sus isosuperficies

$$\mathbf{n}_Z = \frac{\nabla Z}{|\nabla Z|}. \quad (3.6)$$

Se introduce también una variable genérica ψ que representa cualquiera de los escalares reactivos (Y_k o T). Su ecuación de transporte se escribe de forma general como

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \psi = \Gamma_\psi, \quad (3.7)$$

donde Γ_ψ agrupa los términos del lado derecho, como difusión, fuentes u otros, que aparecen en las Ecs. (3.1) y (3.2).

Este formalismo Lagrangiano consiste en seguir el movimiento de una isosuperficie de Z mediante una partícula sin masa cuya velocidad, $\mathbf{u}_p$, se define de tal manera que siempre permanezca sobre dicha isosuperficie. Ello conduce a la condición cinemática

$$\frac{\partial Z}{\partial t} + \mathbf{u}_p \cdot \nabla Z = 0, \quad (3.8)$$

la que al usarla en la ecuación de transporte de Z , Ec. (3.5), se obtiene la siguiente expresión para la velocidad de la isosuperficie de Z [80, 82]

$$\mathbf{u}_p = \mathbf{u} - \frac{\Gamma_Z}{|\nabla Z|} \mathbf{n}_Z. \quad (3.9)$$

Esta ecuación indica que la isosuperficie se mueve con la velocidad del fluido, $\mathbf{u}$, más una velocidad de propagación relativa, $-\Gamma_Z/|\nabla Z|\mathbf{n}_Z$, que es inducida por los procesos de difusión y evaporación contenidos en Γ_Z .

Una vez definida $\mathbf{u}_p$, la derivada temporal en el espacio de composición, $\partial(\cdot)/\partial\tau$, se interpreta como una derivada Lagrangiana que sigue el movimiento de la llama [83, 84].

Para cualquier escalar ψ , esta derivada se define como [80, 82]

$$\frac{\partial \psi}{\partial \tau} = \frac{\partial \psi}{\partial t} + \mathbf{u}_p \cdot \nabla \psi. \quad (3.10)$$

Tras sustituir la ecuación de transporte de ψ (Ec. (3.7)) y la expresión para $\mathbf{u}_p$ (Ec. (3.9)) en esta definición, se obtiene la ecuación de flamelet para ψ [80, 82]

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi}{\partial \tau} &= \Gamma_\psi + \mathbf{u} \cdot \nabla \psi - \mathbf{u} \cdot \nabla \psi - \frac{\Gamma_Z}{|\nabla Z|} \mathbf{n}_Z \cdot \nabla \psi \\ &= \Gamma_\psi - \frac{\Gamma_Z}{|\nabla Z|^2} \nabla Z \cdot \nabla Z \frac{\partial \psi}{\partial Z} \\ \frac{\partial \psi}{\partial \tau} &= \Gamma_\psi - \Gamma_Z \frac{\partial \psi}{\partial Z}. \end{aligned} \quad (3.11)$$

Esta sencilla expresión describe la evolución intrínsecamente transitoria de cualquier escalar ψ en un marco de referencia que se mueve con la llama.

Para especificar la ecuación general (Ec. (3.11)), es necesario transformar los términos Γ_ψ y Γ_Z haciendo uso de la Ec. (2.31). En este trabajo los efectos debido a la curvatura son despreciados. Dado que Γ_Z aparece en todas las ecuaciones finales, se transforma primero. Partiendo de su definición en el espacio físico

$$\Gamma_Z = \frac{1}{\rho} \nabla \cdot (\rho D_Z \nabla Z) + \frac{\dot{S}_v(1-Z)}{\rho}, \quad (3.12)$$

su transformación al espacio de composición es directa

$$\Gamma_Z = \frac{g_Z}{\rho} \frac{\partial(\rho D_Z g_Z)}{\partial Z} + \frac{\dot{S}_v(1-Z)}{\rho}. \quad (3.13)$$

Luego, se transforma Γ_{Y_k} , partiendo de su forma en el espacio físico, escrita de modo que ∇Y_k aparezca explícitamente

$$\Gamma_{Y_k} = \frac{1}{\rho} \nabla \cdot (\rho D_k \nabla Y_k) - \frac{1}{\rho} \nabla \cdot (\rho \tilde{\mathbf{V}}_k Y_k) + \frac{\dot{\omega}_k}{\rho} + \frac{\dot{S}_v(\delta_{kL} - Y_k)}{\rho}. \quad (3.14)$$

con

$$\tilde{\mathbf{V}}_k = -\frac{D_k}{\bar{W}} \nabla \bar{W} - \frac{D_{Tk}}{\rho T Y_k} \nabla T + \mathbf{V}^C. \quad (3.15)$$

Aplicando la transformación de coordenadas, se obtiene la forma final en el espacio

de composición

$$\begin{aligned} \Gamma_{Y_k} = & \frac{D_Z}{Le_k} g_Z^2 \frac{\partial^2 Y_k}{\partial Z^2} + \frac{g_Z}{\rho} \frac{\partial(\rho D_k g_Z)}{\partial Z} \frac{\partial Y_k}{\partial Z} - \frac{g_Z}{\rho} \frac{\partial(\rho \tilde{V}_{kZ} Y_k)}{\partial Z} \frac{\partial Y_k}{\partial Z} \\ & + \frac{\dot{\omega}_k}{\rho} + \frac{\dot{S}_v(\delta_{kL} - Y_k)}{\rho}, \end{aligned} \quad (3.16)$$

donde las velocidades de difusión transformadas, $\tilde{V}_{kZ}$ y V_Z^C , se definen respectivamente como

$$\tilde{V}_{kZ} = -g_Z \frac{D_k}{\bar{W}} \frac{\partial \bar{W}}{\partial Z} - g_Z \frac{D_{Tk}}{\rho T Y_k} \frac{\partial T}{\partial Z} + V_Z^C \quad (3.17)$$

y

$$V_Z^C = g_Z \sum_{k=1}^N \left(\frac{D_k Y_k}{X_k} \frac{\partial X_k}{\partial Z} + \frac{D_{Tk}}{\rho T} \frac{\partial T}{\partial Z} \right). \quad (3.18)$$

Sustituyendo las Ecs. (3.13) y (3.16) en la ecuación general (Ec. (3.11)) se obtiene la ecuación transitoria de flamelet para las especies químicas [79]

$$\rho \frac{\partial Y_k}{\partial \tau} = \frac{\rho D_Z g_Z^2}{Le_k} \frac{\partial^2 Y_k}{\partial Z^2} + \dot{\omega}_k - \dot{S}_v(1 - Z) \frac{\partial Y_k}{\partial Z} + \dot{S}_v(\delta_{kF} - Y_k) + \Omega_k. \quad (3.19)$$

De manera análoga, para el término de la energía, Γ_T , se parte de

$$\Gamma_T = \frac{1}{\rho C_p} \nabla \cdot (\lambda \nabla T) - \sum_{k=1}^N \left(\frac{C_{pk}}{C_p} \mathbf{V}_k Y_k \right) \cdot \nabla T + \frac{\dot{\omega}_T}{\rho C_p} + \frac{\dot{S}_e}{\rho C_p}. \quad (3.20)$$

Al aplicar la misma transformación de coordenadas (Ec. (2.31)), y asumiendo número de Lewis unitario para la fracción de mezcla ($D_Z = \lambda/(\rho C_p)$), se obtiene su forma equivalente en el espacio de composición

$$\begin{aligned} \Gamma_T = & g_Z^2 D_Z \frac{\partial^2 T}{\partial Z^2} + \frac{g_Z}{\rho} \frac{\partial(\rho D_Z g_Z)}{\partial Z} \frac{\partial T}{\partial Z} + \frac{g_Z^2 D_Z}{C_p} \frac{\partial C_p}{\partial Z} \frac{\partial T}{\partial Z} \\ & - g_Z \sum_{k=1}^N \left(\frac{C_{pk}}{C_p} V_{kZ} Y_k \right) \frac{\partial T}{\partial Z} + \frac{\dot{\omega}_T}{\rho C_p} + \frac{\dot{S}_e}{\rho C_p}, \end{aligned} \quad (3.21)$$

donde la velocidad de difusión total de la especie k en el espacio de composición, V_{kZ} , se define como

$$V_{kZ} = -g_Z \frac{D_k}{Y_k} \frac{\partial Y_k}{\partial Z} + \tilde{V}_{kZ}. \quad (3.22)$$

Finalmente, sustituyendo las Ecs. (3.13) y (3.21) en la ecuación general, se obtiene la ecuación de flamelet para la energía [79]

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial \tau} = \rho D_Z g_Z^2 C_p \frac{\partial^2 T}{\partial Z^2} + \dot{\omega}_T - C_p \dot{S}_v (1 - Z) \frac{\partial T}{\partial Z} + \dot{S}_e + \Omega_T. \quad (3.23)$$

En estas ecuaciones finales, los términos Ω_k y Ω_T agrupan los efectos de transporte (difusión diferencial y variaciones de propiedades termofísicas) que, aunque necesarios para una descripción completa, suelen considerarse de segundo orden en un flamelet. Estos tiene la forma [79]

$$\Omega_k = -g_Z \frac{\partial}{\partial Z} \left(\rho D_Z \left(\frac{\text{Le}_k - 1}{\text{Le}_k} \right) g_Z \right) \frac{\partial Y_k}{\partial Z} - g_Z \frac{\partial(\rho \tilde{V}_{kZ} Y_k)}{\partial Z} \quad (3.24)$$

y

$$\Omega_T = \left(\rho D_Z g_Z^2 \frac{\partial C_p}{\partial Z} - \rho g_Z \sum_{k=1}^N C_{pk} V_{kZ} Y_k \right) \frac{\partial T}{\partial Z}. \quad (3.25)$$

En este punto, las ecuaciones de flamelet para las especies, Ec. (3.19), y la energía, Ec. (3.23), forman un sistema que aún requiere cierre. Para resolverlo, se deben proporcionar modelos para tres cantidades fundamentales: el gradiente de la fracción de mezcla, g_Z , que describe la estructura de la llama, y los dos términos fuentes debido a la evaporación, $\dot{S}_v$ y $\dot{S}_e$, cuyo cierre proviene del modelo Lagrangiano de la fase líquida.

Para el cierre del gradiente de la fracción de mezcla, g_Z , incluyendo los efectos de la evaporación, se necesita una ecuación de flamelet para esta variable. Siguiendo el enfoque de Olguin et al. [80, 82], dicha ecuación se obtiene aplicando el mismo formalismo Lagrangiano utilizado para las demás variables.

El primer paso consiste en derivar una ecuación de evolución para g_Z en el espacio físico. Esto se logra aplicando el operador $\mathbf{n}_Z \cdot \nabla(\cdot)$ a la ecuación de transporte de Z , Ec. (3.5), lo que conduce a

$$\frac{\partial g_Z}{\partial t} = -\mathbf{u} \cdot \nabla g_Z + g_Z a + \mathbf{n}_Z \cdot \nabla \Gamma_Z, \quad (3.26)$$

donde $a = -\mathbf{n}_Z \cdot \nabla \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}_Z$ es la tasa de deformación.

A continuación, haciendo uso de la interpretación Lagrangiana de la derivada

temporal en el espacio de composición, se tiene

$$\frac{\partial g_Z}{\partial \tau} = \frac{\partial g_Z}{\partial t} + \mathbf{u}_p \cdot \nabla g_Z. \quad (3.27)$$

Sustituyendo la Ec. (3.26) y la expresión para la velocidad de la isosuperficie, $\mathbf{u}_p$ (Ec. (3.9)), se llega a

$$\begin{aligned} \frac{\partial g_Z}{\partial \tau} &= -\mathbf{u} \cdot \nabla g_Z + g_Z a + \mathbf{n}_Z \cdot \nabla \Gamma_Z + \mathbf{u} \cdot \nabla g_Z - \frac{\Gamma_Z}{|\nabla Z|} \mathbf{n}_Z \cdot \nabla g_Z \\ &= g_Z a + \frac{\nabla Z \cdot \nabla Z}{|\nabla Z|} \frac{\partial \Gamma_Z}{\partial Z} - \frac{\Gamma_Z}{|\nabla Z|^2} \nabla Z \cdot \nabla Z \frac{\partial g_Z}{\partial Z} \\ &= g_Z a + g_Z \frac{\partial \Gamma_Z}{\partial Z} - \Gamma_Z \frac{\partial g_Z}{\partial Z} \\ \frac{\partial g_Z}{\partial \tau} &= a g_Z + g_Z^2 \frac{\partial}{\partial Z} \left(\frac{\Gamma_Z}{g_Z} \right). \end{aligned} \quad (3.28)$$

Finalmente, sustituyendo la expresión previamente derivada para Γ_Z , Ec. (3.13), se obtiene la ecuación de flamelet para g_Z

$$\frac{\partial g_Z}{\partial \tau} = g_Z a + g_Z^2 \frac{\partial}{\partial Z} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial (\rho D_Z g_Z)}{\partial Z} \right) + g_Z^2 \frac{\partial}{\partial Z} \left(\frac{\dot{S}_v (1 - Z)}{\rho g_Z} \right). \quad (3.29)$$

Con esto, el sistema que describe la fase gaseosa queda completamente determinado, siendo la tasa de deformación, a , el único parámetro libre. Sin embargo, su resolución en el contexto de flamelets de spray requiere la incorporación de los términos de evaporación, $\dot{S}_v$ y $\dot{S}_e$, los cuales representan el acoplamiento con la fase líquida. La modelación de estos términos constituye un aspecto central del problema, ya que determina la interacción entre ambas fases en el espacio de composición. En la siguiente sección se introduce la formulación correspondiente a la fase líquida, necesaria para completar el modelo.

3.1.2. Descripción Lagrangiana para la fase líquida

La descripción de la fase líquida se realiza mediante un enfoque Lagrangiano, el cual permite representar de manera explícita la dinámica de las gotas y su acoplamiento con la fase gaseosa dentro del marco de flamelets. En particular, se adopta el modelo propuesto originalmente por Continillo y Sirignano [85], en el cual se sigue individualmente a distintos grupos de gotas a través del dominio.

En este trabajo se adoptan las siguientes suposiciones de modelo. En primer lugar, se asume que las gotas se desplazan exclusivamente a lo largo del flamelet, lo que permite obtener una descripción unidimensional de la fase líquida en el espacio de composición. Asimismo, se considera que las gotas son esféricas y monocomponentes. Por otra parte, se supone un spray diluido, de modo que no existe interacción entre gotas, despreciándose los procesos de coalescencia y fragmentación. Finalmente, cada grupo de gotas se modela como monodisperso, mientras que la polidispersidad local es posible mediante la coexistencia de distintos grupos de gotas en una misma celda numérica.

Con la información de los J grupos de gotas, los términos fuente de masa y energía asociados a la evaporación se calculan como la suma de las contribuciones de cada grupo

$$\dot{S}_v = \sum_{j=1}^J n_j \dot{m}_j \quad (3.30)$$

y

$$\dot{S}_e = \sum_{j=1}^J -n_j \left(\dot{q}_j + \dot{m}_j \left[\int_T^{T_{js}} C_{pF} dT + L_v \right] \right), \quad (3.31)$$

respectivamente. En estas expresiones, n es la densidad del número de gotas, $\dot{m}$ su tasa de evaporación másica, $\dot{q}$ el flujo de calor hacia la gota, T_s la temperatura en su superficie y L_v el calor latente de vaporización. Dado que todas las gotas de un mismo grupo comparten las mismas propiedades, los cálculos se realizan sobre una gota representativa. Por claridad, de ahora en adelante se omitirá el subíndice j .

A continuación, se presentan las expresiones requeridas para cerrar los términos fuente $\dot{S}_v$ y $\dot{S}_e$. La tasa de evaporación, $\dot{m}$, se calcula como [85, 86]

$$\dot{m} = 2\pi\rho_f D_f \widetilde{\text{Sh}} \ln(1 + B_M), \quad (3.32)$$

donde el subíndice f indica las propiedades evaluadas en la película gaseosa alrededor de la gota y R es su radio instantáneo. Aquí, el número de Sherwood modificado, $\widetilde{\text{Sh}}$, puede ser obtenido a través de la siguiente expresión [85]

$$\widetilde{\text{Sh}} = 2 + \frac{([1 + \text{ReSc}]^{1/3} [\text{máx}(1, \text{Re})]^{0.077} - 1)}{(1 + B_M)^{0.7} \ln(1 + B_M)} B_M, \quad (3.33)$$

donde Re y Sc son los números de Reynolds y Schmidt de la gota, respectivamente. Además, el número de Spalding para la transferencia de masa, B_M , es [85, 86]

$$B_M = \frac{Y_{Fs} - Y_F}{1 - Y_{Fs}}, \quad (3.34)$$

con el subíndice s indicando evaluación en la superficie de la gota.

La tasa de evaporación obtenida, $\dot{m}$, se usa en la ecuación de conservación de masa de la gota, que gobierna la evolución de su radio a lo largo de su trayectoria Lagrangiana [85, 86]

$$\frac{d}{d\tau_l} \left(\frac{4}{3} \pi R^3 \rho_l \right) = -\dot{m}, \quad (3.35)$$

donde ρ_l es la densidad del líquido y τ_l es el tiempo Lagrangiano (siguiendo a la gota). La integración de esta ecuación proporciona el radio de la gota en cada instante y cierra el cálculo de la masa evaporada.

Para el cierre del término de energía, $\dot{S}_e$, se requiere del flujo de energía neto hacia la gota, $\dot{q}$, calculado como [85, 86]

$$\dot{q} = \dot{m} \left(\frac{C_{pf}(T - T_s)}{B_T} - L_v \right), \quad (3.36)$$

donde el número de Spalding para la transferencia de calor, B_T , se relaciona con B_M mediante un factor de acople para los transportes de masa y calor, ϕ [85, 86]

$$B_T = (1 + B_M)^\phi - 1, \quad (3.37)$$

con

$$\phi = \frac{C_{pl} \widetilde{Sh}}{C_{pf} \widetilde{Nu}} \frac{1}{Le}. \quad (3.38)$$

El número de Nusselt de la gota modificado, $\widetilde{Nu}$, que corrige la transferencia de calor por los efectos convectivos del flujo, se define como

$$\widetilde{Nu} = 2 + \frac{([1 + RePr]^{1/3} [\max(1, Re)]^{0.077} - 1)}{(1 + B_T)^{0.7} \ln(1 + B_T)} B_T, \quad (3.39)$$

donde Pr es el número de Prandtl de la gota. Finalmente, la distribución de temperatura

en el interior de la gota, T_l , es descrita por [85, 86]

$$\frac{\partial T_l}{\partial \tau_l} = \frac{\alpha_l}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial T_l}{\partial r} \right), \quad (3.40)$$

donde α_l es la difusividad térmica de la fase líquida y r es la coordenada radial interna. Su resolución entrega el perfil interno de temperatura de la gota, T_l , y su valor superficial, $T_s = T_l(r = R)$. La condición de contorno de la Ec. (3.40), corresponde al flujo de calor obtenido a partir de la Ec. (3.36) en la interfaz, $r = R$.

El modelo también requiere describir evolución de la densidad del número de gotas, n . Esta se obtiene al considerar que, para un grupo de gotas que se mueve a lo largo del flamelet, el número total de gotas, N , se conserva

$$\frac{dN}{d\tau_l} = 0. \quad (3.41)$$

El número de gotas puede expresarse como $N = n \Delta s A_T$, donde $\Delta s = \Delta \mathbf{x} \cdot \mathbf{n}_Z$ corresponde a la proyección de la distancia entre dos nodos consecutivos en la dirección normal a las isosuperficies de Z (es decir, a lo largo del flamelet) en el espacio físico. Por su parte, A_T representa un área transversal al flamelet, de magnitud constante.

Integrando y reescribiendo la Ec. (3.41) en términos de n , se obtiene

$$\frac{n(\tau_l) \Delta Z}{g_Z(\tau_l)} = \frac{n_0 \Delta Z_0}{g_{Z,0}}, \quad (3.42)$$

donde ΔZ es el tamaño de una celda en el espacio de composición y el subíndice 0 se refiere a las condiciones iniciales. Reordenando la Ec. (3.42), se obtiene una ecuación explícita para la evolución de la densidad del número de gotas en función del tiempo [79]

$$n(\tau_l) = \frac{n_0 \Delta Z_0}{g_{Z,0}} \frac{g_Z(\tau_l)}{\Delta Z}. \quad (3.43)$$

Finalmente, la trayectoria de la gota a lo largo del flamelet, se determina a partir de su ecuación de movimiento [85, 86]

$$\frac{4}{3} \pi R^3 \rho_l \frac{du_l}{d\tau_l} = \frac{\pi R^2 \rho}{2} (u_Z - u_l) |u_Z - u_l| C_D, \quad (3.44)$$

donde u_l es la velocidad de la gota, y $u_Z = \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}_Z$ es la componente de velocidad

del gas en la dirección de Z , en esta ecuación se desprecia la gravedad. Asimismo, se usa un coeficiente de arrastre correspondiente al régimen de Stokes ($Re \ll 1$), $C_D = 12\nu/(|u_Z - u_l|R)$, donde ν es la viscosidad cinemática del gas [85]. Para calcular esta dinámica dentro flamelet, es necesario transformar esta ecuación al espacio de composición. Esto se logra relacionando la velocidad de la gota en espacio físico, u_l , con su velocidad a través de la estructura del flamelet, $dZ_l/d\tau_l$, mediante el gradiente g_Z

$$u_l = \frac{dx_l}{d\tau_l} = \frac{dx_l}{dZ_l} \frac{dZ_l}{d\tau_l} = \frac{1}{g_{Zl}} \frac{dZ_l}{d\tau_l}. \quad (3.45)$$

Insertando la Ec. (3.45) en la Ec. (3.44), se tiene [79]

$$\frac{d^2 Z_l}{d\tau_l^2} - \frac{1}{g_{Zl}} \frac{dg_Z}{dZ} \left(\frac{dZ_l}{d\tau_l} \right)^2 + \frac{9\nu\rho}{2R^2\rho_l} \frac{dZ_l}{d\tau_l} = \frac{9\nu\rho g_{Zl}}{2R^2\rho_l} u_Z. \quad (3.46)$$

Para resolver la Ec. (3.46) se necesita la velocidad del gas, u_Z , en la posición de la gota, la cual es obtenida integrando la definición de la tasa de deformación, $a = -g_Z \partial u_Z / \partial Z$, a través de la estructura del flamelet [79]

$$u_Z = u_Z(Z=0) - \int_{Z=0}^Z \frac{a}{g_Z} dZ, \quad (3.47)$$

donde $u(Z=0)$ es su condición de contorno. Es importante destacar que a depende del flujo particular y puede variar espacial y temporalmente. Sin embargo, tal y como se mencionó anteriormente, en este trabajo se utiliza como parámetro, asumiendo un valor constante a lo largo de flamelet, emulando lo realizado en llamas gaseosas [10].

La resolución de este sistema permite determinar la trayectoria $Z_l(\tau_l)$ y, con ella, evaluar en cada instante las condiciones locales del gas que rodean a la gota. Esto permite calcular $\dot{m}$, $\dot{q}$ y n , y definir de manera consistente los términos fuente en las ecuaciones de flamelet, Ecs. (3.30) y (3.31).

En consecuencia, esta formulación permite un acoplamiento transitorio entre las fases gaseosa y líquida, en el que ambas evolucionan en el tiempo. Esto constituye un elemento central del modelo, ya que permite obtener soluciones transitorias de las ecuaciones de flamelet de spray y estudiar configuraciones con inyección discontinua, donde la interacción entre fases presenta una dinámica inherentemente no estacionaria.

3.2. Solución analítica para la estimación de la fracción de mezcla máxima

En esta sección se presenta la formulación empleada para la estimación de la fracción de mezcla máxima, $Z_{\max}$, necesaria para resolver flamelets en dominios de fracción de mezcla no monótonos. En este tipo de configuraciones, $Z_{\max}$ actúa como condición de contorno para las ecuaciones del flamelet, por lo que su desconocimiento impone una limitación directa en la resolución del problema. Las ecuaciones consideradas para la fase gaseosa corresponden a las presentadas en la Sección 3.1.1.

Para superar esta dificultad, se recurre a la solución analítica del perfil de $Z(y)$ presentada por Fuenzalida [87], cuyo propósito es estimar el valor de $Z_{\max}$ previo a la resolución completa del flamelet. En esta sección se resume dicha derivación. La idea central es construir un modelo simplificado, consistente con los enfoques clásicos utilizados en la obtención de soluciones analíticas para la tasa de disipación escalar, χ , en llamas gaseosas [10, 12], que permita obtener una expresión cerrada para este perfil.

Siguiendo esta derivación, se considera un campo de flujo potencial unidimensional estacionario, con velocidad local $u = -ay$, donde a es constante, y se asume que el producto ρD_Z es constante en todo el dominio. Además, se prescribe un perfil de evaporación mediante el polinomio [36, 87]

$$\dot{S}_v(y) = Ay^2 + By + C, \quad (3.48)$$

donde los parámetros A , B y C controlan la intensidad y distribución de la evaporación. No se conoce, por ahora, si polinomios de mayor orden u otras funciones permiten una solución analítica equivalente.

Bajo estas hipótesis, la ecuación de transporte estacionaria para la fracción de mezcla, Ec. (2.42), se reduce a [36, 87]

$$-\rho a y \frac{dZ}{dy} = \rho D_Z \frac{d^2 Z}{dy^2} + (Ay^2 + By + C)(1 - Z). \quad (3.49)$$

La solución de esta ecuación permite obtener un perfil explícito para $Z(y)$ y, con él, su valor máximo.

Para resolver la Ec. (3.49), se sigue la transformación propuesta por Pala y Ertas [88], la cual permite convertir la ecuación original, que posee derivadas

de primer y segundo orden con coeficientes variables, en una forma canónica para la cual existen soluciones analíticas conocidas (ecuación de Riccati). Esta transformación elimina el término convectivo y reescala la coordenada espacial, reduciendo el problema a una ecuación diferencial lineal de segundo orden.

Siguiendo este enfoque, se define la variable dependiente $\psi(y)$ como [36, 87]

$$\psi(y) = \exp \left[\frac{ay^2}{4D_Z} - \int \frac{1}{1-Z} \frac{dZ}{dy} dy \right], \quad (3.50)$$

y luego la coordenada transformada, $\nu(y)$ [36, 87]

$$\nu(y) = A^*y + \frac{2B}{A^{*3}\rho D_Z}. \quad (3.51)$$

Bajo estas transformaciones, la ecuación puede escribirse en la forma canónica [36, 87]

$$\frac{d^2\psi}{d\nu^2} - \left(\frac{1}{4}\nu^2 + m \right) \psi = 0. \quad (3.52)$$

donde los parámetros A^* y m , que relacionan el problema físico original con la forma canónica, se definen a partir de los parámetros del flujo y de la evaporación

$$A^* = \left(\frac{a^2}{D_Z^2} + \frac{4A}{\rho D_Z} \right)^{0,25}, \quad (3.53)$$

$$m = \frac{1}{A^{*2}} \left(\frac{a}{2D_Z} + \frac{C}{\rho D_Z} - \left(\frac{B}{A^{*2}\rho D_Z} \right)^2 \right). \quad (3.54)$$

Las soluciones de la Ec. (3.52) pueden expresarse en términos de funciones hipergeométricas confluentes [89, 90]. Las soluciones linealmente independientes son [36, 87]

$$\psi_1(y) = \exp \left(-\frac{\nu(y)^2}{4} \right) {}_1F_1 \left(\frac{1}{4} + \frac{m}{2}, \frac{1}{2}, \frac{\nu(y)^2}{2} \right) \quad (3.55)$$

y

$$\psi_2(y) = \nu(y) \exp \left(-\frac{\nu(y)^2}{4} \right) {}_1F_1 \left(\frac{3}{4} + \frac{m}{2}, \frac{3}{2}, \frac{\nu(y)^2}{2} \right), \quad (3.56)$$

donde la función hipergeométrica confluyente se define como [89]

$${}_1F_1(a, b, x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(a)_n}{(b)_n} \frac{x^n}{n!}, \quad (3.57)$$

con $(a)_n$ el símbolo de Pochhammer

$$(a)_n = \frac{\Gamma(a+n)}{\Gamma(a)}, \quad (3.58)$$

y $\Gamma(x) = \int_0^{\infty} e^{-t} t^{x-1} dt$ la función gamma.

La solución general para $\psi(y)$ puede expresarse como una combinación lineal de estas funciones base. Al revertir la transformación, Ec. (3.50), la fracción de mezcla puede expresarse como [36, 87]

$$Z(y) = 1 + \exp\left(\frac{-ay^2}{4D_Z}\right) (\alpha\psi_1(y) + \beta\psi_2(y)), \quad (3.59)$$

donde los coeficientes α y β se determinan mediante las condiciones de borde del problema. A través de esta ecuación es posible determinar el valor máximo de la fracción de mezcla.

A modo de resumen, en las secciones anteriores se presentó, por una parte, una formulación transitoria de flamelets de spray con dinámica de gotas acoplada (Sección 3.1), y por otra, una estrategia basada en una solución analítica que permite estimar $Z_{\max}$ en dominios de fracción de mezcla no monótonos. En conjunto, ambas formulaciones establecen la base necesaria para la obtención de soluciones de las ecuaciones de flamelet de spray en configuraciones que no habían sido abordadas previamente.

En el capítulo siguiente se presentan los algoritmos numéricos desarrollados para implementar estas formulaciones, junto con los procedimientos utilizados para su resolución.

Capítulo 4

Algoritmos para la resolución de las ecuaciones de flamelet de spray

Este capítulo presenta el diseño e implementación de los algoritmos numéricos desarrollados para resolver las formulaciones de flamelets de spray introducidas en el capítulo anterior. Estos algoritmos constituyen un elemento central de esta tesis, ya que permiten obtener las soluciones de las ecuaciones bajo condiciones que no han sido abordadas previamente, incluyendo el acoplamiento consistente entre la fase líquida y gaseosa y la consideración de dominios de composición no monótonos.

4.1. Algoritmo de resolución para flamelet transitorios

El sistema de ecuaciones presentado en la sección 3.1 se resuelve mediante un algoritmo numérico desarrollado en esta tesis, implementado en un código propio en FORTRAN.

El algoritmo se divide en dos etapas que se repiten en cada paso de tiempo Euleriano, $\Delta\tau$. En la primera etapa se resuelve la fase líquida. A partir de las estructuras de especies químicas, temperatura y gradiente de la fracción de mezcla, correspondientes a la condición inicial o al paso previo, se integran las ecuaciones Lagrangianas de cada grupo de gotas (tanto las recién inyectadas como las ya presentes en el sistema). Con el fin de capturar adecuadamente su dinámica, se utilizan múltiples pasos temporales Lagrangianos ($\Delta\tau_l < \Delta\tau$), tales que $\sum \Delta\tau_l = \Delta\tau$. Este proceso permite obtener los perfiles de los términos fuente por evaporación, $\dot{S}_v$ y $\dot{S}_e$, correspondientes al paso de tiempo $\Delta\tau$. El modelo permite, además, activar o desactivar

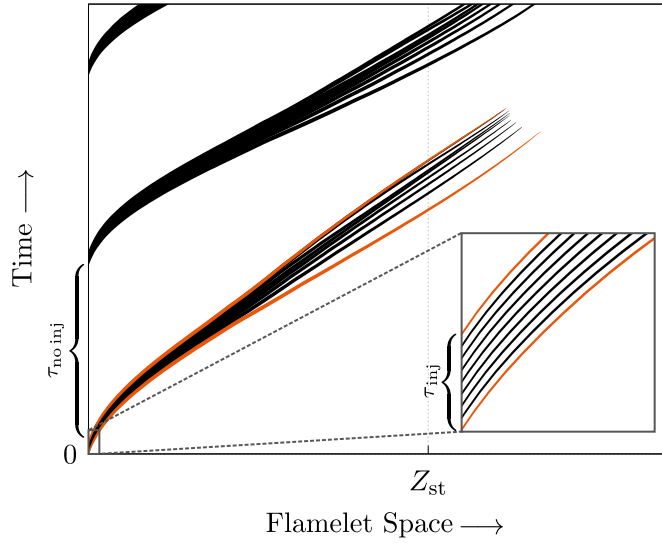


Figura 4.1: Trayectorias de distintos grupos de gotas en el espacio de composición a lo largo del tiempo. El grosor de las líneas representa el radio instantáneo de las gotas [79].

la inyección de nuevas gotas en cualquier instante de la simulación, habilitando la representación de distintos modos de inyección, como continuo o discontinuo.

Para ilustrar esto último, la Fig. 4.1 muestra un ejemplo de las trayectorias de gotas en el espacio de composición bajo un régimen de inyección discontinua. El escenario consiste en un período inicial de inyección (τ_{inj}), seguido de una interrupción ($\tau_{no\ inj}$) y una posterior reanudación. Una característica destacada es que las trayectorias no son idénticas: incluso gotas inyectadas en instantes cercanos dentro del mismo período (por ejemplo, las líneas naranjas) siguen caminos distintos a través de la estructura del flamelet.

En la segunda etapa, y una vez calculados los términos fuente, se resuelven las ecuaciones de la fase gaseosa. Debido a la fuerte no linealidad del sistema, se emplea un método de avance pseudo-transitorio, en el cual se introducen pasos de tiempo ficticios dentro de cada paso de tiempo real, $\Delta\tau$. En este esquema, durante cada paso temporal se realizan múltiples iteraciones internas que evolucionan el sistema en el tiempo ficticio, manteniendo fijos los perfiles del paso previo y los términos fuente de evaporación. Estas iteraciones permiten estabilizar el avance, amortiguar las no linealidades y facilitar la convergencia de las ecuaciones. Una vez satisfecho el criterio de convergencia interna, se completa el avance al siguiente paso de tiempo real.

Este procedimiento se repite sucesivamente hasta alcanzar la convergencia temporal del sistema o el tiempo máximo de simulación. El esquema del algoritmo completo se

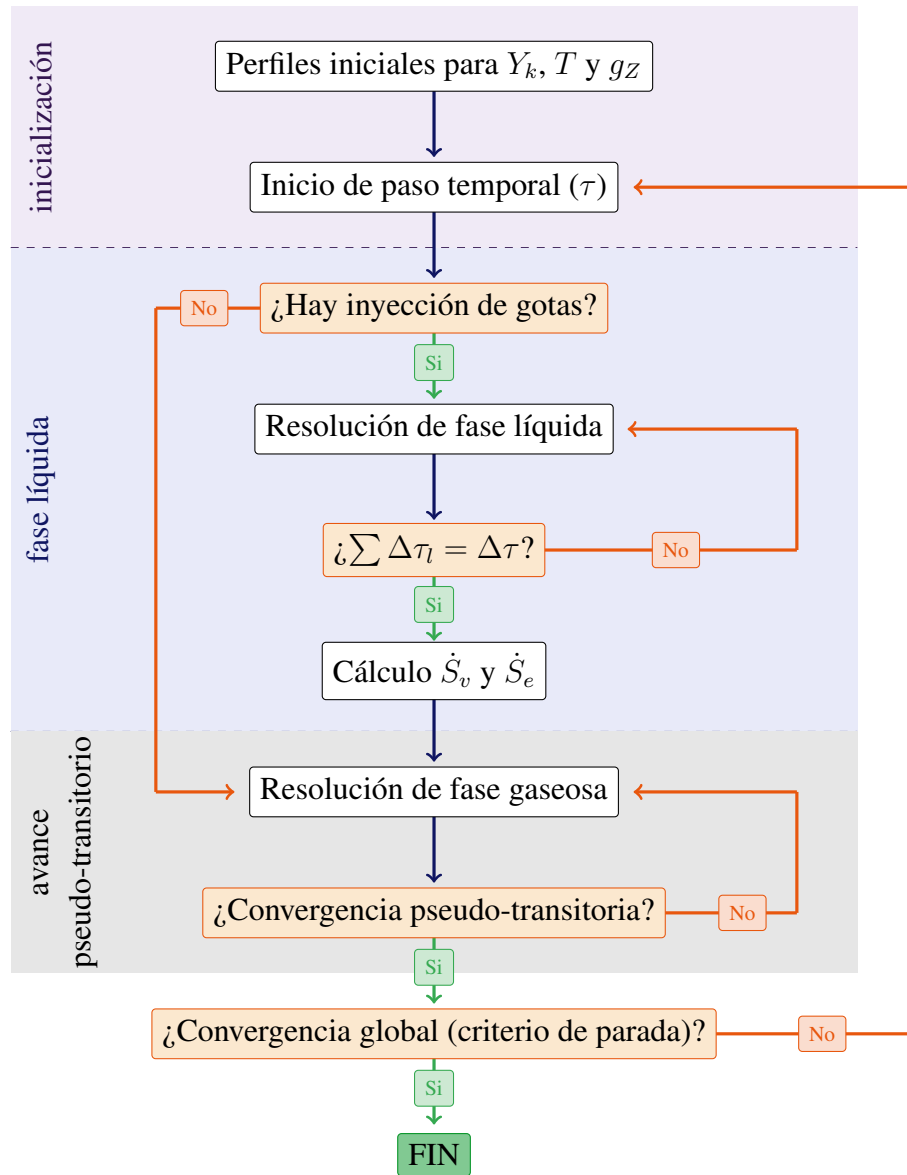


Figura 4.2: Esquema del algoritmo de resolución para el flamelet transitorio. El proceso consiste en un bucle temporal principal (τ) que contiene un sub-bucle para la fase líquida ($\Delta\tau_l$) y un bucle iterativo interno para la fase gaseosa. Las flechas verdes indican el cumplimiento de una condición, mientras que las naranjas su incumplimiento.

muestra en la Fig. 4.2.

Este comportamiento es consecuencia directa del acoplamiento bidireccional entre fases: cada gota, al evaporarse, modifica la estructura local de la fase gaseosa (perfiles de temperatura y especies químicas), de modo que las condiciones de inyección

evolucionan en el tiempo. Como resultado, cada gota se desarrolla en un entorno distinto, lo que conduce a trayectorias únicas. Este tipo de interacción transitoria solo puede ser capturado mediante un tratamiento acoplado como el propuesto en este trabajo, y no puede ser reproducido por modelos que imponen perfiles de evaporación.

4.2. Algoritmo de resolución para flamelet con fracción de mezcla máxima desconocida

Para la formulación con $Z_{\max}$ desconocido, el algoritmo desarrollado para el caso transitorio debe modificarse para manejar un dominio computacional $[0, Z_{\max}]$, cuyo tamaño no se conoce *a priori*. Esta dificultad introduce un desafío adicional en la resolución numérica, ya que el dominio del problema depende de una cantidad que forma parte de la solución.

Para abordar este problema, se introduce una fracción de mezcla normalizada definida como

$$\hat{Z} = \frac{Z}{Z_{\max}}, \quad (4.1)$$

de modo que el dominio computacional queda fijado en $\hat{Z} \in [0, 1]$. Aplicando la regla de la cadena, se obtiene

$$\frac{\partial(\cdot)}{\partial Z} = \frac{\partial \hat{Z}}{\partial Z} \frac{\partial(\cdot)}{\partial \hat{Z}} = \frac{1}{Z_{\max}} \frac{\partial(\cdot)}{\partial \hat{Z}}. \quad (4.2)$$

Esta transformación es clave, ya que permite formular el problema en un dominio fijo y, por lo tanto, hacerlo tratable numéricamente.

Dado que la solución analítica para Z , Ec. (3.59), se basa en la suposición de un régimen estacionario [36, 87], las ecuaciones de flamelet para Y_k , T y g_Z se reescriben en términos de la coordenada $\hat{Z}$ como

$$\begin{aligned} 0 = & \frac{\rho D_Z g_Z^2}{\text{Le}_k Z_{\max}^2} \frac{\partial^2 Y_k}{\partial \hat{Z}^2} + \dot{\omega}_k - \frac{\dot{S}_v (1 - \hat{Z} Z_{\max})}{Z_{\max}} \frac{\partial Y_k}{\partial \hat{Z}} + \dot{S}_v (\delta_{kF} - Y_k) - \frac{g_Z}{Z_{\max}} \frac{\partial(\rho \tilde{V}_{k\hat{Z}} Y_k)}{\partial \hat{Z}} \\ & - \frac{g_Z}{Z_{\max}^2} \frac{\partial}{\partial \hat{Z}} \left(\rho D_Z \left(\frac{\text{Le}_k - 1}{\text{Le}_k} \right) g_Z \right) \frac{\partial Y_k}{\partial \hat{Z}}, \end{aligned} \quad (4.3)$$

$$0 = \frac{\rho D_Z g_Z^2 C_p}{Z_{\max}^2} \frac{\partial^2 T}{\partial \hat{Z}^2} + \dot{\omega}_T - \frac{C_p \dot{S}_v (1 - \hat{Z} Z_{\max})}{Z_{\max}} \frac{\partial T}{\partial \hat{Z}} + \dot{S}_e + \frac{\rho D_Z g_Z^2}{Z_{\max}^2} \frac{\partial C_p}{\partial \hat{Z}} \frac{\partial T}{\partial \hat{Z}} - \frac{\rho g_Z}{Z_{\max}^2} \sum_{k=1}^N C_{pk} V_{k\hat{Z}} Y_k \frac{\partial T}{\partial \hat{Z}} \quad (4.4)$$

y

$$0 = g_Z a + \frac{g_Z^2}{Z_{\max}^2} \frac{\partial}{\partial \hat{Z}} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial (\rho D_Z g_Z)}{\partial \hat{Z}} \right) + \frac{g_Z^2}{Z_{\max}} \frac{\partial}{\partial \hat{Z}} \left(\frac{\dot{S}_v (1 - \hat{Z} Z_{\max})}{\rho g_Z} \right). \quad (4.5)$$

A partir de este set de ecuaciones, junto con la solución analítica presentada en la Sección 3.2, se construye un algoritmo iterativo para aproximar $Z_{\max}$ y obtener la estructura del flamelet. El procedimiento comienza imponiendo perfiles iniciales para las especies químicas, la temperatura y g_Z , además de una estimación preliminar de $Z_{\max}$, tomada como el valor estequiométrico, Z_{st} .

Luego se inicia un ciclo iterativo en el que la solución analítica y la solución numérica de las ecuaciones de flamelet se retroalimentan mutuamente. Primero, utilizando los perfiles actuales de g_Z y el valor de $Z_{\max}$ se reconstruye la coordenada física mediante

$$y = y_{\text{stag}} - \int_{Z_{\text{stag}}}^Z \frac{1}{g_Z} dZ, \quad (4.6)$$

donde el subíndice stag indica la posición del punto de estancamiento, $u = 0$, el cual es impuesto.

A partir de este perfil de y se evalúa la solución analítica para generar una nueva estimación de $Z_{\max}$, Ec. (3.59). Asimismo, se obtienen los perfiles de evaporación, $\dot{S}_v$ (Ec. (3.48)) y $\dot{S}_e$. En particular, la fuente de energía calcula como

$$\dot{S}_e(y) = -\dot{S}_v(y) (C_{pF}(T - T_{\text{boil}}) + L_v). \quad (4.7)$$

Finalmente se resuelven las ecuaciones de flamelet para obtener los nuevos perfiles de Y_k , T y g_Z . Este proceso establece un acoplamiento iterativo entre la estimación de $Z_{\max}$ y la solución del flamelet. El procedimiento se repite empleando un esquema pseudo-transitorio para estabilizar la iteración y lograr la convergencia, hasta que el error relativo tanto en los perfiles de Y_k , T y g_Z como en el valor de $Z_{\max}$ se encuentra por debajo del umbral especificado. El esquema completo se ilustra en la Fig. 4.3.

Estos dos algoritmos, en conjunto, constituyen el núcleo del marco computacional

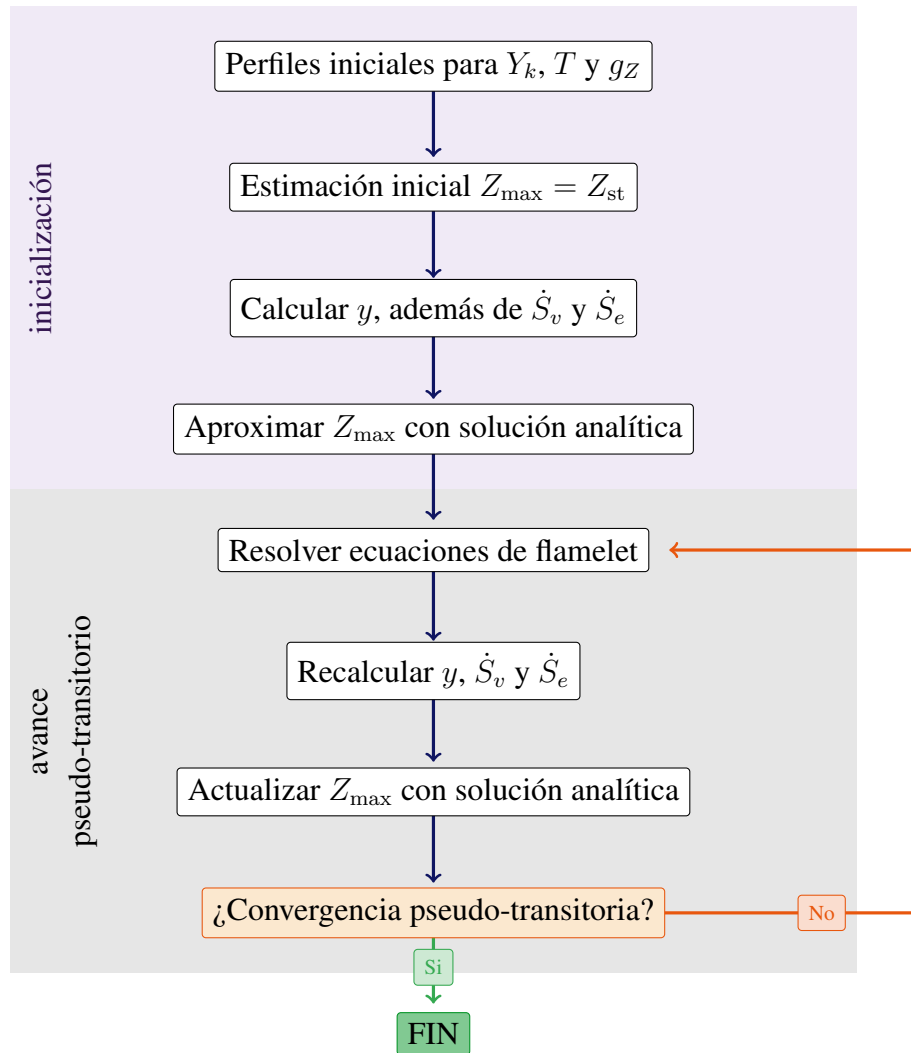


Figura 4.3: Esquema del algoritmo iterativo para la resolución del flamelet con $Z_{\max}$ variable. El método acopla la solución numérica de las ecuaciones de flamelet con la estimación analítica de $Z_{\max}$ hasta alcanzar la convergencia. Las flechas verdes indican el cumplimiento de una condición, mientras que las naranjas su incumplimiento.

desarrollado en esta tesis, permitiendo resolver las ecuaciones de flamelet de spray en condiciones previamente inexploradas, tanto en regímenes transitorios como en dominios de composición no monótonos.

4.3. Implementación numérica: integración temporal y discretización espacial

En esta sección se describen los métodos numéricos empleados para la implementación de los algoritmos presentados anteriormente. En particular, se detallan los esquemas de integración temporal y discretización espacial utilizados en la resolución de las ecuaciones de flamelet de spray.

La integración temporal se realiza mediante un esquema de Euler semi-implícito, mientras que para la discretización espacial se elige un método de diferencias finitas. La elección de estos esquemas responde a un compromiso entre estabilidad numérica, costo computacional y capacidad de acoplar de manera consistente ambas fases. Este enfoque resulta robusto y sencillo de implementar, siendo adecuado para el carácter unidimensional del problema. Además, permite mantener un costo computacional reducido por paso de tiempo, logrando tiempos de simulación razonables, del orden de 12 horas para los casos estudiados, siempre que se seleccione adecuadamente el paso de integración $\Delta\tau$.

4.3.1. Integración temporal: esquema de Euler semi-implícito

A continuación, se detalla la formulación del esquema de Euler semi-implícito empleado para la integración temporal. Para esto, se considera una ecuación genérica para un escalar $\phi(\tau)$

$$\frac{d\phi}{d\tau} = \alpha \frac{\partial^2 \phi}{\partial Z^2} + \beta \frac{\partial \phi}{\partial Z} + \gamma \phi^k + N(\phi) = L(\phi) + N(\phi), \quad (4.8)$$

donde el operador $L(\phi)$ contiene los términos lineales (incluyendo derivadas espaciales y términos proporcionales a ϕ^k que serán linealizados) y $N(\phi)$ reúne otros términos no lineales y las fuentes.

El método consiste en evaluar el operador lineal L de forma implícita en el nuevo paso de tiempo $n + 1$, lo que mejora la estabilidad, mientras que el operador no lineal N se evalúa explícitamente en el paso de tiempo conocido n , evitando la resolución de ecuaciones no lineales.

La expansión de Taylor de ϕ alrededor de τ es

$$\phi(\tau + \Delta\tau) = \phi(\tau) + \Delta\tau \left. \frac{d\phi}{d\tau} \right|_{\tau} + \frac{\Delta\tau^2}{2} \left. \frac{d^2\phi}{d\tau^2} \right|_{\tau} + \mathcal{O}(\Delta\tau^3). \quad (4.9)$$

Despreciando los términos de orden $\Delta\tau^2$ y superiores, la discretización de primer orden resultante es

$$\frac{\phi^{n+1} - \phi^n}{\Delta\tau} = L(\phi^{n+1}) + N(\phi^n), \quad (4.10)$$

donde $\phi^n = \phi(\tau)$ y $\phi^{n+1} = \phi(\tau + \Delta\tau)$. Reordenando los términos para agrupar las incógnitas (ϕ^{n+1}) en el lado izquierdo, se obtiene

$$\phi^{n+1} - \Delta\tau L(\phi^{n+1}) = \phi^n + \Delta\tau N(\phi^n). \quad (4.11)$$

Ya que el operador L es lineal, esta expresión conduce a un sistema lineal de la forma

$$(I - \Delta\tau A^n) \phi^{n+1} = \phi^n + \Delta\tau N(\phi^n), \quad (4.12)$$

donde A^n es la matriz resultante de la discretización espacial del operador L , con sus coeficientes evaluados en el tiempo n , e I es la matriz identidad.

Aunque este enfoque mejora la estabilidad en comparación con un esquema totalmente explícito, el tratamiento explícito de los términos no lineales y la evaluación de la matriz A en el tiempo n introducen dos desafíos. Primero, si bien existen restricciones de estabilidad asociadas a las escalas convectivas, difusivas y reactivas del problema, no es posible definir una condición de estabilidad simple del tipo Courant–Friedrichs–Lewy (CFL). En consecuencia, el paso de tiempo $\Delta\tau$ debe seleccionarse considerando estas restricciones de manera conjunta, usualmente mediante criterios empíricos. Segundo, para mejorar la precisión y la robustez del método, es necesario iterar dentro de cada paso de tiempo. Por ello, se emplea un esquema de avance pseudo-transitorio, en el cual cada paso temporal físico se resuelve mediante varias iteraciones internas. En cada iteración se actualizan la matriz A y las fuentes N utilizando la solución más reciente, resolviendo nuevamente el sistema lineal hasta que ϕ converge. Solo entonces se avanza al siguiente paso de tiempo físico.

4.3.2. Discretización espacial: método de diferencias finitas

A continuación, se presenta la discretización espacial empleada, basada en formulaciones estándar adaptadas a mallas no uniformes. Para ello, se utiliza un esquema de diferencias finitas de segundo orden aplicado al operador diferencial espacial

$$L(\phi) = \alpha \frac{\partial^2 \phi}{\partial Z^2} + \beta \frac{\partial \phi}{\partial Z} + \gamma \phi^k, \quad (4.13)$$

donde los coeficientes α , β y γ se evalúan explícitamente en el tiempo n , y el término no lineal ϕ^k se linealiza. Esto resulta en

$$L(\phi^{n+1}) = \alpha^n \left. \frac{\partial^2 \phi}{\partial Z^2} \right|^{n+1} + \beta^n \left. \frac{\partial \phi}{\partial Z} \right|^{n+1} + \gamma^n (\phi^{k-1})^n \phi^{n+1}. \quad (4.14)$$

El método consiste en reemplazar las derivadas continuas por aproximaciones algebraicas en cada nodo Z_i de una malla que puede ser no uniforme, Fig. 4.4. Estas aproximaciones se derivan de expansiones en serie de Taylor alrededor del nodo i [91]. Las siguientes discretizaciones se aplican también a las derivadas que puedan aparecer en el operador $N(\phi)$ (ver Ec. (4.8)).

Primera derivada centrada. En una malla no uniforme, las expansiones en los nodos $i - 1$ y $i + 1$ son

$$\phi_{i-1} = \phi_i - \Delta Z_{i-1} \left. \frac{\partial \phi}{\partial Z} \right|_i + \frac{\Delta Z_{i-1}^2}{2} \left. \frac{\partial^2 \phi}{\partial Z^2} \right|_i + \mathcal{O}(\Delta Z^3), \quad (4.15)$$

$$\phi_{i+1} = \phi_i + \Delta Z_{i+1} \left. \frac{\partial \phi}{\partial Z} \right|_i + \frac{\Delta Z_{i+1}^2}{2} \left. \frac{\partial^2 \phi}{\partial Z^2} \right|_i + \mathcal{O}(\Delta Z^3), \quad (4.16)$$

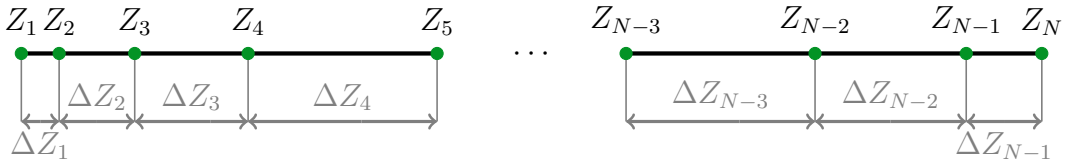


Figura 4.4: Esquema de una malla irregular unidimensional.

donde $\Delta Z_{i-1} = Z_i - Z_{i-1}$ y $\Delta Z_{i+1} = Z_{i+1} - Z_i$. Restando estas ecuaciones y despreciando términos de orden $\mathcal{O}(\Delta Z^2)$, se obtiene:

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial Z} \right|_i = \frac{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}}{\Delta Z_{i+1} + \Delta Z_{i-1}}. \quad (4.17)$$

Segunda derivada para malla irregular. Sumando las expansiones anteriores, se obtiene

$$\left. \frac{\partial^2 \phi}{\partial Z^2} \right|_i = \frac{2}{\Delta Z_{i+1}^2 + \Delta Z_{i-1}^2} \left[\phi_{i+1} - 2\phi_i + \phi_{i-1} - \left. \frac{\partial \phi}{\partial Z} \right|_i (\Delta Z_{i+1} - \Delta Z_{i-1}) \right] \quad (4.18)$$

$$\left. \frac{\partial^2 \phi}{\partial Z^2} \right|_i = \frac{4(\Delta Z_{i-1}\phi_{i+1} - (\Delta Z_{i+1} + \Delta Z_{i-1})\phi_i + \Delta Z_{i+1}\phi_{i-1})}{(\Delta Z_{i+1}^2 + \Delta Z_{i-1}^2)(\Delta Z_{i+1} + \Delta Z_{i-1})} \quad (4.19)$$

donde en la Ec. (4.19), se usó la Ec. (4.17) para eliminar la primera derivada. Cabe destacar que ambas discretizaciones se reducen a los esquemas centrados estándar cuando $\Delta Z = \Delta Z_{i-1} = \Delta Z_{i+1}$.

Luego, reemplazando las Ecs.(4.17) y (4.19) en $L(\phi^{n+1})$, para nodos interiores se obtiene

$$L_i^{n+1} = \hat{a}_i^n \phi_{i-1}^{n+1} + \hat{b}_i^n \phi_i^{n+1} + \hat{c}_i^n \phi_{i+1}^{n+1}, \quad i = 2, \dots, N-1, \quad (4.20)$$

con coeficientes explícitos

$$\hat{a}_i^n = \frac{4\alpha^n \Delta Z_{i+1}}{(\Delta Z_{i+1}^2 + \Delta Z_{i-1}^2)(\Delta Z_{i+1} + \Delta Z_{i-1})} - \frac{\beta^n}{\Delta Z_{i+1} + \Delta Z_{i-1}} \quad (4.21)$$

$$\hat{b}_i^n = -\frac{4\alpha^n}{(\Delta Z_{i+1}^2 + \Delta Z_{i-1}^2)} + \gamma^n (\phi^{k-1})^n \quad (4.22)$$

$$\hat{c}_i^n = \frac{4\alpha^n \Delta Z_{i-1}}{(\Delta Z_{i+1}^2 + \Delta Z_{i-1}^2)(\Delta Z_{i+1} + \Delta Z_{i-1})} + \frac{\beta^n}{\Delta Z_{i+1} + \Delta Z_{i-1}} \quad (4.23)$$

Al ensamblar las discretizaciones se obtiene un sistema tridiagonal

$$\begin{pmatrix} b_1^n & c_1^n & 0 & & \cdots & 0 \\ a_2^n & b_2^n & c_2^n & 0 & & \vdots \\ 0 & a_3^n & b_3^n & c_3^n & & \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & a_{N-1}^n & b_{N-1}^n & c_{N-1}^n \\ 0 & \cdots & & 0 & a_N^n & b_N^n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_1^{n+1} \\ \phi_2^{n+1} \\ \phi_3^{n+1} \\ \vdots \\ \phi_{N-1}^{n+1} \\ \phi_N^{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_1^n \\ d_2^n \\ d_3^n \\ \vdots \\ d_{N-1}^n \\ d_N^n \end{pmatrix}, \quad (4.24)$$

cuyos coeficientes para nodos interiores son

$$a_i^n = -\Delta\tau \hat{a}_i^n \quad (4.25)$$

$$b_i^n = 1 - \Delta\tau \hat{b}_i^n \quad (4.26)$$

$$c_i^n = -\Delta\tau \hat{c}_i^n \quad (4.27)$$

$$d_i^n = \phi_i^n + \Delta\tau N(\phi_i^n), \quad (4.28)$$

mientras que en los extremos, $i = 1$ y $i = N$, se imponen las condiciones de contorno, que pueden ser de tipo Dirichlet o Neumann. Para el primero, $\phi_i^{n+1} = \phi_i^{\text{imp}}$, lo que equivale a $a_i = c_i = 0$ y $b_i = 1$. Mientras que para el tipo Neumann, $D_{\phi,i}^{n+1} \partial_Z \phi|_i^{n+1} = q_i$, la cual es discretizada con diferencias adelantadas (en $i = 1$) o atrasadas (en $i = N$).

Para la resolución de este sistema tridiagonal se emplea el algoritmo de Thomas, que puede interpretarse como una versión simplificada del método de eliminación Gaussiana con pivoteo hacia adelante y sustitución hacia atrás. El procedimiento se describe a continuación.

En la primera ecuación,

$$b_1^n \phi_1^{n+1} + c_1^n \phi_2^{n+1} = d_1^n, \quad (4.29)$$

se selecciona como pivote el coeficiente b_1^n y se normaliza la fila dividiendo c_1^n y d_1^n por dicho pivote, de modo que el coeficiente de ϕ_1^{n+1} es uno. A continuación, para cada fila $i = 2, \dots, N$, se utiliza la ecuación anterior ya normalizada para eliminar el coeficiente a_i^n asociado a ϕ_{i-1}^{n+1} . Esto se logra modificando el pivote actual mediante

$$b_i^n \leftarrow b_i^n - c_{i-1}^n a_i^n, \quad (4.30)$$

y actualizando los coeficientes de acuerdo a

$$c_i^n \leftarrow \frac{c_i^n}{b_i^n}, \quad d_i^n \leftarrow \frac{d_i^n - d_{i-1}^n a_i^n}{b_i^n}. \quad (4.31)$$

Con este proceso, la matriz queda transformada en una forma triangular superior, con todos los elementos de la diagonal inferior reducidos a cero.

La segunda fase consiste en la sustitución hacia atrás. La última ecuación, ya normalizada, proporciona directamente

$$\phi_N^{n+1} = d_N^n. \quad (4.32)$$

A partir de ahí, para $i = N-1, \dots, 1$, se obtiene cada incógnita restando la contribución de la variable siguiente

$$\phi_i^{n+1} = d_i^n - c_i^n \phi_{i+1}^{n+1}. \quad (4.33)$$

Esta formulación evita divisiones redundantes y es numéricamente estable cuando la matriz es diagonalmente dominante (lo que ocurre, por ejemplo, para $\alpha > 0$ y suficientemente grande respecto de β y γ con $\Delta\tau$ moderado).

En este capítulo se desarrollaron e implementaron los algoritmos numéricos necesarios para la resolución de las ecuaciones de flamelet de spray en configuraciones transitorias y en dominios de fracción de mezcla no monótonos. Estos algoritmos permiten abordar de manera consistente el acoplamiento entre fases y la definición del dominio de resolución en el espacio de composición, constituyendo así el núcleo del marco computacional propuesto en esta tesis.

Gracias a estas herramientas, es posible obtener soluciones de las ecuaciones en condiciones que no habían sido previamente exploradas en la literatura. En el capítulo siguiente se presenta la verificación de los códigos desarrollados y su aplicación a distintos casos de estudio.

Capítulo 5

Verificación de los algoritmos

En este capítulo se presentan los procedimientos de verificación numérica de los códigos desarrollados en esta tesis. Dado que estos permiten resolver las ecuaciones de flamelet de spray en configuraciones que no habían sido abordadas previamente, su verificación se realiza mediante la comparación con configuraciones de referencia bien establecidas en la literatura. En particular, se considera una llama de flujos opuestos como caso de referencia, sobre la cual se evalúa la capacidad de los algoritmos para reproducir soluciones consistentes en el límite correspondiente.

5.1. Modelo de verificación: llama de flujos opuestos

Para verificar los códigos desarrollados en esta tesis, se utiliza la configuración estacionaria de flujos opuestos (ver Fig. 5.1), ampliamente empleada como caso canónico en el estudio de flamelets. Este sistema, físicamente realista, puede describirse mediante un conjunto de ecuaciones unidimensionales a través de una transformación de similaridad, lo que permite establecer una correspondencia directa con la formulación en el espacio de composición.

En esta sección se presenta el modelo matemático asociado, detallando primero su formulación en el espacio físico y luego su reducción a un sistema unidimensional. Adicionalmente, se introduce una extensión de la formulación de la fase líquida en el espacio de composición, con el fin de incorporar los efectos bidimensionales de la configuración de flujos opuestos dentro del marco de flamelet. Esta consistencia constituye la base para evaluar la consistencia de las soluciones obtenidas mediante los algoritmos y códigos propuestos.

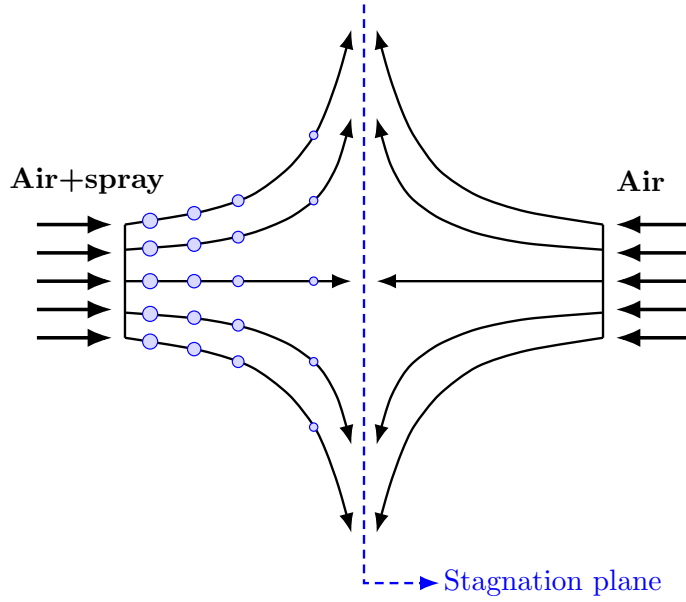


Figura 5.1: Esquema de la configuración de flujos opuestos.

5.1.1. Modelo en espacio físico

Esta configuración se utiliza como caso de referencia para evaluar la capacidad de los algoritmos desarrollados de reproducir soluciones consistentes en el límite de flujo en el espacio físico.

La configuración se modela mediante un enfoque Euleriano-Lagrangiano. La fase gaseosa se trata como un continuo y se resuelven las ecuaciones de transporte para la masa, el momento radial, las especies químicas y la energía en un sistema axisimétrico y estacionario [85]

$$\frac{1}{r} \frac{\partial(\rho u_r r)}{\partial r} + \frac{\partial(\rho u_y)}{\partial y} = \dot{S}_v \quad (5.1)$$

$$\rho u_r \frac{\partial u_r}{\partial r} + \rho u_y \frac{\partial u_r}{\partial y} = -\frac{dp}{dr} + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial u_r}{\partial y} \right) + \dot{S}_m, \quad (5.2)$$

$$\rho u_y \frac{dY_k}{dy} = -\frac{d(\rho V_{ky} Y_k)}{dy} + \dot{\omega}_k + \dot{S}_v(\delta_{kF} - Y_k) \quad (5.3)$$

y

$$\rho C_p u_y \frac{dT}{dy} = \frac{d}{dy} \left(\lambda \frac{dT}{dy} \right) - \rho \frac{dT}{dy} \sum_{k=1}^N (C_{pk} V_{ky} Y_k) + \dot{\omega}_T + \dot{S}_e. \quad (5.4)$$

La evolución de la masa, temperatura y movimiento de la gota se describe mediante

el mismo modelo Lagrangiano introducido en la Sección 3.1.2, adaptado al sistema de coordenadas bidimensional. Los términos fuente $\dot{S}_v$ y $\dot{S}_e$ se calculan de acuerdo a las Ecs. (3.30) y (3.31), mientras que la fuente de momento debido a la evaporación, $\dot{S}_m$, se calcula como [85]

$$\dot{S}_m = \sum_{j=1}^J -n_j \left(m_j \frac{du_{rlj}}{dt_l} + \dot{m}_j (u_r - u_{rlj}) \right). \quad (5.5)$$

De esta manera, el modelo en espacio físico queda completamente definido, lo que permite introducir, en la siguiente sección, la transformación de similaridad que reduce el sistema bidimensional a un conjunto de ecuaciones unidimensionales.

5.1.2. Transformación de similaridad

La estructura del flujo permite aplicar una transformación de similaridad que reduce el problema a un conjunto de ecuaciones diferenciales ordinarias unidimensionales [85], el que posteriormente fue extendido por Gutheil y Sirignano [23] para incluir química detallada y propiedades termoquímicas variables. Esta transformación introduce una nueva coordenada, η , y una función de corriente, f , definidas como [23]

$$\eta = \int_0^y \rho dy' \quad , \quad f(\eta) = \int_0^\eta \frac{u_r}{r} d\eta'. \quad (5.6)$$

Al aplicar esta transformación, las ecuaciones de la fase gaseosa se expresan como un sistema unidimensional en η . La ecuación de momento se convierte en una ecuación para la función de corriente $f(\eta)$ [23]

$$\frac{d}{d\eta}(\mu \rho f'') = \left[\int_0^\eta \frac{\dot{S}_v}{\rho} d\eta' - 2f \right] f'' + (f')^2 - \frac{\rho_0 a^2}{\rho} - \frac{\dot{S}_m}{\rho r}, \quad (5.7)$$

donde f' y f'' son la primera y segunda derivada de f con respecto a η .

De manera análoga, las ecuaciones de especies químicas y energía adoptan la forma [23, 85]

$$\frac{d(\rho V_{k\eta} Y_k)}{d\eta} + \left[\int_0^\eta \frac{\dot{S}_v}{\rho} d\eta' - 2f \right] \frac{dY_k}{d\eta} = \frac{\dot{\omega}_k}{\rho} + \frac{\dot{S}_v}{\rho} (\delta_{kF} - Y_k) \quad (5.8)$$

y

$$C_p \left[\int_0^\eta \frac{\dot{S}_v}{\rho} d\eta' - 2f \right] \frac{dT}{d\eta} = \frac{d}{d\eta} \left(\lambda \rho \frac{dT}{d\eta} \right) - \rho \frac{dT}{d\eta} \sum_{k=1}^N (C_{pk} V_{k\eta} Y_k) + \frac{\dot{\omega}_T}{\rho} + \frac{\dot{S}_e}{\rho}, \quad (5.9)$$

respectivamente.

Para la fase líquida, los modelos de evaporación y transferencia de calor son los mismos que los presentados en la Sección 3.1.2. Sin embargo, las ecuaciones para la dinámica y la densidad del número de gotas deben transformarse para ser descritos en este nuevo espacio. La dinámica de la gota se describe en dos dimensiones, r y y . Para la segunda de ellas, se aplica la transformación de similaridad con tal de obtener la posición de la gota en el espacio η . Las ecuaciones resultantes son [23, 85]

$$\frac{d^2 r_l}{dt_l^2} + \frac{9\nu\rho}{2R^2\rho_l} \frac{dr_l}{dt_l} = \frac{9\nu\rho}{2R^2\rho_l} u_r, \quad (5.10)$$

y

$$\frac{d^2 \eta_l}{dt_l^2} - \frac{1}{\rho} \frac{d\rho}{d\eta} \left(\frac{d\eta_l}{dt_l} \right)^2 + \frac{9\nu}{2R^2\rho_l} \frac{d\eta_l}{dt_l} = \frac{9\nu}{2R^2\rho_l} \left[\int_0^{\eta_l} \frac{\dot{S}_v}{\rho} d\eta' - 2f \right], \quad (5.11)$$

respectivamente, donde, de acuerdo a la Ec. (5.6) se tiene que $u_r = f'r$. Finalmente, la ecuación para la densidad del número de gotas, n , se transforma a una expresión algebraica en el nuevo sistema de coordenadas [23, 85]

$$n(\tau_l) = \frac{n_0 r_0 \eta'_{l0}}{\rho_0} \frac{\rho}{r \eta'_l} \quad (5.12)$$

Con ello, el problema bidimensional original se reduce a un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias acopladas en la variable η . Esta formulación permite obtener soluciones en el espacio físico que pueden emplearse como referencia para evaluar la consistencia de las soluciones obtenidas mediante la formulación de flamelets. El algoritmo de resolución de este sistema sigue el enfoque propuesto por Sirignano et al. [23, 85], y fue utilizado en mi tesis de magister [92].

5.1.3. Extensión formulación de flamelet de fase líquida

Dado que la configuración de flujos puestos es bidimensional, en función de r y η , la descripción unidimensional de la dinámica de la gota en espacio de composición, formulada en términos de Z , debe extenderse para permitir una comparación consistente entre ambas descripciones.

Para ello, se introduce una función de corriente en el espacio de composición, análoga a la definida en el espacio físico, Ec. (5.6), dada por

$$f(Z) = \int_0^Z \frac{u_r(Z')}{r} dZ', \quad (5.13)$$

donde r es la coordenada radial, y la velocidad radial u_r se expresa como

$$u_r(Z) = r \frac{df}{dZ}. \quad (5.14)$$

La ecuación que describe la dinámica radial de las gotas, Ec. (5.10), se mantiene sin modificaciones entre ambas formulaciones. Además, dado que en la configuración de flujos opuestos el gradiente de la función de corriente resulta independiente de la coordenada, permite utilizar directamente el valor obtenido desde la solución en el espacio físico (es decir, $df/dZ = df/d\eta$). De esta manera, se evita introducir una ecuación adicional en el espacio de composición para f [20], manteniendo la consistencia entre ambas descripciones y simplificando el proceso de verificación.

Por otro lado, la ecuación para la densidad del número de gotas, n , también se modifica. Dado que las gotas ya no se desplazan exclusivamente a lo largo del flamelet, la conservación del número de gotas en una celda debe considerar la variación del área transversal asociada a la línea de corriente ($A \neq A_0$). En consecuencia, la densidad del número de gotas se ajusta para incorporar esta dependencia geométrica, lo que conduce a

$$n = \frac{n_0 u'_{dZ,0} r_0}{g_{Z,0}} \frac{g_Z}{u'_{dZ} r}. \quad (5.15)$$

En conjunto, esta formulación permite establecer una correspondencia consistente entre la configuración de flujos opuestos y la formulación de flamelet de spray presentada en esta tesis. Esto proporciona un marco de referencia adecuado para evaluar la capacidad de los algoritmos propuestos de reproducir soluciones conocidas en un

límite bien definido, lo cual se analiza en las secciones siguientes.

5.2. Verificación del código transitorio

Para verificar la implementación de la formulación transitoria, se comparan los perfiles obtenidos con los de una configuración de flujos opuestos. En la Sección 5.2.1 se comparan los resultados obtenidos mediante el modelo de flamelet y la formulación en espacio físico. Mientras que en la Sección 5.2.2 se discuten las principales limitaciones numéricas asociadas a esta implementación.

5.2.1. Comparación flamelet-llama de flujos opuestos

La verificación del código de flamelet desarrollado se realiza mediante la comparación directa de los perfiles obtenidos con los correspondientes a una llama de flujos opuestos perturbada por un spray. Esta elección permite evitar, en esta etapa, el problema de la no monotonicidad de la fracción de mezcla, ya que en esta configuración los valores de Z en los bordes son, respectivamente, cero y uno.

Para ello, el código de flamelet se inicializa con una estructura de llama gaseosa de flujos opuestos, es decir, con los perfiles de temperatura, fracciones másicas de las especies químicas y gradiente de la fracción de mezcla. Posteriormente, se imponen el perfil de velocidad y el valor de la derivada de la función de corriente, f' , obtenidos de la simulación de la llama de flujos opuestos perturbada por spray. Luego, se inyecta

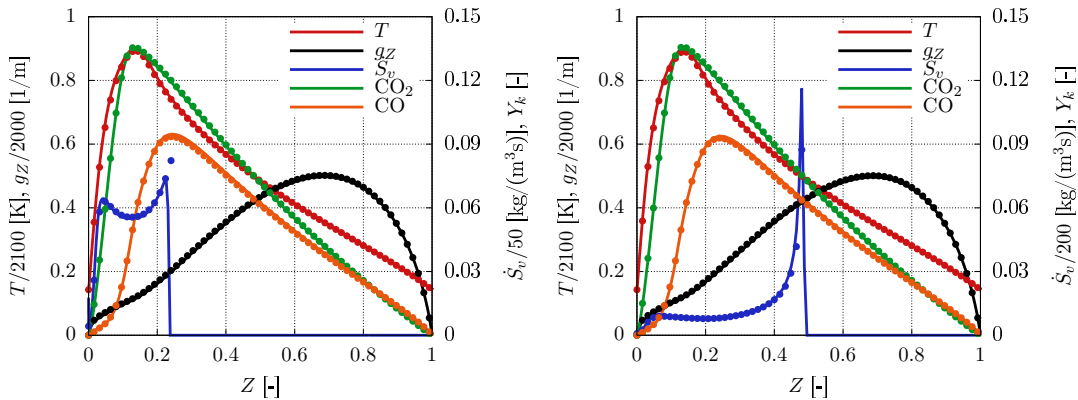


Figura 5.2: Estructura de una llama de flujos opuestos gaseoso perturbado por un spray a 200/s (izquierda) y 300/s (derecha). Las líneas representan la configuración de flujos opuestos, mientras que los puntos representan el flamelet.

un grupo de gotas en cada paso temporal (equivalente a $\tau_{\text{no, inj}} = 0$), emulando una inyección continua, hasta alcanzar el estado estacionario. Finalmente, la estructura estacionaria obtenida se compara con los perfiles calculados directamente mediante la formulación en espacio físico de flujos opuestos.

La verificación se realiza para dos llamas con distintas tasas de deformación, 200 y 300/s, respectivamente, empleando los mismos parámetros para la fase líquida: una relación de combustible líquido/aire $E = 0,1$, radios iniciales de $10 \mu\text{m}$ y velocidades iniciales de $0,5 \text{ m/s}$.

En la Fig. 5.2 se observa que el código de flamelet transitorio, junto con la descripción lagrangiana de la fase líquida, reproduce adecuadamente la estructura de una llama de flujos opuestos una vez alcanzado el estado estacionario. El mayor error se presenta en el perfil de $\dot{S}_v$ cerca del punto donde las gotas completan su evaporación, un comportamiento conocido y previamente reportado por Archambault [93]. Este error no se debe directamente al modelo de gotas, sino que es una consecuencia inherente del acople entre la formulación Lagrangiana de la fase líquida y su contraparte Euleriana en la fase gaseosa. A pesar de esta limitación, los resultados muestran un alto nivel de concordancia entre ambas formulaciones, lo que respalda la correcta implementación del modelo y del algoritmo de resolución propuesto.

5.2.2. Limitaciones del código

Las limitaciones numéricas más relevantes de la implementación están directamente relacionadas con el comportamiento del gradiente de la fracción de mezcla, g_Z , en regiones donde este se aproxima a cero. La dificultad central surge cuando la trayectoria de la gota atraviesa dichas regiones, las cuales aparecen naturalmente en los extremos del dominio y, en ciertos casos, también en zonas internas de la estructura del flamelet.

Esta situación tiene dos consecuencias numéricas principales. Por una parte, la transformación al espacio de composición, dependiente de g_Z , induce una compresión espacial significativa (ver Ec. (4.6)), en la cual intervalos reducidos en Z representan extensiones considerables en el espacio físico. Esto implica una pérdida de resolución efectiva, lo que puede comprometer la adecuada representación de procesos como la evaporación.

Por otra parte, y de mayor relevancia desde el punto de vista físico, ya que afecta directamente la dinámica de la gota, es que la velocidad en el espacio de composición

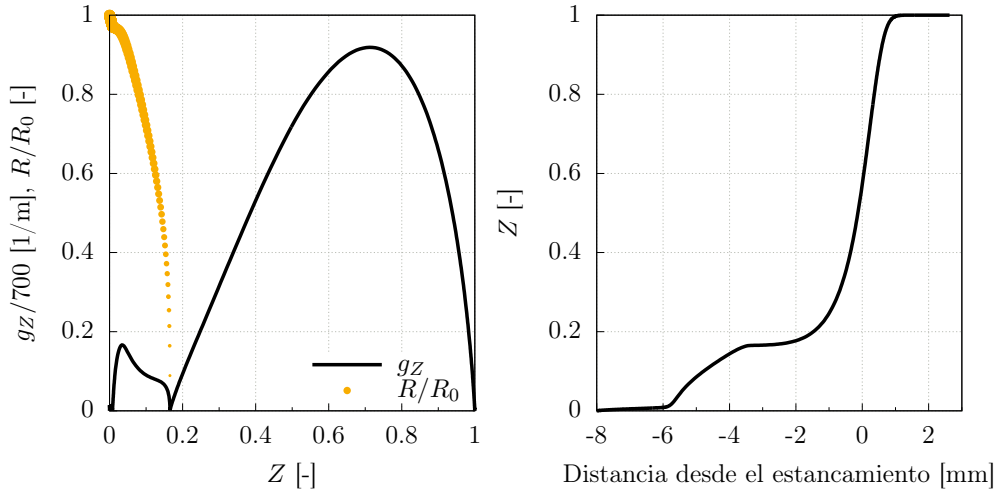


Figura 5.3: Perfiles de g_Z y radio instantáneo de la gota (izquierda) y la fracción de mezcla (derecha), para una llama de flujos opuestos con $a = 100/\text{s}$, $R_0 = 10 \mu\text{m}$ y $u_0 = 0,75 \text{ m/s}$.

depende directamente de g_Z a través de

$$\frac{dZ_l}{d\tau} = g_Z \frac{dx_l}{d\tau}, \quad (5.16)$$

en consecuencia, en regiones donde g_Z es extremadamente pequeño, el movimiento de la gota en Z se ralentiza, lo que induce una acumulación artificial de evaporación en esas regiones. Este comportamiento no tiene un análogo directo en la descripción en el espacio físico, donde la evaporación se distribuye de manera más uniforme.

La situación descrita se ejemplifica en la Fig. 5.3, donde se presenta una simulación de una llama de flujos opuestos en la que aparecen zonas internas con $g_Z \approx 0$. En este caso, el código de flamelet presenta limitaciones para reproducir dicha estructura, ya que, como se mencionó anteriormente, la evolución de la gota en el espacio de composición se ve fuertemente restringida en estas regiones, quedando artificialmente detenida. Por lo tanto, una posible transición entre esta estructura de llama y otra con mayor penetración no puede ser capturada por el modelo.

Por otra parte, la Fig. 5.4 muestra un caso de alta penetración, en el cual la gota atraviesa el plano de estancamiento y alcanza el extremo del dominio, $Z = 1$, donde $g_Z = 0$. En estas condiciones, múltiples estados físicos corresponden a un mismo valor de Z , lo que conduce a una pérdida de unicidad en la representación en el espacio de flamelet. Como consecuencia, este tipo de penetración no puede ser descrito

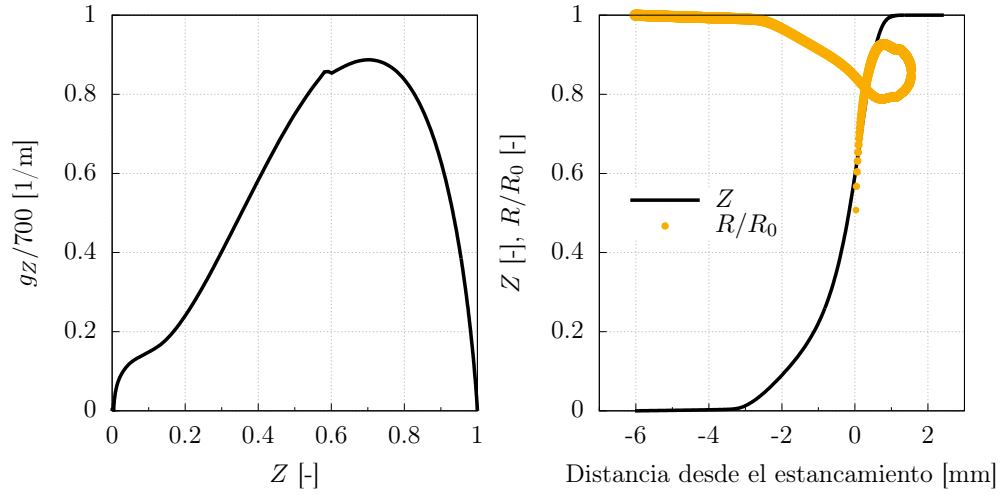


Figura 5.4: Perfiles de g_z (izquierda) y del radio instantáneo de la gota junto con la fracción de mezcla (derecha), para una llama de flujos opuestos con $a = 100/s$, $R_0 = 30 \mu m$ y $u_0 = 0,75$ m/s.

adecuadamente mediante la presente formulación en el espacio de composición. No obstante, para casos de penetración moderada, en los que la gota no alcanza el extremo del dominio, el modelo es capaz de capturar adecuadamente, incluso, fenómenos como el *droplet reversal*, manteniendo una representación consistente de la dinámica acoplada.

Cabe destacar que la identificación de estos regímenes de operación no es trivial debido al carácter fuertemente no lineal del sistema acoplado. En la práctica, esto implicó un proceso iterativo de exploración del espacio de parámetros, incluyendo la tasa de deformación, el radio y la velocidad inicial de las gotas, la relación combustible líquido/aire, y, en el caso de inyección discontinua, los tiempos característicos τ_{inj} y $\tau_{no,inj}$.

En este contexto, la aparición de las limitaciones descritas no puede asociarse a un único parámetro, sino que depende de la interacción entre ellos. Por ejemplo, relaciones combustible líquido-aire elevadas tienden a favorecer la aparición de zonas internas con $g_z \approx 0$, mientras que combinaciones de radios y velocidades iniciales altas, junto con tasas de deformación suficientemente grandes, pueden conducir a escenarios de alta penetración de la gota. Sin embargo, estos comportamientos no son independientes: valores elevados de la tasa de deformación pueden no generar dificultades si están acompañados de radios y velocidades reducidos, y, de manera análoga, condiciones más extremas en algunos parámetros pueden ser admisibles bajo configuraciones específicas

del resto.

Asimismo, en configuraciones con inyección discontinua, estos límites tienden a desplazarse, modificando las condiciones bajo las cuales el modelo proporciona resultados consistentes. Esta dependencia acoplada entre parámetros dificulta la delimitación precisa de las regiones de validez del modelo, y repercute directamente en el costo computacional y en el tiempo requerido para la obtención de resultados confiables.

Finalmente, es importante enfatizar que estas limitaciones no invalidan la formulación ni el código desarrollado, sino que delimitan su rango de aplicabilidad. En este sentido, el modelo constituye una herramienta consistente para el estudio de flamelets con spray dentro de un rango bien definido de condiciones de operación, el cual debe ser considerado al interpretar los resultados.

5.3. Verificación del código con fracción de mezcla máxima desconocida

La verificación de este segundo código se realiza mediante dos enfoques complementarios. En primer lugar, se evalúa que la solución analítica programada satisface la ecuación de balance de la fracción de mezcla, Ec. (3.49). En segundo lugar, se analiza su acople con el resto de las ecuaciones de flamelet mediante la comparación con soluciones obtenidas en la configuración de flujos opuestos presentada en la Sección 5.1.

5.3.1. Evaluación de la solución analítica en la ecuación de transporte

Con el fin de verificar la correcta implementación de la solución analítica de Z (Ec. (3.59)), esta se evalúa directamente en la ecuación de transporte correspondiente (Ec. (3.49)). Para este propósito, se consideran estructuras de flamelet simétricas, ilustradas esquemáticamente en la Fig. 5.5, lo que permite simplificar el análisis. Si bien se considera una configuración simétrica para simplificar el análisis (Fig. 5.5), la formulación es general y puede extenderse a configuraciones asimétricas.

El dominio físico se define tal que $y \in] - \infty, 0]$, siendo $y = 0$ el punto de estancamiento ($u = 0$). Dado que se trata de una configuración simétrica, las

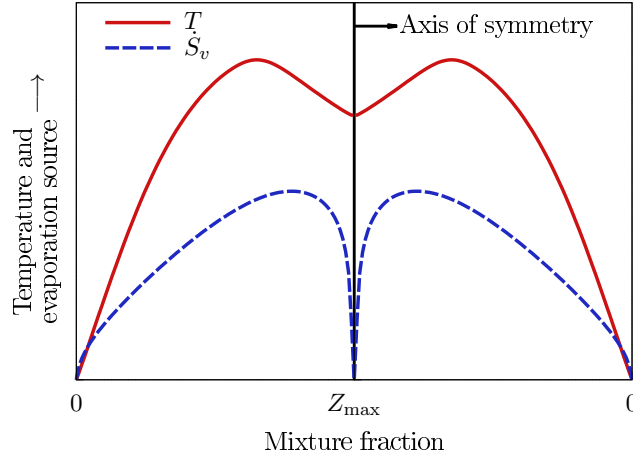


Figura 5.5: Representación esquemática de una estructura de flamelet simétrico [36].

condiciones de contorno utilizadas para determinar α y β (que, debido a la evaporación presente en toda la llama, son idénticas en todo el dominio) son

$$Z(y \rightarrow -\infty) = 0 \quad (5.17)$$

y

$$\left. \frac{dZ}{dy} \right|_{y=0} = 0, \quad (5.18)$$

respectivamente.

El perfil de evaporación se prescribe mediante los coeficientes A , B y C de la Ec. (3.48), definidos por

$$A = -\frac{4\dot{S}_{v,\max}}{l_f^2}, \quad B = -\frac{4\dot{S}_{v,\max}}{l_f} \quad y \quad C = 0, \quad (5.19)$$

donde l_f es el largo del flamelet, definido como la región del dominio en espacio físico donde la fracción de mezcla tiene valores distintos de cero. Con la Ec. (5.19), $\dot{S}_v$ puede expresarse como

$$\dot{S}_v(y) = -\frac{4\dot{S}_{v,\max}}{l_f^2}y^2 - \frac{4\dot{S}_{v,\max}}{l_f}y, \quad (5.20)$$

Esta elección de A , B y C permite obtener un perfil parabólico con un valor máximo de $\dot{S}_v$ ubicado en $y = l_f/2$, como se muestra en la Fig 5.6.

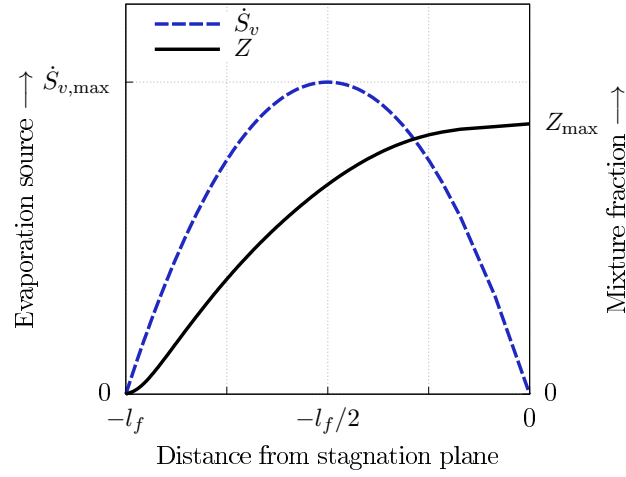


Figura 5.6: Esquema del perfil de evaporación parabólico en el espacio físico, Ec. (5.20), y su distribución de Z asociada [36].

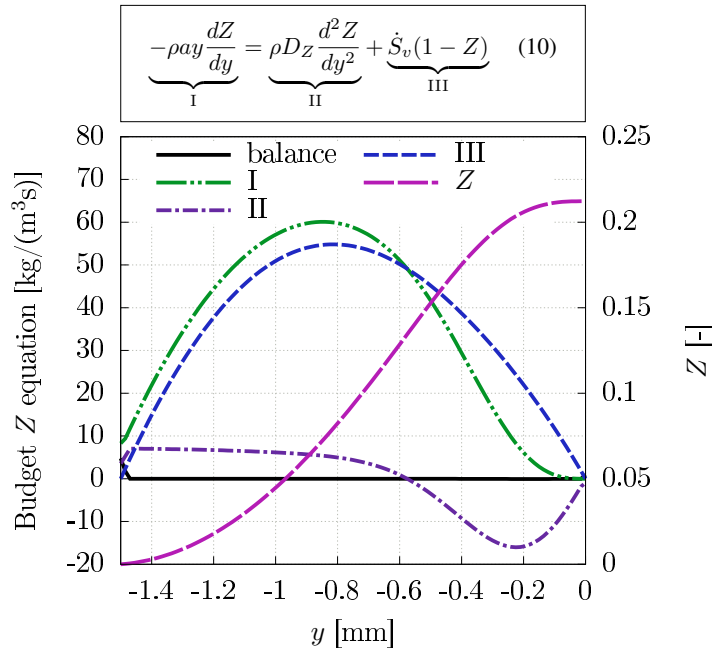


Figura 5.7: Contribuciones de la ecuación de Z , Ec. (3.49), y el perfil de Z . Para la conveniencia del lector, la ecuación es presentada en la parte superior de la figura.

Para los cálculos se fija $\dot{S}_{v,\max} = 60 \text{ kg}/(\text{m}^3\text{s})$, una tasa de deformación $a = 300/\text{s}$, y propiedades termofísicas correspondientes a aire a 300 K.

En la Fig. 5.7 se presentan las contribuciones individuales de la Ec. (3.49), junto con

el perfil de Z . Se observa que los términos I, II y III están completamente balanceados, lo que confirma que la solución analítica programada satisface la ecuación gobernante.

5.3.2. Comparación flamelet-llama de flujos opuestos

Finalmente, para evaluar el acople entre la solución analítica y las ecuaciones de flamelet se realiza una comparación con llamas de flujos opuestos. Se consideran dos llamas con un radio de gota inicial $R_0 = 10 \mu\text{m}$ y velocidad inicial $u_0 = 0,5 \text{ m/s}$, sometidas a una tasa de deformación de 200 y 500/s, respectivamente. A partir de los perfiles de evaporación obtenidos numéricamente, se determinan los coeficientes A , B y C que definen un perfil cuadrático de la forma

$$\dot{S}_v(y) = Ay^2 + By + C, \quad (5.21)$$

de modo que este perfil reproduzca de la mejor forma posible los datos numéricos. Para ello se utiliza el método de mínimos cuadrados, minimizando la suma del error cuadrático, E , entre el perfil de la llama de flujos opuestos $\dot{S}_{v,\text{fo}}(y_i)$ y el perfil cuadrático ajustado $\dot{S}_{v,\text{aj}}(y_i)$ sobre todos los puntos discretos y_i del dominio

$$\min(E(A, B, C)) = \min \sum_{i=1}^N \left[\dot{S}_{v,\text{fo}}(y_i) - (Ay_i^2 + By_i + C) \right]^2. \quad (5.22)$$

Este procedimiento se formula de manera analítica, derivando la función de error con respecto a los coeficientes y anulándolas

$$\frac{\partial E}{\partial A} = 0, \quad \frac{\partial E}{\partial B} = 0, \quad \frac{\partial E}{\partial C} = 0, \quad (5.23)$$

obteniendo así un sistema lineal que se resuelve sin necesidad de iteraciones. Al derivar y reagrupar se obtiene el siguiente sistema de ecuaciones

$$\begin{bmatrix} \sum y_i^4 & \sum y_i^3 & \sum y_i^2 \\ \sum y_i^3 & \sum y_i^2 & \sum y_i \\ \sum y_i^2 & \sum y_i & N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A \\ B \\ C \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum y_i^2 \dot{S}_{v,\text{fo}}(y_i) \\ \sum y_i \dot{S}_{v,\text{fo}}(y_i) \\ \sum \dot{S}_{v,\text{fo}}(y_i) \end{bmatrix}. \quad (5.24)$$

La resolución de este sistema permite obtener los valores óptimos de A , B y C , garantizando que el perfil cuadrático sea el que mejor aproxima al de la llama de flujos opuestos correspondiente.

La Fig. 5.8 muestra la comparación entre los perfiles de evaporación importados, $\dot{S}_{v,fo}$, y los perfiles cuadráticos ajustados, $\dot{S}_{v,aj}$. En la Fig. 5.9 se comparan las estructuras de T , Y_{CO} y Y_{CO_2} obtenidas con ambos perfiles. Si bien no coinciden exactamente, ambos conjuntos conducen a estructuras cualitativa y cuantitativamente similares, lo que indica que la formulación es capaz de mantener un comportamiento consistente frente a variaciones en la representación de los términos fuente.

En este sentido, los resultados indican que el acople numérico entre la solución analítica y el código de flamelet es consistente, ya que variaciones en la parametrización de la evaporación no se traducen en cambios significativos en las estructuras obtenidas.

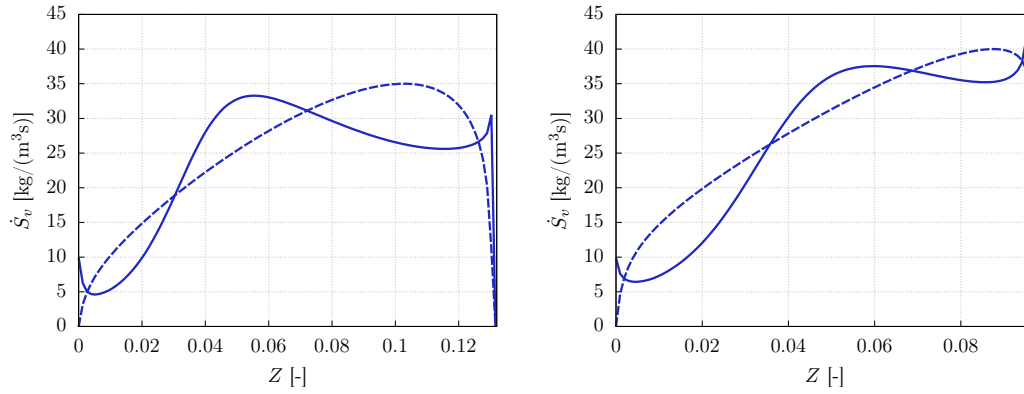


Figura 5.8: Perfiles de evaporación importados de llamas de flujos opuestos (línea continuas) y perfiles de evaporación cuadrático (línea segmentada) con $a = 200/s$ (izquierda) y $500/s$ (derecha).

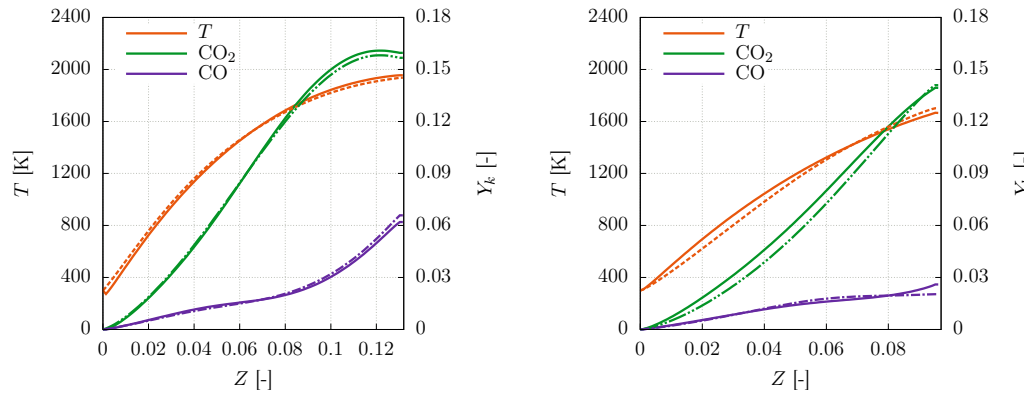


Figura 5.9: Estructuras del flamelet obtenidas usando los perfiles de evaporación de la Fig. 5.8, es decir, usando perfiles de evaporación importado de llamas de flujos opuestos (líneas continuas) y perfiles de evaporación cuadrático (líneas segmentada) con $a = 200/s$ (izquierda) y $500/s$ (derecha).

Por lo tanto, el uso de perfiles aproximados como datos de entrada en las ecuaciones de flamelet resulta adecuado desde el punto de vista numérico y consistente con prácticas habituales en la construcción de librerías de flamelet. Por ejemplo, en llamas gaseosas se asume frecuentemente una tasa de deformación constante y uniforme en todo el dominio [42, 47–50, 54, 57, 94–96].

Capítulo 6

Soluciones de flamelet de spray

En este capítulo se presentan y analizan soluciones de las ecuaciones de flamelet de spray obtenidas mediante los algoritmos desarrollados en esta tesis, considerando condiciones no abordadas previamente en la literatura. En la primera parte se estudian flamelets transitorios, evaluando la influencia de distintas estrategias de inyección y explorando fenómenos como la extinción y la re-ignición. En la segunda parte se presentan resultados asociados a la formulación con $Z_{\max}$ desconocido, examinando las estructuras obtenidas y su potencial aplicación.

6.1. Flamelets de spray transitorios

En esta sección se analizan soluciones transitorias de las ecuaciones de flamelet de spray. En la Sección 6.1.1 se describe la configuración empleada. Luego, en la Sección 6.1.2, se comparan distintas estrategias de inyección de gotas, tanto continuas como discontinuas. A continuación, en la Sección 6.1.3, estos resultados se generalizan mediante un análisis paramétrico. Finalmente, en las Secciones 6.1.4 y 6.1.5 se estudian los fenómenos de extinción y re-ignición. Los resultados presentados en esta sección fueron recientemente publicados en [79].

6.1.1. Flamelets gaseosos perturbados por spray

Las ecuaciones de flamelet de spray se resuelven en un dominio de fracción de mezcla fijo, $Z \in [0, 1]$, en el cual gotas de etanol son transportadas por un flujo de aire inyectado desde $Z = 0$ y enfrentadas a un flujo de etanol gaseoso desde $Z = 1$. Esta

configuración puede interpretarse como un flamelet gaseoso perturbado por un spray.

Si bien no reproduce todas las características de una llama de spray en espacio físico, constituye un punto de partida adecuado para analizar, de manera controlada, la influencia del spray sobre la dinámica transitoria de los flamelets. Además, esta elección evita el problema de la no monotonicidad de Z , característico de configuraciones donde el combustible se introduce exclusivamente en fase líquida [16, 17], permitiendo obtener estructuras bien definidas en el espacio de composición.

Las condiciones de borde para la temperatura son 300 K y 360 K en $Z = 0$ y $Z = 1$, respectivamente, donde esta última se fija de modo de asegurar que el etanol se encuentre en fase gaseosa ($T_{\text{boil}} = 351,6$ K). Además, las condiciones iniciales de las gotas (temperatura y velocidad) coinciden con las de la fase gaseosa en el punto de inyección. Para describir la cinética química se emplea un mecanismo detallado de 38 especies y 337 reacciones [97, 98].

Para ilustrar el alcance de esta configuración, en la Fig. 6.1 se comparan proyecciones en el espacio de composición de una llama de flujos opuestos de spray y una llama gaseosa perturbada por un spray. Ambas configuraciones comparten las mismas condiciones iniciales para las gotas ($R_0 = 10$ μm y $u_0 = 0,5$ m/s) y una tasa de deformación $a = 200/\text{s}$. En el caso de la llama de spray se muestra únicamente el lado correspondiente a la inyección de gotas, mientras que en la configuración gaseosa perturbada se considera hasta el valor máximo de Z alcanzado por la primera. Como se

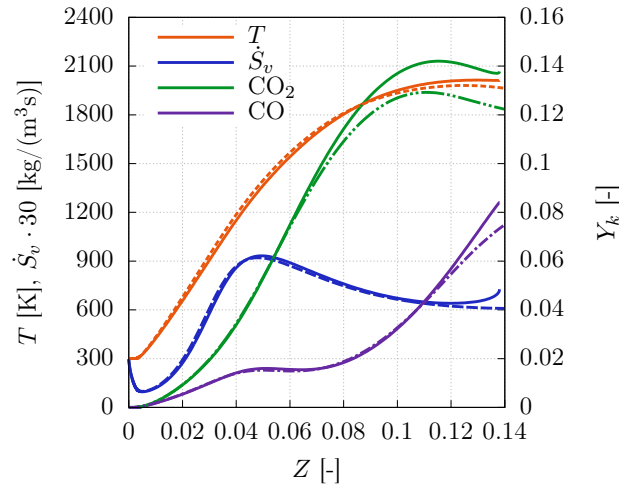


Figura 6.1: Perfiles de temperatura, fuente de evaporación y fracciones másicas de CO_2 y CO para llamas de flujos opuestos de spray (línea continua) y gaseosas perturbada por spray (línea segmentada).

observa, ambas configuraciones presentan perfiles cualitativamente similares, lo que indica que, a pesar de las simplificaciones introducidas, la configuración adoptada permite reproducir los principales efectos del spray sobre la estructura del flamelet.

El spray se caracteriza por el radio inicial de las gotas R_0 , la velocidad inicial u_0 y la relación de combustible líquido/aire E . Para modelar inyección discontinua se emplean los tiempos característicos τ_{inj} y $\tau_{\text{no inj}}$ introducidos en la Sección 4.1. Variando estos parámetros se obtienen distintas estrategias de inyección, donde el límite $\tau_{\text{no inj}} \rightarrow 0$ corresponde a inyección continua, recuperando los perfiles de evaporación estacionarios considerados en trabajos previos [15–20], tal y como se presentó en la Sección 5.2.1.

Para asegurar comparabilidad entre los casos, se fija el valor promedio de la relación de combustible líquido/aire, $\bar{E}$, como

$$\bar{E} = \frac{\int E(\tau) d\tau}{\int d\tau} = 0,1. \quad (6.1)$$

Aunque esta cantidad de combustible líquida es moderada, los efectos en la estructura de la llama son relevantes, como se mostrará en la siguiente sección.

Sobre la base de esta configuración, se plantean cuatro experimentos. En la Sección 6.1.2 se analiza cómo la relajación de la hipótesis de evaporación estacionaria da lugar a soluciones transitorias y oscilatorias. En la Sección 6.1.3, estos resultados se generalizan mediante un análisis paramétrico en términos de u_0 y R_0 . Finalmente, en las Secciones 6.1.4 y 6.1.5, se estudian los fenómenos de extinción y re-ignición, evidenciando la capacidad de la formulación para capturar comportamientos no abordados previamente.

6.1.2. Influencia de la estrategia de inyección de gotas en la estructura de flamelets

A continuación se muestra cómo las distintas estrategias de inyección de gotas conducen a soluciones de las ecuaciones de flamelet significativamente diferentes, para lo cual se analizan tres casos. El caso de referencia, denominado C_0 , y corresponde a un flamelet gaseoso no-premezclado y estacionario perturbado por un spray inyectado desde $Z = 0$. Este spray es generado mediante una inyección continua de gotas ($\tau_{\text{no inj}} = 0$). Este caso es equivalente a las estructuras de flamelet estudiadas en trabajos previos, donde se obtiene un perfil de evaporación estacionario en el espacio físico y

posteriormente se proyecta al espacio de fracción de mezcla [15–20]. Al tratarse de un caso continuo, esta estructura refleja exclusivamente el acople entre la evaporación y el gas sin efectos inducidos por las variaciones temporales de la fase líquida, lo que permite usarlo como base de comparación.

Los casos C_1 y C_2 corresponden a llamas generadas mediante una estrategia de inyección discontinua, lo que produce perfiles de evaporación transitorios. Tal y como se explicó antes, este tipo de inyección se caracteriza por los tiempos de inyección y no inyección de gotas, τ_{inj} y $\tau_{\text{no inj}}$, respectivamente. Para ambos flamelets, C_1 y C_2 , se fija $\tau_{\text{inj}} = 0,05$ ms, mientras que $\tau_{\text{no inj}}$ adopta valores de 0,1 y 0,45 ms, respectivamente. Estas diferencias determinan la frecuencia con la que los grupos de gotas ingresan al dominio, lo que, como se mostrará, controla tanto la intensidad como la periodicidad de las perturbaciones inducidas en el flamelet.

En los tres casos se considera el mismo radio inicial de las gotas ($10\ \mu\text{m}$), velocidad inicial ($0,5\ \text{m/s}$) y tasa de deformación uniforme ($850/\text{s}$). La Fig. 6.2 muestra, en un instante de tiempo arbitrario, los perfiles del radio instantáneo normalizado, R/R_0 , la fuente de evaporación, $\dot{S}_v$, y la tasa de disipación escalar, χ , para C_0 , C_1 y C_2 . Aunque la figura corresponde a un instante determinado, permite observar que la estrategia de inyección adoptada afecta fuertemente la forma de estos perfiles. En particular, los casos con inyección discontinua (C_1 y C_2) presentan múltiples máximos locales en $\dot{S}_v$, los cuales generan picos correspondientes en χ . Estas diferencias en la evaporación, inducidas por la llegada secuencial de grupos de gotas a distintas regiones de Z , son las responsables del comportamiento que se analizará posteriormente al estudiar la evolución temporal de las cantidades evaluadas en el punto estequiométrico.

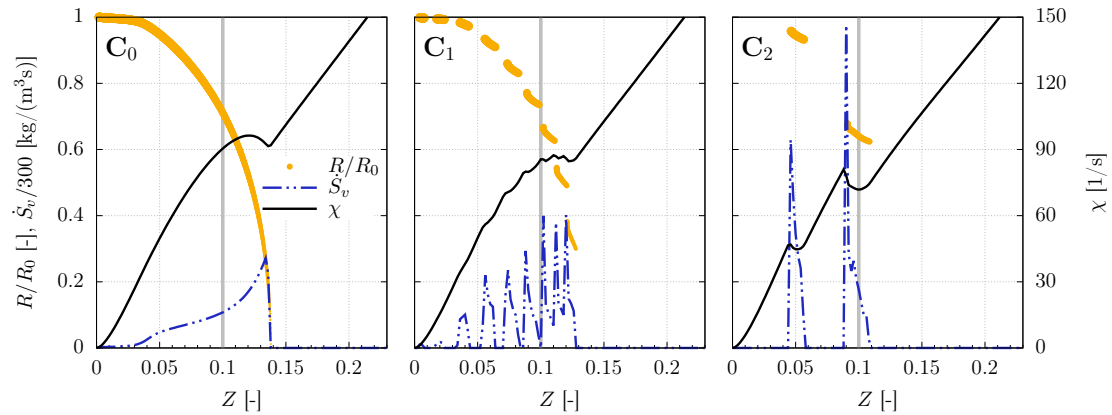


Figura 6.2: Perfiles de R/R_0 , $\dot{S}_v$ y χ para los flamelets C_0 , C_1 y C_2 ($a = 850/\text{s}$). La línea gris vertical representa $Z_{\text{st}} \approx 0,1$ [79].

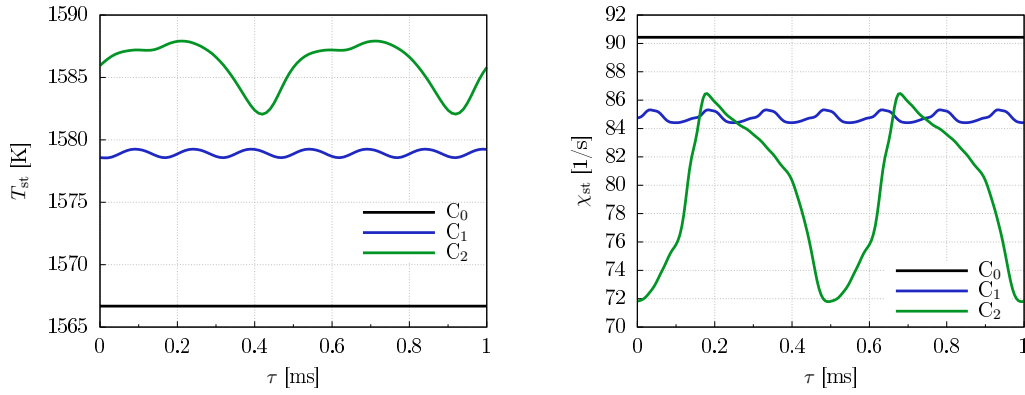


Figura 6.3: Temperatura (izquierda) y tasa de disipación escalar (derecha) en el punto estequiométrico para los flamelets C_0 , C_1 y C_2 [79].

La evolución temporal de la temperatura y la tasa de disipación escalar en el punto estequiométrico, T_{st} y χ_{st} , se presenta en la Fig. 6.3. A diferencia de lo que puede deducirse únicamente de las imágenes para un instante de tiempo (Fig. 6.2), aquí se observa explícitamente la dinámica temporal inducida por la inyección discontinua: los casos C_1 y C_2 muestran oscilaciones periódicas bien definidas, cuyo periodo coincide con los ciclos de inyección y no inyección de las gotas (0,15 y 0,5 ms, respectivamente). Estas oscilaciones generan diferencias notables respecto al caso estacionario C_0 , particularmente en T_{st} , donde incluso las temperaturas mínimas de C_1 y C_2 son mayores a la temperatura de C_0 . Este incremento puede vincularse directamente con la reducción del valor medio de χ_{st} durante los ciclos, lo que implica mayores tiempos de residencia de las especies químicas en la zona de reacción [10].

Para ilustrar la influencia de la evaporación (y, por lo tanto, de la estrategia de inyección) en la definición del perfil de la tasa de disipación escalar, la Fig. 6.4 presenta las contribuciones de los distintos términos de la ecuación de g_Z ($\chi = 2D_Z g_Z^2$) en Z_{st} para C_1 y C_2 a lo largo de un ciclo completo. El término I corresponde a los efectos transitorios (amplificado por un factor de 100). El término II reúne los efectos asociados a la tasa de deformación y la difusión, es decir, las contribuciones de la fase gaseosa. Finalmente, el término III agrupa los efectos inducidos por el spray. A pesar de que la duración de ambos ciclos difiere, el comportamiento cualitativo de los términos es el mismo. En particular, cada ciclo pueden dividirse en dos etapas: en la primera, el término III es negativo y el término II intenta compensarlo, en la segunda, ambos términos cambian rápidamente de signo debido a un fenómeno ausente en llamas estacionarias como C_0 . Estos cambios de signos, que inducen cambios en I, generan las

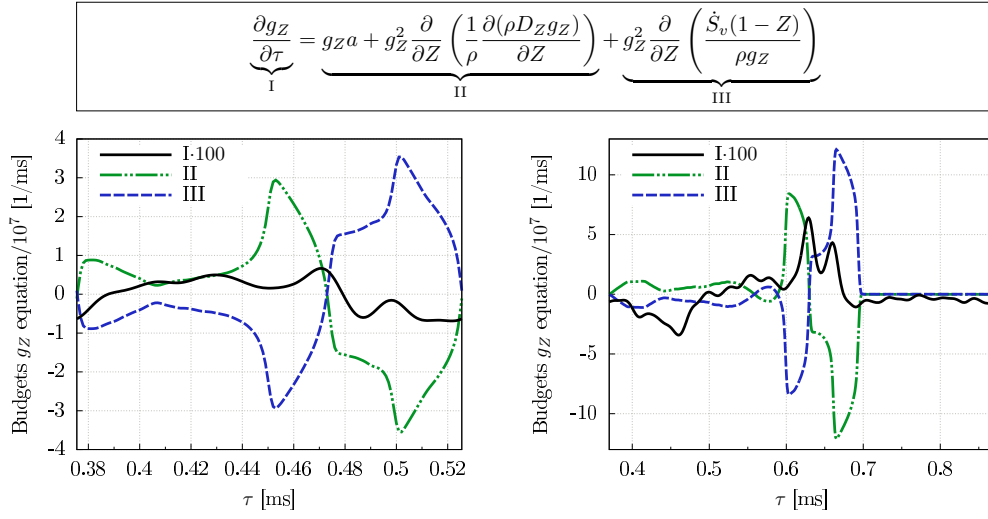


Figura 6.4: Contribuciones de la ecuación de g_Z (Ec. (3.29)) para los flamelets C_1 (izquierda) y C_2 (derecha) en el punto estequiométrico. Por conveniencia la ecuación es presentada en la parte superior de la figura [79].

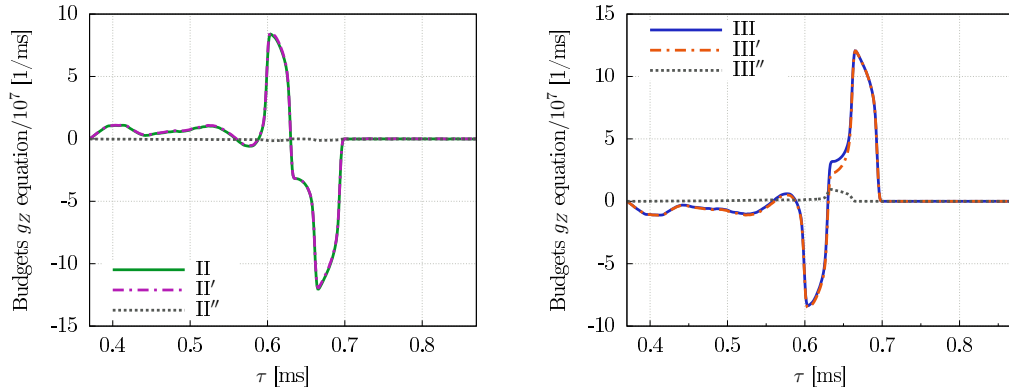


Figura 6.5: Contribuciones de la descomposición de los términos de la tasa de deformación y difusión (Ec. (6.2), izquierda) y de los términos asociados a la evaporación (Ec. (6.3), derecha) para el flamelet C_2 en el punto estequiométrico [79].

oscilaciones de χ y luego de T . Como se mostrará a continuación, los cambios pueden relacionarse directamente con las variaciones de signo en la segunda derivada de g_Z y

en el gradiente de la evaporación. Para esto, los términos II y III son reescritos como

$$\underbrace{ag_Z + g_Z^2 \frac{\partial}{\partial Z} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial(\rho D_Z g_Z)}{\partial Z} \right)}_{\text{II}} = \underbrace{g_Z^2 D_Z \frac{\partial^2 g_Z}{\partial Z^2}}_{\text{II}'} + \underbrace{ag_Z + g_Z^2 \left(\frac{\partial}{\partial Z} \left(\frac{g_Z}{\rho} \frac{\partial(\rho D_Z)}{\partial Z} \right) + \frac{\partial D_Z}{\partial Z} \frac{\partial g_Z}{\partial Z} \right)}_{\text{II}''} \quad (6.2)$$

y

$$\underbrace{g_Z^2 \frac{\partial}{\partial Z} \left(\frac{\dot{S}_v(1-Z)}{\rho g_Z} \right)}_{\text{III}} = \underbrace{\frac{g_Z}{\rho} \frac{\partial(\dot{S}_v(1-Z))}{\partial Z}}_{\text{III}'} - \underbrace{\left(\frac{1}{g_Z} \frac{\partial g_Z}{\partial Z} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial Z} \right) \frac{\dot{S}_v(1-Z)}{\rho g_Z}}_{\text{III}''}, \quad (6.3)$$

respectivamente.

Las contribuciones de las Ecs. (6.2) y (6.3) se muestran en la Fig. 6.5 para C_2 . Allí se observa que II' y III' son los únicos términos con contribuciones no despreciables en la ecuación de g_Z . Además, dado que g_Z y ρ no pueden ser negativos, los signos de II y III quedan determinados únicamente por $\partial^2 g_Z / \partial Z^2$ y $\partial \dot{S}_v / \partial Z$, respectivamente. Esto es clave, porque permite vincular directamente la dinámica de la disipación escalar con la evolución espacial de los picos de evaporación.

El cambio de signo en estas derivadas proviene directamente de la dinámica de la fase líquida: cuando un grupo de gotas se acerca al punto estequiométrico, el gradiente local de $\dot{S}_v$ es negativo, pero tras cruzar este punto se vuelve positivo (ver Fig. 6.6).

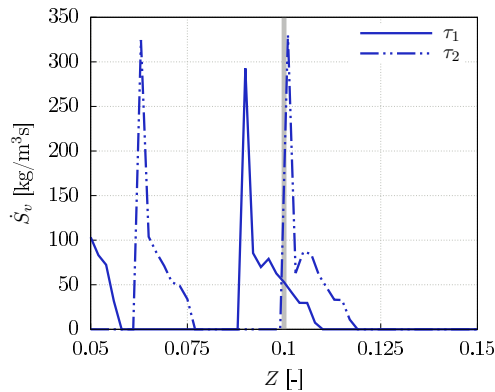


Figura 6.6: Perfiles de $\dot{S}_v$ en dos instantes: $\tau_1 = 0,5$ ms (antes de que el pico alcance Z_{st} , línea continua), y $\tau_2 = 0,65$ ms (después de sobrepasarlo, línea segmentada) [79].

De este modo, el cambio simultáneo en $\partial^2 g_Z / \partial Z^2$ y en $\partial \dot{S}_v / \partial Z$ explica los cambios abruptos en los términos II y III mostrados en la Fig. 6.4, así como las oscilaciones de χ y T en la Fig. 6.3.

Los resultados de esta sección muestran claramente la relevancia de la estrategia de inyección, capaz de generar perfiles de evaporación altamente transitorios que incrementan notablemente la temperatura de la llama, incluso cuando la cantidad de combustible líquido inyectado es relativamente baja ($E = 0,1$ en todos los casos). Además, el análisis de la ecuación de g_Z revela que los términos asociados a la fase gaseosa (término II) y a la fase líquida (término III) poseen magnitudes comparables. En la siguiente sección se muestra cómo este aumento de temperatura, inducido por la inyección discontinua, amplía considerablemente el rango de combinaciones de u_0 y R_0 para los cuales se obtienen flamelets encendidos. Para ello, se extiende el análisis realizado bajo condiciones específicas de gotas mediante un estudio paramétrico variando u_0 y R_0 .

6.1.3. Generalización de las observaciones

En la sección anterior se mostró como una estrategia de inyección discontinua de gotas conduce a mayores temperaturas que su equivalente con inyección continua. Sin embargo, estos experimentos numéricos fueron realizados para un único conjunto de parámetros para del spray y, por lo tanto, permitieron extraer conclusiones sólo para un caso representativo. El objetivo de esta sección es evaluar la generalidad de esas observaciones mediante un estudio paramétrico, variando el radio y velocidad inicial de las gotas, que permita determinar si el comportamiento observado se mantiene para distintas condiciones iniciales del spray.

Para ello, las condiciones especificadas para los casos C_0 y C_2 se modificaron sistemáticamente, abarcando valores de u_0 entre 0,4 y 1 m/s y de R_0 entre 7 y 15 μm , simulando alrededor de 50 y 100 flamelets respectivamente. En esta sección nos referiremos a estos experimentos como C_0 y C_2 extendidos, respectivamente. Para facilitar la comparación entre flamelets estacionarios y aquellos con oscilaciones periódicas, la temperatura promedio en el punto de estequiometría de los flamelets transitorios se calcula como

$$\bar{T}_{\text{st}} = \frac{\int T_{\text{st}}(\tau) d\tau}{\int d\tau}. \quad (6.4)$$

La Fig. 6.7 presenta una comparación directa entre ambas estrategias de inyección

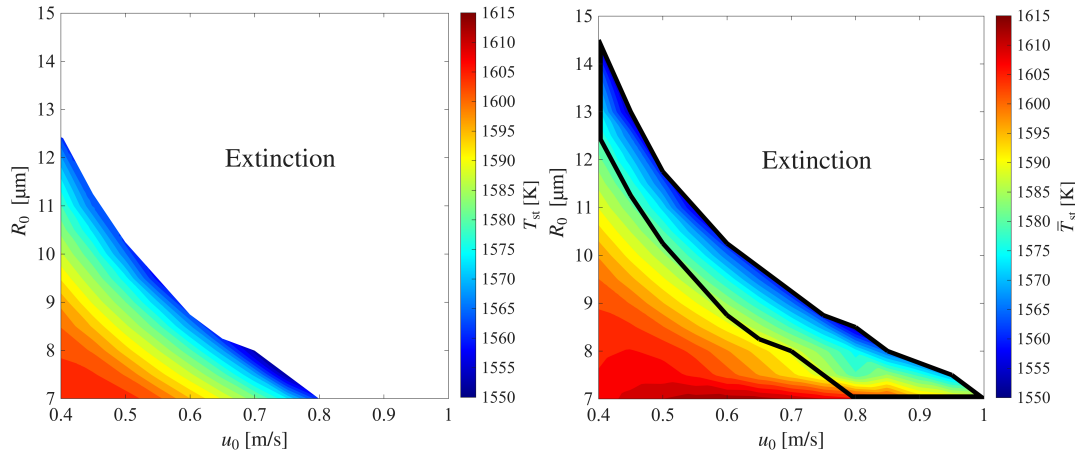


Figura 6.7: T_{st} para los flamelets C_0 extendido (izquierda) y C_2 extendido (derecha), variando la velocidad y radio iniciales de las gotas. Las áreas blancas indican flamelets extintos [79].

en función de sus temperaturas en el punto estequiométrico. Las áreas en blanco representan flamelets que se extinguen para las combinaciones correspondientes de u_0 y R_0 . Ambos conjuntos presentan una región de alta temperatura concentrada en valores bajos de radio y velocidad inicial de las gotas, lo que indica que las gotas más pequeñas y lentas son más efectivas para mantener la llama encendida.

La relación entre penetración y tasa de disipación escalar (y por consiguiente temperatura) se evidencia con mayor claridad en la Fig. 6.8, donde se presentan perfiles de R/R_0 , $\dot{S}_v$ y χ para tres flamelets de C_2 extendido con la misma velocidad inicial de gota (0,4 m/s) pero con distintos radios iniciales, 7, 10,5 y 14 μm . Se observa que un mayor radio inicial genera una mayor penetración, y que esta, a su vez, está asociada a incrementos significativos en la tasa de disipación escalar. En la práctica, esto equivale a emular el efecto de aumentar el tasa de deformación del flujo, llevando a condiciones más adversas para la combustión. Este resultado es independiente del tipo de inyección empleado.

A pesar de esta similitud en la Fig. 6.7, las diferencias entre C_0 y C_2 extendidos son marcadas y revelan el impacto de una estrategia de inyección discontinua. En primer lugar, el rango de combinaciones de u_0 - R_0 que permiten obtener flamelets encendidos es considerablemente mayor para C_2 extendido (indicado mediante la región encerrada con línea negra en la derecha de la Fig. 6.7), abarcando radios hasta un 16 % mayores y velocidades hasta un 25 % superiores. Este ensanchamiento del dominio, correspondiente a flamelets encendidos, muestra que la estrategia de

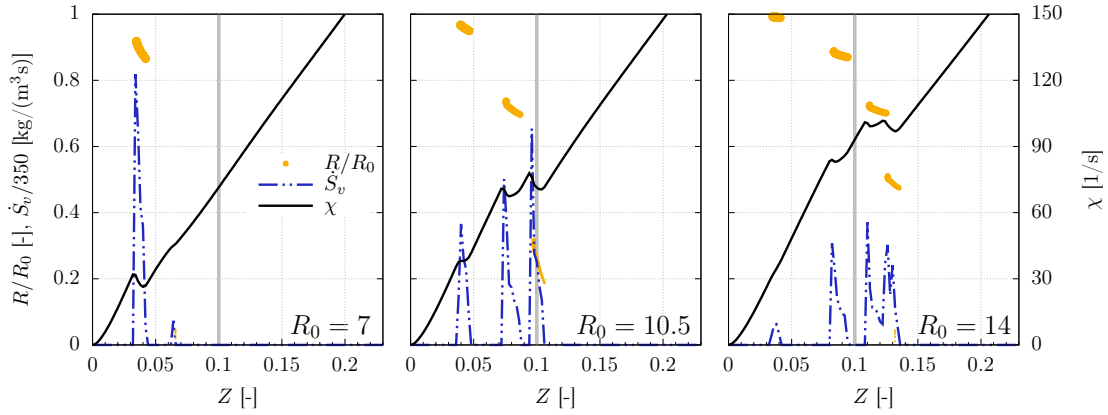


Figura 6.8: Perfiles de R/R_0 , $\dot{S}_v$ y χ para flamelets de C_2 extendido con $R_0 = 7, 10,5$ y $14 \mu\text{m}$. La línea gris vertical representa $Z_{\text{st}} \approx 0,1$ [79].

inyección discontinua no sólo mejora cuantitativamente las temperaturas obtenidas, sino que altera cualitativamente la frontera entre ignición y extinción del sistema.

En segundo lugar, para las condiciones donde tanto la inyección continua como la discontinua permiten mantener la llama encendida, la estrategia discontinua conduce a valores de T_{st} más elevados. Este resultado es coherente con el análisis detallado de la Sección 6.1.2, donde se identificó que este tipo de spray lleva a menores valores de χ y por lo tanto mayores temperaturas.

En resumen, el análisis presentado en esta sección confirma la generalidad de los resultados presentados en la Sección 6.1.2. Para las condiciones de spray consideradas, la adopción de una estrategia de inyección discontinua no solo incrementa la temperatura de los flamelets, sino que también amplía significativamente el rango de combinaciones de u_0 y R_0 para las cuales es posible obtener soluciones encendidas.

6.1.4. Extinción

Como se mencionó anteriormente, uno de los objetivos centrales de esta tesis es desarrollar una formulación matemática capaz de analizar fenómenos relevantes dentro de la combustión que, hasta ahora, han permanecido fuera del alcance de las formulaciones de flamelets de spray. Dentro de estos fenómenos se incluyen los procesos de extinción y re-ignición, cuyo estudio requiere un tratamiento adecuado de la evaporación transitoria y de su acople con la fase gaseosa. En esta sección se presentan resultados de extinción con el propósito de demostrar las capacidades de la formulación y del código desarrollados.

En flamelets gaseosos es bien sabido que la extinción ocurre cuando el tasa de deformación es suficientemente alta, ya que esto incrementa la tasa de disipación escalar. Un mayor valor de χ implica tiempos de residencia más cortos para las especies químicas en la zona de reacción, debilitando así la llama hasta apagarla [10]. Sin embargo, como se observó en la Fig. 6.7, incluso para un mismo valor de a pueden obtenerse estructuras de flamelet encendidas y apagadas modificando únicamente las características de las gotas inyectadas.

Con el objetivo de entender de qué manera el tipo de gota puede mentener, o no, la llama encendida, se analizan dos flamelets pertenecientes a C_2 extendido: C_2^1 , con $R_0 = 9 \mu\text{m}$ y $u_0 = 0,5 \text{ m/s}$, y C_2^2 , con $R_0 = 12 \mu\text{m}$ y $u_0 = 0,7 \text{ m/s}$. En ambos casos, el flamelet parte desde una estructura gaseosa con $a = 500/\text{s}$, a la cual en el instante $\tau = 0 \text{ ms}$ se le impone simultáneamente un tasa de deformación de $850/\text{s}$ y el comienzo de la inyección de gotas.

En la Fig. 6.9 se presentan las evoluciones temporales de la temperatura y de la tasa de disipación escalar en el punto estequiométrico. En primer lugar, se confirma nuevamente la relación observada en la Sección 6.1.2: valores más altos de T_{st} se relacionan directamente a valores más bajos de χ_{st} . Sin embargo, aparece una diferencia fundamental entre ambos flamelets. Si bien durante los primeros $0,4 \text{ ms}$, C_2^1 y C_2^2 presentan prácticamente la misma temperatura, tras este periodo inicial, C_2^1 experimenta un aumento sostenido de T_{st} hasta alcanza un régimen oscilatorio estable, mientras que C_2^2 , a pesar de partir con un valor de χ_{st} incluso menor, exhibe una caída continua de temperatura hasta extinguirse.

La explicación de este comportamiento radica en la evolución de la evaporación

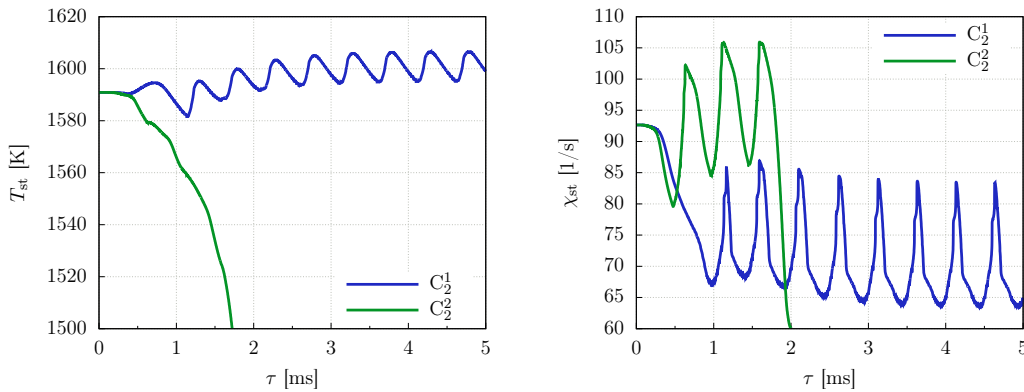


Figura 6.9: Temperatura (izquierda) y tasa de disipación escalar (derecha) en el punto estequiométrico, sobre el tiempo para los flamelets C_2^1 y C_2^2 .

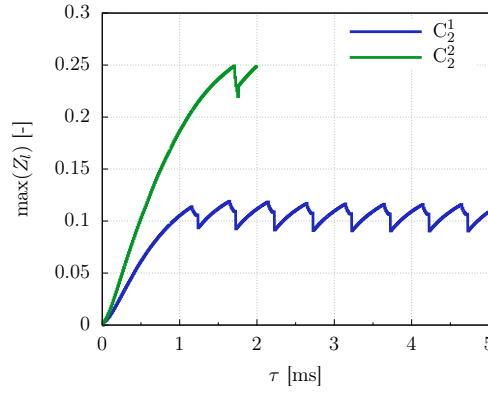


Figura 6.10: Penetración máxima de del spray sobre el tiempo para los flamelets C_2^1 y C_2^2 .

y, particularmente, en la penetración del spray. En la Fig. 6.10 se muestra la penetración máxima del spray para ambos flamelets, $\max(Z_l)$, donde se observa que C_2^2 alcanza mayores penetraciones, muy superiores al punto estequiométrico ($Z_{st} \approx 0,1$). Este resultado concuerda con las observaciones previas de la literatura: una mayor penetración de las gotas suele asociarse a tiempos de residencia más bajos dentro de la zona de reacción, lo cual reduce la fracción del combustible evaporado que participa efectivamente en la combustión [34].

En conjunto, estos resultados permiten establecer con mayor claridad la influencia central de la evaporación en flamelets de spray. No solo importa la cantidad total de masa evaporada, sino también la manera en que dicha evaporación se distribuye espacialmente y cómo evoluciona en el tiempo. El acople entre la penetración, la evaporación y la tasa de disipación escalar determina finalmente si la llama puede estabilizarse o se extinguirá bajo condiciones idénticas del flujo gaseoso.

6.1.5. Re-ignición

Continuando con el análisis de fenómenos intrínsecamente transitorios, en esta sección se aborda el proceso de re-ignición en flamelets con spray. A diferencia del caso de extinción presentado anteriormente, donde el interés se centró en identificar las condiciones bajo las cuales la llama pierde estabilidad, aquí se estudia la capacidad del sistema para recuperar un estado encendido después de sufrir una perturbación externa. Para ello se implementa un experimento numérico inspirado en el trabajo presentado por Mauß et al. [66] para llamas gaseosas, adaptándolo al flamelet C_2 .

El procedimiento consiste en incrementar la tasa de deformación desde $a = 850/\text{s}$ hasta $985/\text{s}$ (que corresponde a un valor sobre la extinción) durante un ciclo completo de inyección-no inyección (0,5 ms), para luego devolverla a su valor original. Se analizan dos variaciones de este experimento: i) en el flamelet $C_{2,A}$, el incremento de a se aplica cuando χ_{st} alcanza a su valor máximo dentro del ciclo, y ii) en el flamelet $C_{2,B}$, el aumento se impone cuando χ_{st} se encuentra en su mínimo. Estos dos escenarios permiten evaluar la sensibilidad de la re-ignición frente a la fase del ciclo de evaporación en que ocurre la perturbación.

En la Fig. 6.11 se muestran los perfiles de χ_{st} y T_{st} para ambos flamelets. El área gris representa el periodo en el cual la tasa de deformación es incrementada. A pesar de que $C_{2,A}$ y $C_{2,B}$ son perturbaciones del mismo flamelet base, sus comportamientos son muy distintos: solo $C_{2,A}$ logra re-encenderse después de que a retorna a $850/\text{s}$, mientras que $C_{2,B}$ finalmente se extingue.

El motivo de esta diferencia radica en el momento entre la perturbación del flujo y el ciclo de evaporación. En $C_{2,A}$, el incremento de a coincide con la fase en que χ_{st} empieza a disminuir debido a la oscilación inducida por la evaporación (como se analizó en la Sección 6.1.2). Esta caída natural de χ compensa parcialmente el aumento

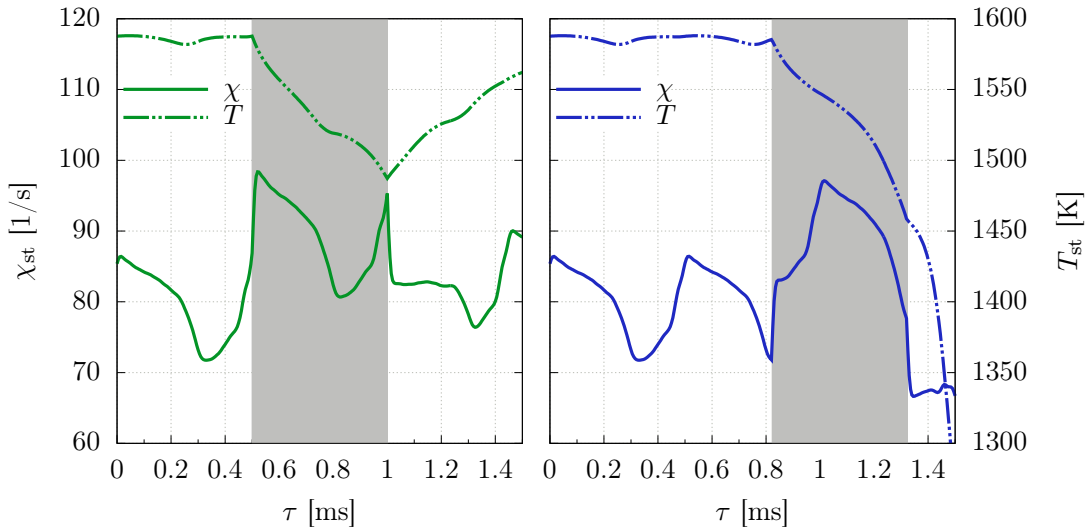


Figura 6.11: Tasa de disipación escalar (línea continua) y temperatura (línea segmentada) en el punto estequiométrico sobre el tiempo para los flamelets $C_{2,A}$ (izquierda) y $C_{2,B}$ (derecha). A ambos flamelets se les aplica un aumento temporal de la tasa de deformación, desde $850/\text{s}$ hasta $985/\text{s}$ durante 0,5 ms. El área gris indica el intervalo con alta tasa de deformación [79].

de a , limitando la reducción de temperatura y permitiendo que el flamelet mantenga suficiente energía para re-encenderse una vez reducido a nuevamente.

En contraste, en $C_{2,B}$ la fase de incremento natural de χ dentro del ciclo coincide con el aumento de a . Ambos efectos se suman, generando un periodo prolongado con valores extremadamente altos de la tasa de disipación escalar. Esta condición de alto χ reduce drásticamente los tiempos de residencia de las especies químicas, llevando a una caída significativa en la temperatura, lo que impide que la re-ignición ocurra aún cuando el flujo vuelve a su tasa de deformación original.

Estos últimos dos sencillos experimentos ilustran la capacidad de la formulación desarrollada para estudiar fenómenos transitorios. A pesar de su simplicidad, el caso evidencia que la re-ignición en flamelets con spray depende fuertemente de la fase de evaporación en que ocurre la perturbación, un aspecto completamente ausente en modelos gaseosos y que no había sido posible analizar previamente en flamelets de spray.

6.2. Flamelets con fracción de mezcla máxima desconocida

En esta sección se analizan soluciones de las ecuaciones de flamelet de spray usando la formulación con $Z_{\max}$ desconocido. En la Sección 6.2.1 se presentan los distintos tipos de soluciones obtenidas y se comparan sus principales características con las observadas en llamas de spray y en llamas gaseosas perturbadas por spray, con el fin de asegurar que son adecuadas para la generación de librerías de flamelet. Luego, en la Sección 6.2.2, se discute la construcción de dichas librerías y cómo el uso de un perfil cuadrático, con tres grados de libertad (los coeficientes A , B y C), permite generar múltiples configuraciones a partir de esta formulación. Los resultados y análisis presentados en esta sección fueron recientemente publicados en [36].

6.2.1. Estructuras de flamelet

Si bien en la Sección 5.3.2 se mostró de manera preliminar que las soluciones obtenidas a partir de la formulación presentada en la Sección 3.2 son capaces de reproducir la estructura esencial de una llama de flujos opuestos cuando se emplean perfiles de evaporación adecuados, el objetivo de este trabajo no es replicar una

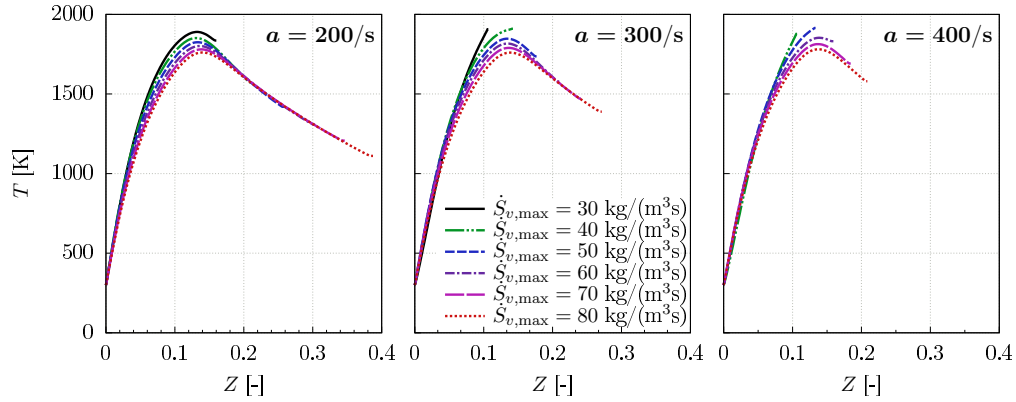


Figura 6.12: Perfiles de temperatura de los flamelet con distintos valores de $\dot{S}_{v,\max}$, con un tasas de deformación de $a = 200/\text{s}$ (izquierda), $300/\text{s}$ (centro), y $400/\text{s}$ (derecha) [36].

configuración particular, sino generar estructuras de manera sistemática que permitan cubrir el espacio de soluciones de las ecuaciones de flamelet, para su futura utilización en la simulación de llamas turbulentas con spray.

A continuación se analizan en mayor detalle las estructuras generadas empleando la solución analítica para $Z_{\max}$, de forma independiente a cualquier configuración o condición física específica. Para ello se utiliza el flamelet de spray simétrico presentado en la Sección 5.3.1 (ver Fig. 5.5), con el perfil de evaporación

$$\dot{S}_v(y) = -\frac{4\dot{S}_{v,\max}}{l_f^2}y^2 - \frac{4\dot{S}_{v,\max}}{l_f}y, \quad (6.5)$$

donde el parámetro libre es únicamente $\dot{S}_{v,\max}$, y la longitud del flamelet l_f se obtiene a partir de g_Z mediante

$$l_f = \int_0^{Z_{\max}} \frac{1}{g_Z} dZ. \quad (6.6)$$

Antes de continuar, es importante destacar, una vez más, que si bien la elección de un perfil cuadrático es arbitraria, y los coeficientes A , B y C pueden variarse de manera independiente, en este estudio se adopta la forma de la Ec. (6.5) con un único parámetro libre $\dot{S}_{v,\max}$ por razones de simplicidad. Esto no limita la generalidad de las conclusiones obtenidas.

Las ecuaciones de flamelet se resuelven para un régimen estacionario, ya que la solución analítica para Z fue derivada a partir de la ecuación estacionaria de Z . Se consideran tres tasas de deformación: $200/\text{s}$, $300/\text{s}$ y $400/\text{s}$, mientras que $\dot{S}_{v,\max}$ se varia

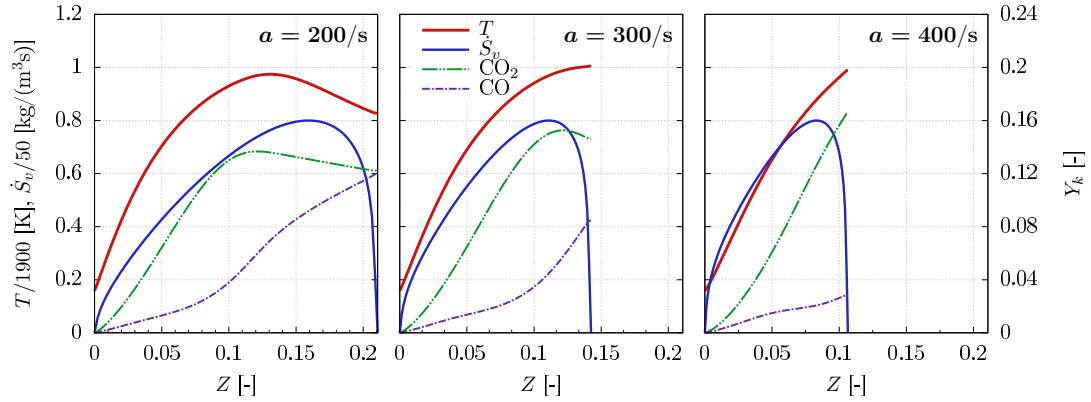


Figura 6.13: Perfiles de T , $\dot{S}_v$, Y_{CO} , y Y_{CO_2} para flamelets con $\dot{S}_{v,\text{max}} = 40 \text{ kg}/(\text{m}^3\text{s})$, con un tasas de deformación de $a = 200/\text{s}$ (izquierda), $300/\text{s}$ (centro), y $400/\text{s}$ (derecha) [36].

entre 30 y $80 \text{ kg}/(\text{m}^3\text{s})$. La Fig. 6.12 muestra que esta formulación permite cubrir de manera sistemática el espacio de solución de las ecuaciones de flamelet. En particular, para los tres valores de tasas de deformación, al incrementar $\dot{S}_{v,\text{max}}$ también aumenta Z_{max} . Esto se debe a que una mayor evaporación implica una mayor cantidad de combustible disponible.

Luego, se seleccionan únicamente los flamelets con $\dot{S}_{v,\text{max}} = 40 \text{ kg}/(\text{m}^3\text{s})$, cuyas estructuras se presentan en la Fig. 6.13. Primero, se observa que el perfil de evaporación aparece levemente sesgado hacia el lado derecho. Esto se debe a que el perfil cuadrático original está definido en coordenadas físicas con su máximo en el centro del dominio, pero al representarlo en función de Z se introduce una deformación asociada al cambio de variable. Por otro lado, los perfiles de temperatura y fracciones másicas de CO_2 y CO presentan la forma típica observada en llamas de flujos opuestos de spray [16, 18]. Aunque se había observado este comportamiento en la Sección 5.3.2, el resultado es notable porque en este caso los perfiles de evaporación no están contruidos para imitar ninguna configuración experimental o numérica particular.

Además, la transición desde dos picos de temperatura para valores bajos de la tasa de deformación (uno a cada lado del eje de simetría) hacia un único pico ubicado en la posición de máxima fracción de mezcla cuando a es elevado, observado en la literatura [16, 18, 23], también es correctamente capturado por esta formulación.

Las contribuciones de la ecuación de energía, Ec. (3.23), se muestran en la Fig. 6.14. En ella se observa la competencia entre difusión, reacción y convección inducida por la evaporación (términos I, II y IV, respectivamente). A medida que aumenta la

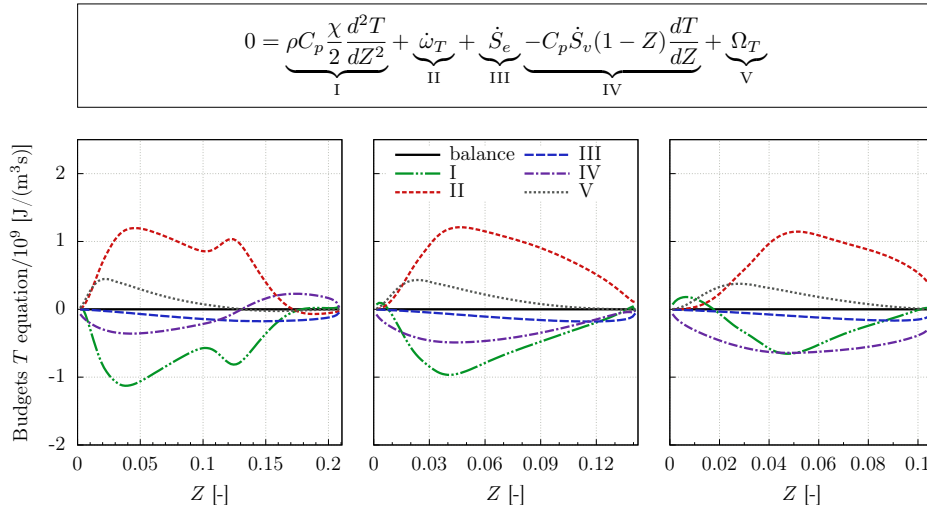


Figura 6.14: Contribuciones de la ecuación de energía, Ec. (3.23), para flamelets con $\dot{S}_{v,\max} = 40 \text{ kg}/(\text{m}^3\text{s})$, con un tasas de deformación de $a = 200/\text{s}$ (izquierda), $300/\text{s}$ (centro), y $400/\text{s}$ (derecha). Por conveniencia la ecuación es presentada en la parte superior de la figura.

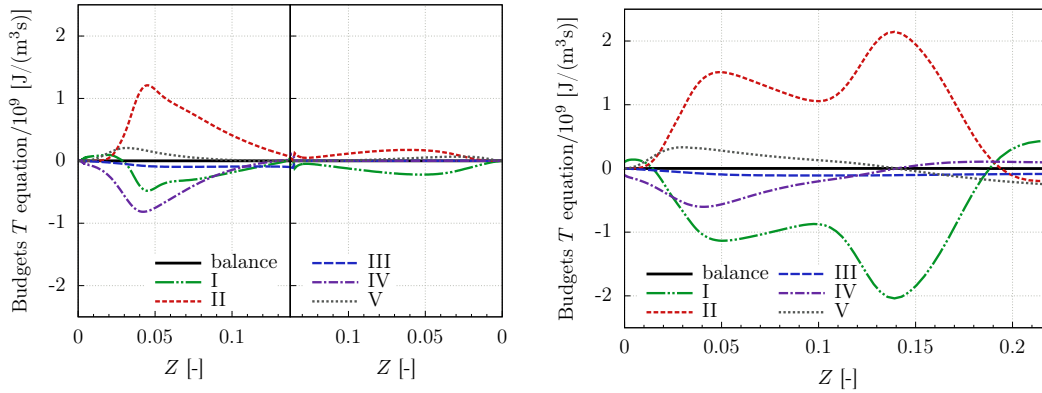


Figura 6.15: Contribuciones de la ecuación de energía, Ec. (3.23), para una llama de flujos opuestos de spray (izquierda) y una gaseosa perturbada por un spray (derecha).

tasa de deformación, el término convectivo asociado a la evaporación adquiere mayor relevancia, llegando incluso a dominar localmente el balance. Este comportamiento es característico de configuraciones con spray y constituye un aspecto fundamental en la construcción de librerías de flamelets adecuadas para estos sistemas.

Este punto se refuerza al analizar la Fig. 6.15, donde se comparan las contribuciones de la ecuación de energía entre una llama con inyección de combustible exclusivamente por spray y una llama gaseosa perturbada por spray, ambas con $a = 400/\text{s}$. En el

primer caso, la abscisa se presenta siguiendo la convención de Olguin y Gutheil [16]: el lado del spray corresponde a la región donde Z aumenta, mientras que el lado opuesto corresponde a la zona predominantemente gaseosa, donde Z disminuye. Esta representación permite visualizar la asimetría de los términos y resalta el impacto de la evaporación en el desarrollo de la llama. En el caso de la llama gaseosa perturbada, el dominio se muestra hasta $Z = 0,22$, abarcando la zona de reacción.

La comparación evidencia que, mientras en la llama de spray la convección inducida por la evaporación juega un rol central en el balance energético, en la llama gaseosa perturbada este efecto es considerablemente menor. En este último caso, el balance está dominado por difusión y reacción en gran parte del dominio, comportándose de manera más cercana a una llama gaseosa [20]. Por lo tanto, este tipo de configuraciones no logra capturar el rol dominante que puede adquirir la evaporación cuando constituye la principal fuente de combustible, lo que pone de manifiesto la relevancia de obtener soluciones de las ecuaciones de flamelet para llamas de spray con perfiles de Z no monótonos.

En conjunto, estos resultados demuestran que las estructuras obtenidas capturan las características esenciales de las tradicionalmente empleadas en la construcción de librerías, con la ventaja adicional de permitir una variación sistemática del perfil de evaporación. Este punto se desarrollará con mayor detalle en la siguiente sección.

6.2.2. Propuesta de generación de librerías

Siguiendo trabajos previos sobre a la construcción de librerías de flamelets de spray [26], las distintas estructuras presentadas en la Fig. 6.12 se proyectan en el espacio (Z, Y_C) , donde la variable de progreso se define como $Y_C = Y_{CO_2} + Y_{CO}$. Las

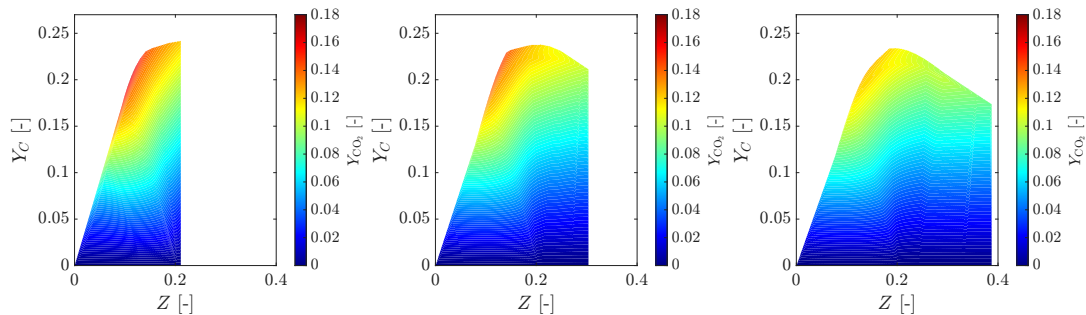


Figura 6.16: Mapas de contorno de Y_{CO_2} en el espacio de (Z, Y_C) (diferentes tasas de deformación) para $\dot{S}_{v,max} = 40$ (izquierda), 60 (centro) y 80 kg/(m³s) (derecha) [36].

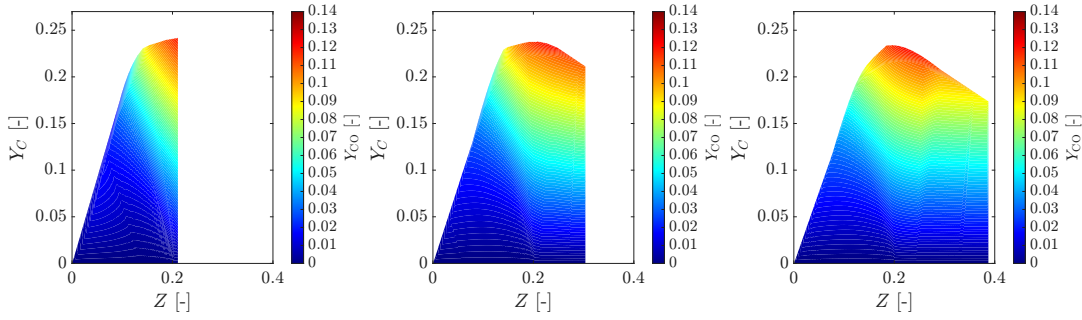


Figura 6.17: Mapas de contorno de Y_{CO} en el espacio de (Z, Y_C) (diferentes tasas de deformación) para $\dot{S}_{v,max} = 40$ (izquierda), 60 (centro) y 80 kg/(m³s) (derecha) [36].

Figs. 6.16 y 6.17 muestran los mapas de contornos de Y_{CO_2} y Y_{CO} , respectivamente, para tres valores de $\dot{S}_{v,max}$: 40, 60 y 80 kg/(m³s). En todos los casos, la tasa de deformación se varía entre 200 y 450/s, lo que permite abarcar un rango representativo de condiciones relevantes para aplicaciones prácticas.

Estas figuras confirman que el enfoque propuesto en este trabajo constituye una alternativa adecuada para la generación de librerías de flamelets de spray en el espacio (Z, Y_C) . La coherencia y continuidad de las estructuras obtenidas con respecto a las variaciones de $\dot{S}_{v,max}$ y de la tasa de deformación refuerzan la capacidad de esta formulación para capturar de manera consistente la interacción entre evaporación, difusión y reacción, lo cual es un requisito fundamental para su aplicación en simulaciones de llamas turbulentas con spray.

Como comentario final, es importante recordar que los perfiles de evaporación utilizados en este estudio representan solo una de las múltiples alternativas posibles. La formulación presentada permite utilizar otros perfiles parabólicos mediante la variación libre de los parámetros A , B y C . En este sentido, la presente formulación y algoritmo sientan las bases para investigaciones futuras orientadas a identificar estrategias óptimas de generación de librerías de flamelets destinadas a la simulación de llamas turbulentas con spray [22–28, 30–32].

Capítulo 7

Conclusiones

En esta tesis se desarrollaron las herramientas numéricas necesarias para la resolución de las ecuaciones de flamelets de spray en configuraciones que no habían sido abordadas previamente en la literatura. En particular, uno de los aportes centrales del trabajo fue el desarrollo de algoritmos y códigos computacionales capaces de abordar: i) el acoplamiento dinámico entre las fases gaseosa y líquida en el espacio de composición, y ii) dominios de fracción de mezcla no monótonos, en los que el valor máximo de la fracción de mezcla es desconocido. Sobre la base de estos desarrollos, se obtuvieron dos tipos de soluciones complementarias que amplían de forma significativa el alcance del formalismo de flamelets de spray.

En el caso de la formulación transitoria, se implementó un cierre Lagrangiano para la fase líquida directamente en el espacio de composición. Esto permitió analizar flamelets gaseosos perturbados por sprays bajo distintas estrategias de inyección. Los resultados muestran que la inyección discontinua conduce a temperaturas promedio significativamente mayores, con incrementos de hasta 46 K, y amplía de manera sustancial los rangos de radios y velocidades iniciales de las gotas que permiten sostener flamelets encendidos, con aumentos del orden del 16 % y 25 %, respectivamente. Asimismo, se demostró que la inyección discontinua permite acceder a nuevas regiones del espacio de soluciones, caracterizadas por estructuras no estacionarias que exhiben oscilaciones periódicas, así como fenómenos de extinción y re-ignición.

En el caso de la formulación con fracción de mezcla máxima desconocida, se utilizó una solución analítica para la fracción de mezcla asociada a perfiles de evaporación de la forma $\dot{S}_v = Ay^2 + By + C$, lo que permitió estimar de manera consistente el valor

de $Z_{\max}$ y definir adecuadamente las condiciones de borde del problema. A partir de este enfoque, se demostró que es posible generar de manera sistemática soluciones de las ecuaciones de flamelet al variar tanto la tasa de deformación como los parámetros que definen el perfil de evaporación.

Las estructuras obtenidas reproducen las características fundamentales observadas en llamas de spray y evidencian claramente la interacción entre reacción química, difusión y convección inducida por la evaporación. Este comportamiento no puede ser capturado mediante formulaciones basadas en flamelets gaseosos perturbados por spray, lo que subraya la relevancia del enfoque desarrollado.

El enfoque propuesto presenta un alto potencial para la generación de librerías de flamelets de spray destinadas a la simulación de llamas turbulentas. En particular, el uso de perfiles parabólicos de evaporación introduce un grado de flexibilidad que permite explorar de manera sistemática el espacio de soluciones. Como línea de trabajo futura, resulta fundamental desarrollar criterios para la selección de los parámetros A , B y C , identificar los perfiles más representativos bajo distintas condiciones de operación y evaluar su impacto en la fidelidad de modelos turbulentos basados en flamelets.

En conjunto, estos resultados contribuyen a una comprensión más profunda de la física subyacente en las ecuaciones de flamelets de spray y sientan las bases para el desarrollo de modelos flamelet más realistas destinados a la simulación de llamas turbulentas con presencia de fase líquida. Es importante destacar que estos avances son posibles gracias al desarrollo de los algoritmos y códigos numéricos propuestos en esta tesis, los cuales permiten resolver formulaciones que hasta ahora no habían sido abordadas en la literatura. En este sentido, el trabajo no solo amplía el espacio de soluciones conocido, sino que también establece una base computacional robusta para futuras investigaciones.

Finalmente, uno de los desafíos abiertos más relevantes, y que constituye una línea natural de trabajo futuro, consiste en resolver las ecuaciones de flamelets de spray de manera plenamente transitoria en espacios de fracción de mezcla no monótonos. La extensión de los algoritmos desarrollados en esta tesis hacia este tipo de configuraciones permitiría, en principio, acceder de forma completa al espacio de soluciones de dichas ecuaciones.

Bibliografía

- [1] International Energy Agency, World energy outlook, 2024. URL: <https://www.iea.org/reports/world-energy-outlook-2024>.
- [2] A. Demirbas, Progress and recent trends in biofuels, Prog. Energy Combust. Sci. 33 (2007) 1 – 18.
- [3] A. K. Agarwal, Biofuels (alcohols and biodiesel) applications as fuels for internal combustion engines, Prog. Energy Combust. Sci. 33 (2007) 233 – 271.
- [4] P. S. Nigam, A. Singh, Production of liquid biofuels from renewable resources, Prog. Energy Combust. Sci. 37 (2011) 52 – 68.
- [5] K. Kuo, Principles of Combustion, Wiley, 2005.
- [6] N. Peters, Turbulent Combustion, Cambridge University Press, 2000.
- [7] T. Poinso, D. Veynante, Theoretical and Numerical Combustion, Edwards, 2005.
- [8] W. A. Sirignano, Fluid Dynamics and Transport of Droplets and Sprays, 2 ed., Cambridge University Press, 2010.
- [9] S. R. Turns, An Introduction to Combustion Concepts and Applications, 3rd ed ed., McGraw-Hill, 2012.
- [10] N. Peters, Laminar diffusion flamelet models in non-premixed turbulent combustion, Prog. Energy Combust. Sci. 10 (1984) 319 – 339.
- [11] F. A. Williams, Recent advances in theoretical descriptions of turbulent diffusion flames, in: S. N. B. Murthy (Ed.), Turbulent Mixing in Nonreactive and Reactive Flows, Plenum Press, New York, 1975, pp. 189–208.

- [12] H. Pitsch, N. Peters, A consistent flamelet formulation for non-premixed combustion considering differential diffusion effects, *Combust. Flame* 114 (1998) 26 – 40.
- [13] O. Gicquel, N. Darabiha, D. Thevenin, Laminar premixed hydrogen/air counterflow flame simulations using flame prolongation of ildm with differential diffusion, *Proc. Combust. Inst.* 28 (2000) 1901 – 1908.
- [14] J. van Oijen, F. Lammers, L. de Goeij, Modeling of complex premixed burner systems by using flamelet-generated manifolds, *Combust. Flame* 127 (2001) 2124 – 2134.
- [15] K. Luo, J. Fan, K. Cen, New spray flamelet equations considering evaporation effects in the mixture fraction space, *Fuel* 103 (2013) 1154 – 1157.
- [16] H. Olguin, E. Gutheil, Influence of evaporation on spray flamelet structures, *Combust. Flame* 161 (2014) 987 – 996.
- [17] H. Olguin, E. Gutheil, Derivation and evaluation of a multi-regime spray flamelet model, *Zeitschrift für Physikalische Chemie* (2014).
- [18] 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 *ERCOFTAC Series*, Springer International Publishing, 2014, pp. 79–106.
- [19] 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, *Combust. Theor. Model.* 19 (2015) 773–806.
- [20] 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, *Combust. Flame* 208 (2019) 330 – 350.
- [21] D. O. Maionchi, F. P. Santos, J. Melguizo-Gavilanes, M. A. E. Kokubun, A generalised spray-flamelet formulation by means of a monotonic variable, *Combust. Theor. Model.* 25 (2021) 293–314.

- [22] C. Hollmann, E. Gutheil, Modeling of turbulent spray diffusion flames including detailed chemistry, *Symp. (Int.) Combust.* 26 (1996) 1731 – 1738.
- [23] E. Gutheil, W. Sirignano, Counterflow spray combustion modeling with detailed transport and detailed chemistry, *Combust. Flame* 113 (1998) 92 – 105.
- [24] C. Hollmann, E. Gutheil, Diffusion flames based on a laminar spray flame library, *Combust. Sci. Technol.* 135 (1998) 175–192.
- [25] H.-W. Ge, E. Gutheil, Simulation of a turbulent spray flame using coupled PDF gas phase and spray flamelet modeling, *Combust. Flame* 153 (2008) 173 – 185.
- [26] 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, *Combust. Sci. Technol.* 189 (2017) 322–339.
- [27] Y. Hu, H. Olguin, E. Gutheil, A spray flamelet/progress variable approach combined with a transported joint pdf model for turbulent spray flames, *Combust. Theor. Model.* 21 (2017) 1–28.
- [28] Y. Hu, R. Kai, R. Kurose, E. Gutheil, H. Olguin, Large eddy simulation of a partially pre-vaporized ethanol reacting spray using the multiphase dtf/flamelet model, *International Journal of Multiphase Flow* 125 (2020) 103216.
- [29] H. Watanabe, R. Kurose, S.-M. Hwang, F. Akamatsu, Characteristics of flamelets in spray flames formed in a laminar counterflow, *Combust. Flame* 148 (2007) 234–248.
- [30] Y. Wang, R. Cai, C. Shao, K. Luo, J. Fan, A priori and a posteriori studies of a novel spray flamelet tabulation methodology considering evaporation effects, *Fuel* 331 (2023) 125892.
- [31] Y. Wang, C. Shao, K. Luo, R. Cai, T. Jin, J. Fan, Les of a turbulent lifted methanol spray flame using a novel spray flamelet/progress variable model, *Energy* 284 (2023) 128608.
- [32] Y. Wang, C. Shao, T. Jin, K. Luo, J. Fan, Large eddy simulation of spray combustion using the spray flamelet/progress variable model: Further extension and validation, *Physics of Fluids* 35 (2023) 105156.

- [33] E. Gutheil, Multiple solutions for structures of laminar counterflow spray flames, *Progress in Computational Fluid Dynamics* 5 (2005) 414–419.
- [34] Z. Ying, H. Olguin, E. Gutheil, Multiple structures of laminar fuel-rich spray flames in the counterflow configuration, *Combust. Flame* 243 (2022) 111997.
- [35] Z. Ying, E. Gutheil, Multiple structures and transition mechanisms of laminar fuel-rich ethanol/air counterflowing spray flames, *Int. J. Spray Combust.* 15 (2023) 197–206.
- [36] F. Huenchuguala, L. Fuenzalida, O. Orellana, A. Scholtissek, C. Hasse, E. Gutheil, H. Olguin, Solutions of the spray flamelet equations in a non-monotonic mixture fraction space, *Int. J. Spray Combust. Dyn.* 3-11 (2026).
- [37] S. P. Burke, T. E. W. Schumann, Diffusion flames, *Industrial & Engineering Chemistry* 20 (1928) 998–1004.
- [38] D. Veynante, L. Vervisch, Turbulent combustion modeling, *Prog. Energy Combust. Sci.* 28 (2002) 193 – 266.
- [39] A. Masri, R. Bilger, R. Dibble, Turbulent nonpremixed flames of methane near extinction: Probability density functions, *Combust. Flame* 73 (1988) 261 – 285.
- [40] R. Bilger, The structure of turbulent nonpremixed flames, *Symp. (Int.) Combust.* 22 (1989) 475 – 488.
- [41] L. John Wiley, Sons, *Laminar Non-Premixed Flames*, 2012, pp. 125–205.
- [42] C. Hasse, N. Peters, A two mixture fraction flamelet model applied to split injections in a DI diesel engine, *Proc. Combust. Inst.* 30 (2005) 2755 – 2762.
- [43] 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, *Combust. Flame* 162 (2015) 1507 – 1529.
- [44] E. Knudsen, H. Pitsch, A general flamelet transformation useful for distinguishing between premixed and non-premixed modes of combustion, *Combust. Flame* 156 (2009) 678 – 696.

-
- [45] P.-D. Nguyen, L. Vervisch, V. Subramanian, P. Domingo, Multidimensional flamelet-generated manifolds for partially premixed combustion, *Combust. Flame* 157 (2010) 43 – 61.
- [46] E. Knudsen, H. Pitsch, Capabilities and limitations of multi-regime flamelet combustion models, *Combust. Flame* 159 (2012) 242 – 264.
- [47] 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.
- [48] H. Pitsch, C. M. Cha, S. Fedotov, Flamelet modelling of non-premixed turbulent combustion with local extinction and re-ignition, *Combust. Theor. Model.* 7 (2003) 317–332.
- [49] C. Pierce, P. Moin, Progress-variable approach for large-eddy simulation of non-premixed turbulent combustion, *J. Fluid Mech.* 504 (2004) 73–97.
- [50] 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, *Proc. Combust. Inst.* 30 (2005) 793 – 800.
- [51] C. Felsch, M. Gauding, C. Hasse, S. Vogel, N. Peters, An extended flamelet model for multiple injections in diesel engines, *Proc. Combust. Inst.* 32 (2009) 2775 – 2783.
- [52] C. Bekdemir, L. Somers, L. de Goey, Modeling diesel engine combustion using pressure dependent flamelet generated manifolds, *Proc. Combust. Inst.* 33 (2011) 2887 – 2894.
- [53] V. Mittal, D. J. Cook, H. Pitsch, An extended multi-regime flamelet model for IC engines, *Combust. Flame* 159 (2012) 2767 – 2776. Special Issue on Turbulent Combustion.
- [54] L. Verhoeven, W. Ramaekers, J. van Oijen, L. de Goey, Modeling non-premixed laminar co-flow flames using flamelet-generated manifolds, *Combust. Flame* 159 (2012) 230 – 241.

- [55] 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.
- [56] 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.
- [57] 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, *Combust. Flame* 162 (2015) 3016 – 3029.
- [58] Z. Sun, C. Hasse, A. Scholtissek, Ignition under strained conditions: A comparison between instationary counterflow and non-premixed flamelet solutions, *Flow, Turbul. Combust.* 106 (2022) 1277–1293.
- [59] Z. Sun, S. Gierth, M. Pollack, C. Hasse, A. Scholtissek, Ignition under strained conditions: Unsteady flamelet progress variable modeling for diesel engine conditions in the transient counterflow configuration, *Combust. Flame* 240 (2022) 111841.
- [60] H. Pitsch, Unsteady flamelet modeling of differential diffusion in turbulent jet diffusion flames, *Combust. Flame* 123 (2000) 358 – 374.
- [61] M. Ihme, Y. C. See, Prediction of autoignition in a lifted methane/air flame using an unsteady flamelet/progress variable model, *Combust. Flame* 157 (2010) 1850 – 1862.
- [62] H. Pitsch, M. Chen, N. Peters, Unsteady flamelet modeling of turbulent hydrogen-air diffusion flames, *Symp. (Int.) Combust.* 27 (1998) 1057 – 1064.
- [63] S. Mitarai, G. Kosály, J. Riley, A new lagrangian flamelet model for local flame extinction and reignition, *Combust. Flame* 137 (2004) 306–319.
- [64] H. Pitsch, M. Ihme, An unsteady/flamelet progress variable method for les of nonpremixed turbulent combustion, 43rd AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit - Meeting Papers (2005).

- [65] K. Claramunt, R. Consul, D. Carbonell, C. Perez-Segarra, Analysis of the laminar flamelet concept for nonpremixed laminar flames, *Combust. Flame* 145 (2006) 845 – 862.
- [66] F. Mauß, D. Keller, N. Peters, A lagrangian simulation of flamelet extinction and re-ignition in turbulent jet diffusion flames, *Symp. (Int.) Combust.* 23 (1991) 693–698.
- [67] B. Cuenot, F. N. Egolfopoulos, T. Poinso, An unsteady laminar flamelet model for non-premixed combustion, *Combust. Theor. Model.* 4 (2000) 77–97.
- [68] W. A. Al-Masseeh, D. Bradley, P. Gaskell, A. Lau, Turbulent premixed, swirling combustion: Direct stress, strained flamelet modelling and experimental investigation, *Symp. (Int.) Combust.* 23 (1991) 825 – 833. Twenty-Third *Symp. (Int.) Combust.*
- [69] J. O. Hirschfelder, C. F. Curtiss, The theory of flame propagation, *The Journal of Chemical Physics* 17 (1949) 1076–1081.
- [70] T. Coffee, J. Heimerl, Transport algorithms for premixed, laminar steady-state flames, *Combustion and Flame* 43 (1981) 273–289.
- [71] C. Kortschik, S. Honnet, N. Peters, Influence of curvature on the onset of autoignition in a corrugated counterflow mixing field, *Combust. Flame* 142 (2005) 140 – 152.
- [72] A. Scholtissek, R. Pitz, C. Hasse, Flamelet budget and regime analysis for non-premixed tubular flames, *Proc. Combust. Inst.* 36 (2017) 1349–1356.
- [73] F. Dietzsch, A. Scholtissek, F. Hunger, C. Hasse, The impact of thermal diffusion on the structure of non-premixed flames, *Combust. Flame* 194 (2018) 352–362.
- [74] M. Ihme, Y. C. See, Les flamelet modeling of a three-stream mild combustor: Analysis of flame sensitivity to scalar inflow conditions, *Proc. Combust. Inst.* 33 (2011) 1309–1317.
- [75] E. M. Doran, H. Pitsch, D. J. Cook, A priori testing of a two-dimensional unsteady flamelet model for three-feed combustion systems, *Proc. Combust. Inst.* 34 (2013) 1317–1324.

- [76] J. C. Hewson, An extinction criterion for nonpremixed flames subject to brief periods of high dissipation rates, *Combust. Flame* 160 (2013) 887 – 897.
- [77] 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, *Proc. Combust. Inst.* 37 (2019) 1529 – 1536.
- [78] B. Franzelli, B. Fiorina, N. Darabiha, A tabulated chemistry method for spray combustion, *Proc. Combust. Inst.* 34 (2013) 1659 – 1666.
- [79] F. Huenchuguala, F. Rivadeneira, A. Scholtissek, C. Hasse, E. Gutheil, H. Olguin, Unsteady solutions of the spray flamelet equations, *Combust. Flame* 283 (2026) 114636.
- [80] H. Olguin, P. Domingo, L. Vervisch, C. Hasse, A. Scholtissek, A self-consistent extension of flamelet theory for partially premixed combustion, *Combustion and Flame* 255 (2023) 112911.
- [81] H. Olguin, P. Domingo, L. Vervisch, C. Hasse, Advantages of the Adoption of a Generalized Flame Displacement Velocity as a Central Element of Flamelet Theory, *Flow, Turbul. Combust.* (2024).
- [82] H. Olguin, P. Domingo, L. Vervisch, C. Hasse, A. Scholtissek, Advantages of the adoption of a generalized flame displacement velocity as a central element of flamelet theory, *Flow, Turbul. Combust.* 114 (2025).
- [83] 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, *Combust. Flame* 218 (2020) 205 – 217.
- [84] A. Y. Klimenko, On the relation between the conditional moment closure and unsteady flamelets, *Combust. Theor. Model.* 5 (2001) 275–294.
- [85] G. Continillo, W. Sirignano, Counterflow spray combustion modeling, *Combust. Flame* 81 (1990) 325 – 340.
- [86] B. Abramzon, W. Sirignano, Droplet vaporization model for spray combustion calculations, *Int. J. Heat Mass Transf.* 32(9) (1989) 1605–1618.

- [87] L. Fuenzalida, Tesis de magíster, Universidad Técnica Federico Santa María, En preparación.
- [88] Y. Pala, M. O. Ertas, A New Analytical Method for Solving General Riccati Equation, *Univers. J. Appl. Math.* 5 (2017) 11–16.
- [89] M. Abramowitz, I. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions: With Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*, Applied mathematics series, Dover Publications, 1965.
- [90] N. Temme, Numerical and asymptotic aspects of parabolic cylinder functions, *J. Comput. Appl. Math.* 121 (2000) 221–246.
- [91] H. K. Versteeg, W. Malalasekera, *An introduction to computational fluid dynamics*, Pearson Prentice Hall, Harlow, 1995.
- [92] F. González, Cierre de las ecuaciones de flamelet para una formulación Lagrangiana para la fase líquida en llamas de flujos opuestos, Tesis de magíster, Universidad Técnica Federico Santa María, 2020.
- [93] M. R. Archambault, A maximum entropy moment closure approach to modeling the evolution of spray flows, Ph.D. thesis, Stanford University, 1999.
- [94] D. Carbonell, C. Perez-Segarra, P. Coelho, A. Oliva, Flamelet mathematical models for non-premixed laminar combustion, *Combust. Flame* 156 (2009) 334 – 347.
- [95] A. G. Novoselov, C. K. Law, M. E. Mueller, Direct numerical simulation of turbulent nonpremixed “cool” flames: Applicability of flamelet models, *Proc. Combust. Inst.* 37 (2019) 2143–2150.
- [96] P. Yu, R. Kurose, H. Watanabe, Investigation of the derivation and consistency of the quasi-two-dimensional flamelet models for non-premixed flames, *Phys. Fluids* 35 (2023) 015116.
- [97] C. Chevalier, Entwicklung eines detaillierten Reaktionsmechanismus zur Modellierung der Verbrennungsprozesse von Kohlenwasserstoffen bei Hoch- und Niedertemperaturbedingungen, PhD Thesis, Universität Stuttgart, 1993.
- [98] E. Gutheil, Structure and extinction of laminar ethanol-air spray flames, *Combust. Theor. Model.* 5 (2001) 131–145.