

Modelado computacional Reynolds-Averaged Navier-Stokes flamelets para el estudio del proceso de combustión turbulenta de sprays

G. Guevara-Morales^a, O. Huerta-Chávez^{a,b}, and A. Arias-Montaña^a

^aSección de Estudios de Posgrado e Investigación, Escuela Superior de Ingeniería Mecánica y Eléctrica Unidad Profesional Ticomán del Instituto Politécnico Nacional,

Av. Ticomán 600, San José Ticomán, 07340, Ciudad de México, México.

^bCátedras CONACYT Posgrado de Mecatrónica, Tecnológico de Estudios Superiores de Ecatepec TESE, Av. Tecnológico S/N, Col. Valle de Anáhuac, Ecatepec Edo. de México

Received 10 February 2019; accepted 18 July 2019

En el presente trabajo se aplica una técnica numérica 2D acoplada de Dinámica de Fluidos Computacional para reproducir y analizar los procesos de combustión turbulenta de sprays. El método utilizado es el Promediado de los Esfuerzos de Reynolds de las Ecuaciones de Navier-Stokes, acoplado al modelo de combustión de flamas en contraflujo (flamelets) a través de una función de densidad probabilística. La simulación del proceso de combustión está basada en el modelo experimental desarrollado por el National Institute of Standards and Technology y los resultados experimentales fueron reportados por Widmann y Presser [16]. Los resultados obtenidos de la simulación son comparados con los resultados experimentales de velocidad a 9.5 y 17.6 mm del inyector en la dirección axial. Estos resultados muestran correspondencias cerradas con los datos experimentales de los perfiles de velocidades radial, axial y tangencial a lo ancho de la cámara de combustión en el intervalo de 14 a 50 mm. Además de la velocidad del flujo, también se compara la distribución, tamaño y velocidad de las gotas de combustible, así como la composición de los gases de escape. De acuerdo con los resultados, la diferencia en la distribución de gotas sobre el ángulo de dispersión del spray afecta al resto de características del spray. La diferencia en el diámetro promedio de Sauter sugiere que la velocidad de evaporación de las gotas de mayor tamaño es sobreestimado. Finalmente se confirma que, dada la suposición sobre la velocidad de reacción rápida, el modelo de combustión predice que la combustión es prácticamente completa, aunque se tengan gotas cuya evaporación se logra más allá de la zona de reacción.

Descriptores: Combustión; dinámica de fluidos computacional; spray.

In this work, a 2D numerical technique using Computational Fluid Dynamics is applied to reproduce and analyze the process of turbulent combustion of sprays. The method used is the Reynolds-Averaged Navier-Stokes Equations, coupled with the steady-flamelets combustion model through a probability density function. The simulation of the combustion process is based on the experimental model developed by the National Institute of Standards and Technology and the experimental results reported by Widmann and Presser [16]. The velocity components obtained from the simulation are compared with the experimental results at 9.5 and 17.6 mm from the injection point in the axial direction. These results show close correspondences with the experimental data of the radial, axial and tangential velocity profiles across the combustion chamber in the range of 14 to 50 mm in the radial direction. In addition to the air velocity, the distribution, size, and speed of the fuel droplets are also compared, as well as the composition of the exhaust gases. According to the results, the difference in the distribution of drops over the spray dispersion angle affects the rest of the spray characteristics. The difference in the average diameter of Sauter suggests that the evaporation rate of the larger droplets is overestimated. Finally, it is confirmed that, given the assumption about the infinitely fast reaction rate, the combustion model predicts that combustion is practically complete, although there are droplets whose evaporation is achieved beyond the reaction zone.

Keywords: Combustion; computational fluid dynamics; spray.

PACS: 02.60.Cb; 02.70.-c; 47.11.-j; 47.27.E-; 47.55.D-; 47.70.Pq; 82.33.Vx

DOI: <https://doi.org/10.31349/RevMexFis.66.56>

1. Introducción

La combustión de sprays es un proceso complejo que involucra diferentes fenómenos físicos y químicos, tales como turbulencia, cambios de fase, mezclado, reacciones químicas y transferencia de calor. De forma general, el proceso consiste en la inyección de combustible líquido dentro de la cámara de combustión a través de un sistema donde se atomiza, dispersa y evapora en el medio gaseoso, compuesto de aire, combustible evaporado y productos calientes de la combustión, los cuales generalmente son recirculados en la cámara para mantener la reacción. El combustible evaporado se mezcla con el oxígeno a nivel macro, a través de mecanismos de convección donde interviene la turbulencia, y a nivel –molecular co-

nocido como micro-mezclado– es debido a mecanismos de difusión. Esta mezcla reacciona una vez que se alcanza la temperatura de activación necesaria [12].

Con el objetivo de estudiar las características principales del proceso de combustión y gracias a la capacidad de captar a detalle el comportamiento del flujo en una cámara sin ser invasiva con el mismo, además de solo representar una fracción del costo de experimentación, es la razón principal en últimas décadas del desarrollo y empleo de herramientas numéricas como la Dinámica de Fluidos Computacionales (CFD), que se han convertido en un activo campo de investigación en el desarrollo de modelos cada vez más precisos y de mayor complejidad. En este aspecto, se han desarrollado diferentes

métodos para tratar la turbulencia y la combustión. Dado que las propiedades del flujo presentan fluctuaciones en diferentes escalas de tiempo y espacio, la simulación numérica directa o Direct Numerical Simulation (DNS), que aproxima directamente las ecuaciones de Navier-Stokes sin promediados, modelados ni simplificaciones, resulta en un elevado costo computacional. Por ello surgen modelos alternos que aproximan este comportamiento fluctuante, los más comunes son los modelos basados en el promedio de los esfuerzos de Reynolds de las ecuaciones de Navier-Stokes, mejor conocidos como Reynolds-averaged Navier-Stokes equations (RANS), cuyo resultado es el promediado en el tiempo de las variables fluctuantes [12]. Otra alternativa de aproximación intermedia a estos modelos son las simulaciones de las Grandes Escalas de Turbulencia o Large-Eddy Simulation (LES) las cuales resuelven directamente dichas escalas y solo modelan o promediadas las fluctuaciones de las escalas más pequeñas [12]. Esto permite captar las estructuras dinámicas del flujo de mayor tamaño (grandes escalas) para flujos tridimensionales. Si se considera que el proceso de combustión turbulento es afectado en gran medida por estas estructuras coherentes de las grandes escalas y por el valor instantáneo de las propiedades del flujo, el uso de LES resulta atractivo para analizar este fenómeno.

En cuanto a la modelación de la combustión, debido a la no-linealidad del término de velocidad de reacción (ω), definido por la ley de acción de masas y de Arrhenius, su promedio $\bar{\omega}$ no puede expresarse como función del promedio de sus variables (concentraciones de masa, densidad y temperatura). Esto impide tratar la ecuación de transporte de especies químicas de forma similar a como se tratan las ecuaciones del flujo y la turbulencia. Por ello, se han desarrollado modelos de combustión basados en características propias del flujo (conocidas) o en variables relativamente sencillas de modelar. Veynante y Vervisch [14] presentan una revisión extensiva de los modelos de combustión, mismos que se dividen en dos, según la forma en que consideran la cinemática de la reacción: de velocidad de reacción infinita y finita. La diferencia está dada por la relación entre el tiempo característico de la reacción química (τ_c) y del movimiento del flujo turbulento (τ_t).

Los modelos de velocidad de reacción infinita asumen que los reactivos se queman tan pronto como se mezclan. Los procesos químicos son rápidos comparados con los procesos de transporte (difusión y convección). Por ende, al conocer cómo se mezclan los elementos, se conoce también cómo se oxidan. Entre estos modelos se tienen los de equilibrio químico, que en el caso de flamas de difusión, se basan en determinar la fracción de mezcla (f) a lo largo del dominio. El valor de f varía entre 0 y 1, donde 1 corresponde a una región del flujo donde únicamente se tiene combustible y 0 donde únicamente se tiene oxígeno. El resto de las variables de la reacción (temperatura, fracción de masa de los productos, densidad) se determinan a partir de f , debido a que existe una relación lineal entre estas variables y la fracción de mezcla. Basado en f , también se tiene el modelo de flamas en

contraflujo ("flamelets") [11,14,15], que asume la flama turbulenta como un conjunto de flamas laminares en contraflujo. En estas flamas se observa que la reacción química parte del equilibrio químico; conforme la velocidad relativa y/o la distancia entre los flujos de combustible y aire aumenta, hasta el punto en que se extingue la flama. Esta característica se expresa a través de una variable denominada disipación escalar (χ). Dado que f está definida a lo largo de la distancia entre los flujos, χ se define a partir del gradiente de f , de esta manera, se representa el estrechamiento de la flama. El modelo de flamas en contraflujo, a diferencia del modelo de equilibrio químico, considera la desviación de la reacción del equilibrio químico debido al estrechamiento de la flama. En este caso, las variables de la reacción son función de f y χ . Además de estos modelos de reacción rápida se presenta el modelo Eddy-Break-Up (EBU) [14], que considera que la reacción química tiene lugar dentro de las estructuras más pequeñas del flujo, donde ocurre el mezclado a nivel molecular. Dado que la reacción es infinitamente rápida, el flujo de reactivos entre estas pequeñas estructuras y el medio que las rodean (mezclado turbulento) es el proceso limitante y determina la cinemática de reacción. La escala de estas estructuras está relacionada y es comparable a la escala de Kolmogorov. El modelo Eddy Dissipation Concept (EDC), desarrollado por Magnussen [9,10], es una extensión del modelo EBU. Este modelo, a diferencia de EBU, considera que la reacción está limitada por la especie deficiente, que puede ser el combustible, el oxidante o los productos calientes de la combustión.

Aunque eficientes y de un costo computacional moderado, los modelos de velocidad infinita fallan en predecir con exactitud la formación de algunos productos de la combustión (como es el caso de los óxidos de nitrógeno), cuyo tiempo de formación es más lento, además de otros aspectos del comportamiento de la flama, como su extinción e ignición [14,15]. Debido a esto se han desarrollado modelos de mayor precisión. Los modelos de velocidad finita de reacción consideran que algunas reacciones parten del equilibrio conforme se aumenta la velocidad de mezclado. Entre estos se tiene el modelo Second Order Moment (SOM), desarrollado por Zhou *et al.* [18] y basado en la expansión de Reynolds de la velocidad de reacción y en su promedio en el tiempo. En esta expansión algunos términos son despreciados y las correlaciones, o segundo momento estadístico, se determinan a través de ecuaciones de transporte derivadas de la ecuación de transporte de especies químicas. Este modelo ha demostrado mayor precisión al predecir la emisión de contaminantes de lenta formación, sin embargo requiere una validación más profunda [17]. Entre los modelos de velocidad finita también se encuentran los métodos estadísticos, basados en determinar la función de densidad de probabilidad (PDF) conjunta de las variables que intervienen en la definición de la velocidad de reacción química (temperatura, fracción de masa de los reactivos y densidad) [15]. De esta forma, la media $\bar{\omega}$ se calcula simplemente a partir de un promedio de los estados (promedio ponderado) entre ω y la PDF. El método más sencillo para determinar la PDF de las variables es construir la función con

base en formas empíricas predeterminadas (distribución beta, gaussiana, entre otras). No obstante, un método más preciso (aunque más complejo) consiste en determinar la PDF a partir de una ecuación de transporte de la misma función derivada de las ecuaciones de Navier-Stokes (dado que el movimiento del flujo determina la forma de la PDF). La dificultad de este método radica en la gran cantidad de variables independientes que intervienen en la ecuación de transporte. Los modelos de combustión mencionados han sido desarrollados para la combustión de una sola fase. En los casos necesarios, se acoplan a modelos de evaporación de gotas de combustible. Es necesario un mayor desarrollo de modelos propios para combustión de dos fases que consideren las características particulares de este tipo de combustión.

En el presente trabajo de investigación se tiene como objetivo implementar una técnica numérica acoplada RANS-FLAMELETS para el estudio del proceso de combustión turbulenta de sprays. Lo anterior se basa y compara con un modelo experimental de cámara de combustión desarrollado en el National Institute of Standards and Technology (NIST) [16]. Los parámetros de operación y resultados experimentales han sido utilizados para validar los datos numéricos arrojados durante la simulación. La presente investigación forma parte de un proyecto de tesis del Instituto Politécnico Nacional, cuyo objetivo final es estudiar la formación de óxidos de nitrógeno (NO_x) a través de simulación LES y basado en el modelo del NIST. Este artículo está dividido en las siguientes secciones: (1) se presenta la introducción del tema, (2) se describen las características del modelo experimental y computacional, así como los modelos de turbulencia, formación de spray y combustión empleados en las simulaciones RANS, además de las condiciones iniciales y parámetros de operación, (3) se presentan y discuten los resultados de la simulación y (4) conclusiones.

2. Metodología

2.1. Modelo experimental

Como base para este trabajo, se seleccionó de entre la literatura el modelo experimental desarrollado por el NIST junto con los datos reportados por Widmann y Presser [16]. El modelo del NIST, ilustrado en la Fig. 1, consiste en un contenedor cilíndrico de acero a presión ambiental, dentro del cual se genera una flama de difusión utilizando un spray de metanol líquido (CH₃OH) y un flujo de aire en remolino. El spray se produce empleando un atomizador de presión que forma un cono hueco de combustible. Alrededor del sistema de inyección se ubica un generador de remolinos ("swirler") con 12 alabes ajustables. Este equipo experimental fue diseñado para generar una base de datos útil para la validación de modelos de combustión. Las mediciones del spray fueron obtenidas de forma no intrusiva, utilizando Phase Doppler Interferometry (PDI). La temperatura del gas a la salida de la cámara, así como en las paredes del contenedor, fue medida a través de termopares. Para caracterizar el flujo de aire se empleó Particle Image Velocimetry (PIV). Los resultados reportados en [16],

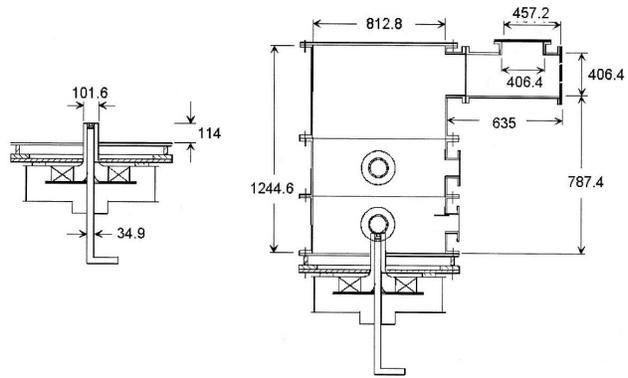


FIGURA 1. Modelo experimental del NIST, unidades: mm [16].

medidos durante el estado estable del proceso, se enlistan a continuación:

- Spray: Diámetro de Sauter, densidad de gotas, flujo volumétrico y velocidad axial y radial promedio de las gotas, dados en función de la posición radial y medidos a siete alturas diferentes del punto de inyección (5, 15, 25, 35, 45, 55 y 65 mm). Incluye incertidumbre de medición.
- Flujo: Velocidad radial, axial y tangencial, así como las fluctuaciones de las mismas, dadas en función de la posición radial y medidas a tres alturas diferentes del punto de inyección (1.4, 9.5 y 17.6 mm). Estos datos son medidos en ausencia y presencia del spray. Incluye incertidumbre de medición.
- Temperatura: Temperatura promedio en la pared del contenedor a diez alturas diferentes de la base del mismo (99, 165, 231, 297, 429, 561, 693, 826, 958 y 1090 mm). Temperatura promedio de los gases de salida, medidos en trece puntos distribuidos en el área de salida de los gases.
- Especies: Concentración de especies (CO, CO₂, CH₃OH) en el gas de salida. Incluye incertidumbre de medición.

El modelo del NIST fue elegido como base para el presente estudio debido a la accesibilidad de los resultados experimentales, parámetros de operación y características reportadas del mismo, que permiten definir con precisión las condiciones de frontera de la simulación, así como contrastar los resultados con la variedad de datos experimentales medidos en el equipo. Además, este modelo admite simplificaciones que permiten enfocar los recursos de la simulación en el análisis de los fenómenos fundamentales de la combustión turbulenta. Las consideraciones y los resultados de simulaciones RANS anteriores basadas en el modelo del NIST (Zhu *et al.* [19], Crocker *et al.* [3] y Collazo *et al.* [2]) constituyen el punto de partida en ciertos aspectos de esta simulación.

2.2. Modelo computacional

Como se observa en la Fig. 1, el ducto de salida de los gases se ubica en la parte lateral de la cámara, ocasionando una asimetría en el modelo. No obstante, de acuerdo a lo mencionado por Zhu *et al.* [19] y Crocker *et al.* [3], el efecto que produce la posición de este ducto de escape es irrelevante para el flujo que se desarrolla cerca del atomizador (zona de interés), de modo que se puede considerar la cara superior del cilindro como la salida de los gases. Debido a esto, el modelo puede simplificarse a 2D y al ser axisimétrico respecto al eje axial, solo es necesario modelar la mitad de la cámara. De esta forma se reduce en gran medida el tiempo de simulación. En un flujo axisimétrico se asume que no existen gradientes circunferenciales en las variables del flujo, sin embargo, esto no impide que se presente un perfil de velocidad circunferencial (tangencial), debido a la rotación en el flujo. En el caso del spray, esta consideración implica que partículas inyectadas, así como sus propiedades, también son axisimétricas. Aunque la simulación 3D del spray reproduce con mayor detalle el comportamiento de las gotas, el modelo 2D es capaz de reproducir adecuadamente las características generales del spray [19]. En la Fig. 2 se presenta el modelo 2D de la cámara, donde se señala la ubicación de la entrada y salida de los gases. El área de salida de los gases se mantiene igual que el área de salida del modelo experimental, cuyo escape tiene un radio de 203.2 mm.

Dada la simplicidad de la geometría, se admite una malla estructurada compuesta de 338 058 elementos cuadrados, con un refinamiento de los elementos en la dirección de la entrada del aire y combustible. Los parámetros del mallado se determinaron a partir de los resultados del estudio de independencia de malla. En este estudio se comparó la temperatura promedio por unidad de masa obtenida de las diferentes mallas. A diferencia de una simulación estacionaria convencional, donde la solución converge a un resultado estable (invariante), la implementación de un spray transitorio acoplado a un flujo estacionario, como es el caso de este trabajo, modi-

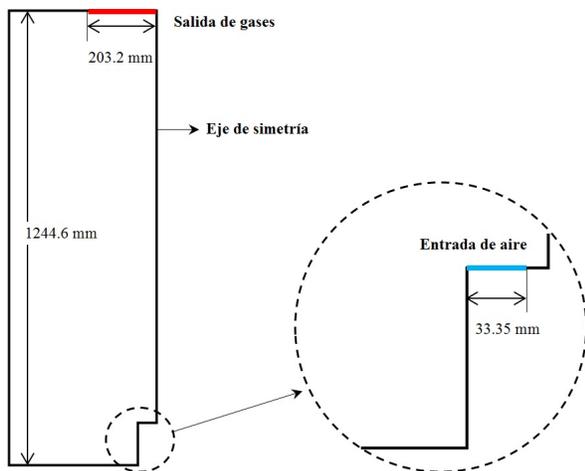


FIGURA 2. Modelo computación para simulación RANS.

fica este resultado. En un spray transitorio, las propiedades de las partículas inyectadas al dominio (tamaño, velocidad, dirección, posición, colisiones) varían de forma aleatoria en cada intervalo de tiempo en que son inyectadas. Lo anterior resulta en una variación del calor liberado por la reacción química y por tanto, de la temperatura global dentro de la cámara. Debido a esto el resultado de la simulación converge hacia un estado de estabilidad estadística, en lugar de un valor estacionario. En este estado la solución variará en torno a un valor esperado (media estadística) y con una varianza determinada. Por lo anterior la media estadística de la temperatura promedio (obtenida una vez lograda la estabilidad del resultado) es la variable empleada para comparar las diferentes mallas del estudio de independencia.

2.3. Modelo de turbulencia

En los modelos RANS, el movimiento del flujo está basado en las ecuaciones promediadas de transporte de masa (Ec. (1)) y de momento (2). Para flujos donde la densidad permanece constante se emplea el promedio de Reynolds (denotado por la barra superior “—”) para tratar las variables fluctuantes. Sin embargo, cuando la densidad no es constante (como es el caso de flujos reactivos donde se presentan importantes gradientes de temperatura) es conveniente emplear el promedio de Favre (denotado por la tilde “~”). La forma de las ecuaciones obtenidas resulta igual empleado el promedio de Reynolds como el de Favre, sin embargo al usar este último se obtiene el promedio de masa de las variables. En las Ecs. (1) y (2), las variables m_S y F_S representan términos fuente de masa y momento respectivamente, a través de los cuales se considera el vapor y momento transferido por las gotas hacia a la fase gaseosa.

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j}{\partial x_j} = m_S \tag{1}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j) \\ = - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial \bar{\tau}_{ij}}{\partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}'_j) + F_S \end{aligned} \tag{2}$$

La turbulencia del flujo se modeló empleando el modelo estándar κ - ϵ disponible en Fluent. Se eligió este modelo debido a la versatilidad del mismo, que admite su uso en aplicaciones de combustión, y a lo económico que este resulta. Aunque la recomendación general señala que para flujos con anisotropía (como aquellos con circulación) el uso de modelos Reynolds Stress Model (RSM) es más adecuado, el moderado número de remolino del flujo estudiado (0.6) no justifica su uso, dado el incremento en el tiempo de procesamiento que este involucra.

El modelo κ - ϵ se basa en la hipótesis de Boussinesq. De acuerdo con esta hipótesis, el tensor de esfuerzo residual ($\tilde{u}'_i \tilde{u}'_j$), obtenido al promediar las ecuaciones de Navier-Stokes (Ec. (2)), está dado en función de la viscosidad turbulenta (μ_t). El modelo κ - ϵ se caracteriza por determinar μ_t a

partir de la energía cinética turbulenta (κ) y la disipación de la energía (ϵ), *i.e.* $\mu_t = \rho C_\mu \kappa^2 / \epsilon$, donde C_μ es una constante. El modelo resuelve dos ecuaciones de transporte, una para κ (Ec. (3)) derivada directamente de las ecuaciones de Navier-Stokes y otra para ϵ (Ec. (4)) determinada de forma empírica a partir de su comportamiento en diversos flujos.

En este estudio el fluido se modela como un gas ideal incompresible. Bajo esta consideración el software asume que no hay cambios de densidad por efectos de la presión, sin embargo esto no excluye cambios de densidad debido al efecto de la temperatura. Estos se determinan a través de la ecuación de estado del gas ideal, fijando la presión constante a 1 atm, para relacionar así la densidad con la temperatura.

$$\frac{\partial \bar{\rho} \kappa}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i \kappa}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\frac{\mu_t}{\sigma_\kappa} \right) \nabla \kappa \right] + \bar{\rho} P_\kappa - \bar{\rho} \epsilon \quad (3)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \epsilon}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i \epsilon}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \right) \nabla \epsilon \right] + C_{1\epsilon} \frac{\bar{\rho} P_\kappa \epsilon}{\kappa} - C_{2\epsilon} \frac{\bar{\rho} \epsilon^2}{\kappa} \quad (4)$$

2.4. Formación del spray

La inyección y atomización del combustible no son simuladas directamente. En su lugar, el diámetro de las gotas del spray se determina a través de un modelo y durante la simulación se inyectan paquetes de gotas con el diámetro calculado. El sub-modelo de atomizador de presión de Fluent, empleado en este trabajo, se basa en el modelo de atomización Linearized Instability Sheet Atomization (LISA) desarrollado por Schmidt *et al.* [13]. El modelo LISA determina la media estadística del diámetro de las gotas del spray (\bar{d}), a partir de características conocidas del atomizador. El modelo se basa en el mecanismo de atomización clásico de películas de combustible ilustrado en la Fig. 3.

En primer lugar, el modelo calcula el grosor de la película de combustible (t_s), como función del flujo de masa, presión, diámetro de inyección y ángulo del spray. El tipo de atomizador empleado en la cámara es de cono hueco con ángulo nominal de 60° . Sin embargo, al comparar los resultados experimentales de la dispersión del spray con la simulación, el autor consideró que un ángulo de 58° se ajusta mejor a los resultados experimentales. De acuerdo con la información del

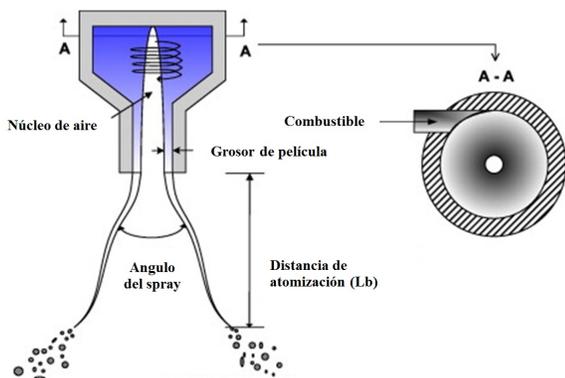


FIGURA 3. Mecanismo de atomización considerado en el modelo LISA [5].

TABLA I. Parámetros de operación del modelo experimental.

Parámetro	Valor
Temperatura del aire	300 K
Temperatura del combustible	300 K
Flujo de combustible	3 kg/hr
Presión de inyección	690 kPa
Angulo de inyección	60°
Presión de operación	1 atm
Temperatura ambiente	300 K

sitio web del NIST [1], se empleó un atomizador tipo “De-lavan WDA-1.0” cuyo diámetro de salida es de 0.28 mm (de acuerdo con la información del fabricante). La presión y el flujo de masa son reportados por Widmann y Presser [16] y se resumen, junto con otros parámetros de operación, en la Tabla I.

Posteriormente, considerando un espectro de perturbaciones impuesto a una película de combustible de grosor t_s que se mueve a una velocidad U_s a través de un gas estático, la perturbación más inestable, y causará la ruptura de la película, será aquella con la mayor velocidad de crecimiento (Ω). Siendo así, se calcula Ω maximizando la ecuación establecida para la velocidad de crecimiento. Esta ecuación es función de la longitud de onda k , por lo tanto, Ω está dada por el número de longitud de onda k_s . Cuando la perturbación, con número de longitud de onda k_s y crecimiento Ω , alcance una amplitud de onda crítica (η_b), la película se desintegrará en ligamentos de diámetro d_L . Este diámetro está dado por la Ec. (5). En la Ec. (5) se presentan dos posibilidades. En el primer caso, la longitud de onda es corta comparada con t_s y por tanto el valor de d_L dependerá de k_s y de la constante del ligamento C_L . En el segundo caso, la longitud de onda es larga comparada con t_s y el valor de d_L dependerá de k_s y de h_f , que es el grosor de la película en el punto donde ocurre la atomización. La distancia (L_b) entre este punto y el punto de inyección se calcula a partir de la velocidad de la película y el tiempo en que ocurre la atomización (τ_s), *i.e.* $L_b = U_s \tau_s$. El tiempo (τ_s) está dado por la ecuación de la amplitud crítica (Ec. (6)). Con lo anterior, L_b se expresa en la Ec. (7) en función de U_s , Ω y el término $\ln \eta_b / \eta_0$, denominado constante de la película. El software da un valor de 12 a este último término basado en resultados experimentales para números de Weber entre 2 y 200 [4]. El grosor (h_f) es calculado L_b y el grosor inicial de la película. El diámetro de las gotas (d_0), formadas a partir de la atomización del ligamento de diámetro d_L , es determinado por la Ec. (8). Esta ecuación se basa la longitud de onda que causa la división del ligamento (λ_{opt}) y el balance de volumen entre el ligamento y una esfera. El valor de d_0 , dado por el modelo LISA, se asume como la esperanza del diámetro (\bar{d}) en una distribución de gotas de tipo Rosin-Rammler. En esta función, la fracción de masa de gotas con diámetro mayor a un diámetro dado (d) se define por la Ec. (9). En esta

ecuación Y_d representa la fracción de masa y n es un parámetro que indica la dispersión del tamaño de las gotas. Para la mayoría de las aplicaciones, n varía entre 1.8 y 3 [6].

$$d_L = \left\{ \sqrt{\frac{2\pi C_L}{k_s}}, \sqrt{\frac{8h_f}{k_s}} \right\} \quad (5)$$

$$\eta_b = \eta_0 e^{\Omega \tau_s} \quad (6)$$

$$L_b = \frac{U_S}{\Omega} \ln \left(\frac{\eta_b}{\eta_0} \right) \quad (7)$$

$$d_0 = 1.88 d_L (1 + 3Oh)^{1/6} \quad (8)$$

$$Y_d = e^{-(d/\bar{d})^n} \quad (9)$$

Dado el valor \bar{d} y n , el diámetro d de las gotas inyectadas al dominio computacional en determinados intervalos de tiempo se calcula muestreando aleatoriamente la fracción de masa Y_d en la Ec. (9). En el caso estudiado el valor de n no puede ser calculado, ya que no se reportan datos experimentales sobre la dispersión del tamaño de gotas. El software sugiere un valor de 3.5 para este parámetro. Sin embargo, se observó que un valor de 4.5 se ajusta mejor a la dispersión del spray. Por otro lado, la dirección de movimiento de las gotas inyectadas también es aleatoria, con base en el ángulo del spray (58°) y un ángulo de dispersión. Zhu *et al.* [17] sugieren un ángulo de dispersión de 10° basado en sus resultados. No obstante, se empleó un ángulo de dispersión de 15° al observar que este se ajusta mejor a la longitud sobre la cual se dispersa el spray en el experimento. El número de paquetes de partículas inyectadas al dominio por intervalo de tiempo se fijó en 8000, valor a partir del cual no se observa un cambio significativo en las características medidas del spray.

Una vez que las gotas son inyectadas al dominio, con las características dadas por el modelo LISA, se simula un segundo régimen de atomización sobre las gotas. El modelo Taylor Analogy Breakup (TAB) empleado en la simulación se basa en la analogía de Taylor entre un sistema masa-resorte y una gota que presenta deformación y oscilación. Se considera que la gota se dividirá en otras de menor tamaño cuando su deformación alcance un valor crítico. Este modelo es recomendado para números de Weber de la partícula moderados. Dado que la trayectoria de las gotas se determinará considerando los valores promedio de velocidad del flujo (\tilde{u}), se debe añadir el efecto que tienen las fluctuaciones instantáneas de velocidad en la trayectoria. Para incluir dicho efecto se utiliza el modelo estadístico “random walk”, que representa la presencia de remolinos con una velocidad característica u' a lo largo de la trayectoria de la partícula. Al usar este modelo la velocidad del fluido que se considera al integrar la ecuación de la trayectoria de la partícula es: $\tilde{u} + u'(t)$. El valor de $u'(t)$ se calcula a partir de la energía turbulenta promedio y de una variable aleatoria. Las colisiones entre partículas también son consideradas y se modelan a través del algoritmo estadístico de O'Rourke. Este algoritmo considera que una

colisión entre paquetes de gotas se puede dar solo cuando dos paquetes están dentro del mismo elemento de la malla. Para determinar la probabilidad de que esto ocurra, se calcula un volumen de colisión. La probabilidad de colisión de acuerdo con el modelo O'Rourke, es la relación del volumen de colisión y el volumen del elemento de la malla. Una vez que se determinó la colisión entre dos paquetes, el resultado solo podrá ser coalición o rebote. El resultado se define en función de la posición relativa de las gotas durante el choque y una variable aleatoria. Las propiedades de las gotas después de la colisión se calculan a partir de las leyes de conservación.

2.5. Modelo de combustión

La flama turbulenta de difusión se reproduce a través del modelo estacionario y no-adiabático de flamas en contraflujo (“flamelets”), disponible en el sub-modelo de combustión no-pre-mezclada en Fluent. Este modelo fue diseñado para simular flamas de difusión turbulentas. Es un método eficiente, ya que no requiere resolver una ecuación de transporte para cada especie química, en su lugar solo añade un par de ecuaciones de transporte. El modelo asume que los coeficientes de difusión de todas las especies y el coeficiente de difusión térmica son iguales.

Durante la simulación, el software resuelve la ecuación de transporte del promedio de Favre de la fracción de mezcla (f) dada por la Ec. (10). Además, se resuelve una ecuación de transporte para la varianza de la fracción de mezcla (f'^2), Ec. (11). Dado que se simula el estado estacionario del proceso, el primer término de las Ecs. (10) y (11) es cero. Por otro lado, la disipación escalar (χ) caracteriza el estrechamiento de la flama a partir del gradiente de f , *i.e.* $\chi = 2D|\nabla f|^2$. Sin embargo, para representar las flamas con distinto grado de estrechamiento, se emplea la disipación escalar medida en la zona donde la mezcla es estequiométrica (χ_{st}). El promedio $\tilde{\chi}_{st}$ se aproxima a través de un modelo de relajación lineal de la ecuación de transporte de χ [14], de donde se obtiene la Ec. (12).

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{f}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{f}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\frac{\mu_t}{\sigma_f} \right) \nabla \tilde{f} \right] + f_s \quad (10)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{f}'^2) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{f}'^2) &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\frac{\mu_t}{\sigma_f} \right) \tilde{f}'^2 \right] \\ &+ C_g \mu_t (\nabla \tilde{f})^2 - \bar{\rho} C_d \frac{\epsilon}{\kappa} \tilde{f}'^2 \end{aligned} \quad (11)$$

$$\tilde{\chi}_{st} = C_\chi \frac{\epsilon}{\kappa} \tilde{f}'^2 \quad (12)$$

Previo a la simulación, el modelo genera tablas de consulta (cada una equivalente a una flama en contraflujo con diferente estrechamiento) que caracterizan las variables de la combustión (temperatura y fracción de masa de cada especie química considerada) en función de los valores promedio de f , χ_{st} y la entalpía (H), aunque esta última no afecta la reacción química directamente. La relación entre la temperatura (T) y la fracción de masa de la especie n (Y_n), con las variables f ,

χ_{st} y H esta dada por las Ecs. (13) y (14). Estas ecuaciones se obtienen a partir de las ecuaciones de transporte de especies químicas y energía correspondientes a una flama laminar en contraflujo, donde el sistema de coordenadas se cambia en torno a f , y el resto de variables se definen en función de f , χ_{st} y H .

$$\rho \frac{\partial Y_n}{\partial t} = \frac{1}{2} \rho \chi \frac{\partial^2 Y_n}{\partial f^2} + \omega_n \quad (13)$$

$$\rho \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{2} \rho \chi \frac{\partial^2 T}{\partial f^2} - \frac{1}{c_p} \sum_n H_n \omega_n + \frac{1}{2c_p} \rho \chi \left[\frac{\partial c_p}{\partial f} + \sum_n c_{p,n} \frac{\partial Y_n}{\partial f} \right] \frac{\partial T}{\partial f} \quad (14)$$

La información termoquímica necesaria para resolver y tabular las Ecs. (13) y (14) está contenida en el mecanismo de reacción del metanol. El mecanismo empleado en la simulación consta de 167 reacciones y 32 especies. Este mecanismo ha sido desarrollado y validado por Lindstedt *et al.* [8] y está disponible en [7]. A partir de las Ecs. (13) y (14) el software calcula el promedio ponderado entre las variables de la combustión y la función de distribución de probabilidad de f y χ_{st} . La función de la probabilidad $p(f)$ se asume con distribución beta, y se calcula a partir de los valores \tilde{f} y $\tilde{f}^{\prime 2}$. Para $p(\chi_{st})$ se considera una distribución delta, donde no es necesaria la varianza de χ_{st} . De esta forma se obtiene la relación entre las variables de la combustión y los valores de \tilde{f} , $\tilde{f}^{\prime 2}$, $\tilde{\chi}_{st}$ y \tilde{H} (calculados durante la simulación).

Al igual que en las simulaciones anteriores, la radiación que emite la flama es considerada a través del modelo de Ordenadas Discretas o DO (“Discrete Ordinates”). Este modelo discretiza el rango completo de ángulos sólidos que se presentan en el término de dispersión de la radiación en la ecuación de transferencia de radiación. A diferencia de otros modelos, como el de Rosseland, el modelo de DO abarca todo el rango de espesor óptico, de modo que resulta adecuado para simular la radiación debido a la combustión en un medio participativo. A este modelo se incorporó el efecto de las partículas en la dispersión de la radiación emitida por la flama. El factor de dispersión de las partículas de metanol se mantiene en 1, como lo sugiere el software.

2.6. Condiciones de frontera

Los resultados de la simulación son sensibles a las condiciones de entrada del modelo, por ello es importante reproducir de forma precisa las condiciones reales del experimento. De acuerdo con Zhu *et al.* [17] los perfiles de velocidad del aire, con la flama presente, medidos experimentalmente a 1.4 mm de altura de la entrada, pueden ser considerados como la condición de entrada del aire en la simulación. Dado que el flujo de entrada es circulatorio, se emplean componentes cilíndricas para describir el perfil del flujo. Para representar los perfiles de las componentes de velocidad del aire se genera una

User Defined Function (UDF) por cada componente (axial, radial y de rotación o tangencial) en función del radio. Se emplean los datos experimentales para calcular un polinomio que se aproxime a ellos, a través de un modelo de regresión lineal con mínimos cuadrados. Además del perfil de velocidad se especifican parámetros de turbulencia en la entrada. Se emplean dos parámetros uniformes, la intensidad de la turbulencia (I) y la escala de longitud característica (L). La intensidad de la turbulencia se determina a partir del valor RMS de la fluctuación de la velocidad y del promedio de la velocidad. La temperatura en las paredes de la cámara también se establece como condición inicial. El perfil de temperatura en la pared se establece a través de una UDF determinada a partir de los datos experimentales. Debido a que esta función condiciona a la pared como una superficie isotérmica, toda la radiación que incide sobre la pared será reflejada (como sucedería al alcanzar el equilibrio térmico). Los parámetros de operación del modelo experimental, empleados como condiciones de frontera, se resumen en la Tabla I. A partir de estos parámetros se calcula una proporción de masa de 23.15 partes de aire por parte de combustible en la mezcla entrante. Comparada con la proporción estequiométrica del metanol (6.47 partes de aire por parte de combustible) se trata de una mezcla pobre en combustible, con una relación de equivalencia combustible-aire (ϕ) de 0.28.

3. Presentación y discusión de los resultados

3.1. Comparación con resultados experimentales

En primer lugar, los perfiles de velocidad del flujo son comparados con los resultados experimentales (reportados a 9.5 y 17.6 mm de altura respecto al punto de inyección). En las Figs. 4, 5 y 6 se presentan los perfiles de velocidad axial, radial y tangencial, respectivamente. Es notoria la discrepancia entre los valores de velocidad de los tres componentes y los resultados experimentales en el intervalo de 0 a 15 mm del radio aproximadamente. Una diferencia similar es reportada por Zhu *et al.* [17] y Collazo *et al.* [2]. Dicha discrepancia se debe al incremento de velocidad que produce el spray sobre el medio gaseoso. El software determina este incremento calculando la suma de momento perdido por las gotas que cruzan por un elemento de la malla, posteriormente este momento es introducido como un término fuente a las ecuaciones del flujo del elemento correspondiente. Este método toma el efecto puntual de las partículas y lo “distribuye” sobre el elemento de la malla, sobreestimando la cantidad de fluido que es afectado por las gotas. Por el contrario, en la medición por PIV la velocidad medida corresponde al fluido que se encuentra entre las gotas de combustible y que no alcanza a ser afectado por su desplazamiento. De forma que en el experimento el efecto puntual de las gotas no es relevante, mientras que en la simulación se incrementa. Como se observa en la Fig. 4 la diferencia en la zona cercana al eje de la inyección es mayor

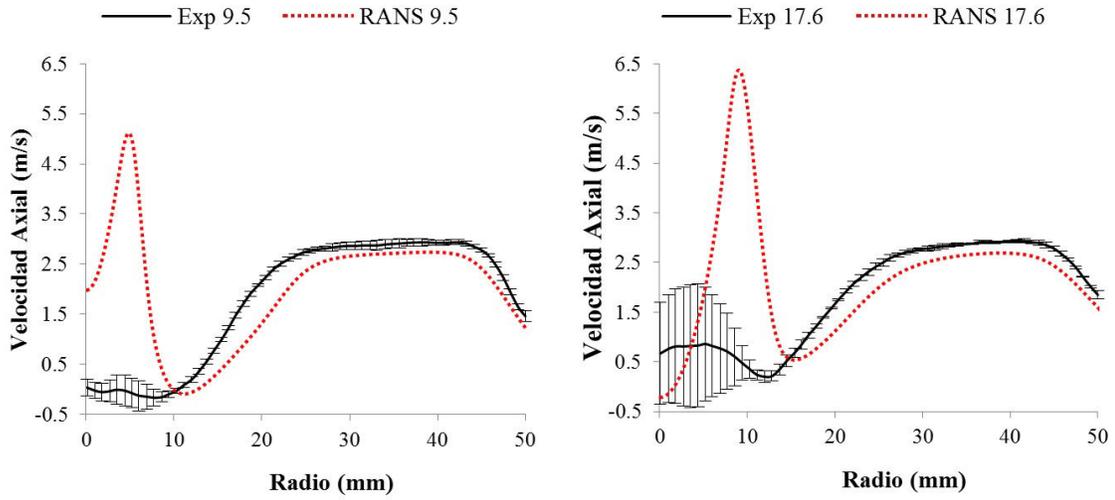


FIGURA 4. Perfil de velocidad axial a 9.5 y 17.6 mm del inyector.

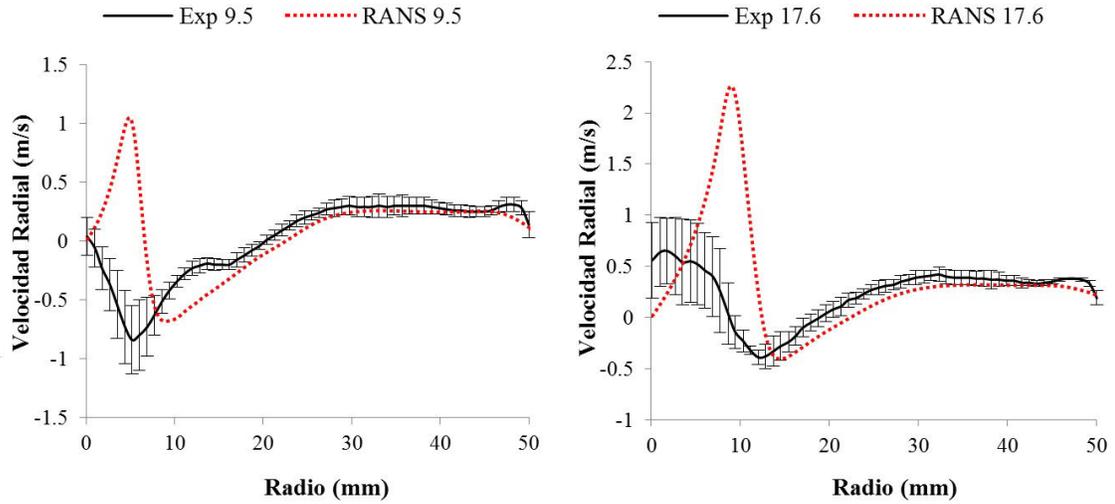


FIGURA 5. Perfil de velocidad radial a 9.5 y 17.6 mm del inyector.

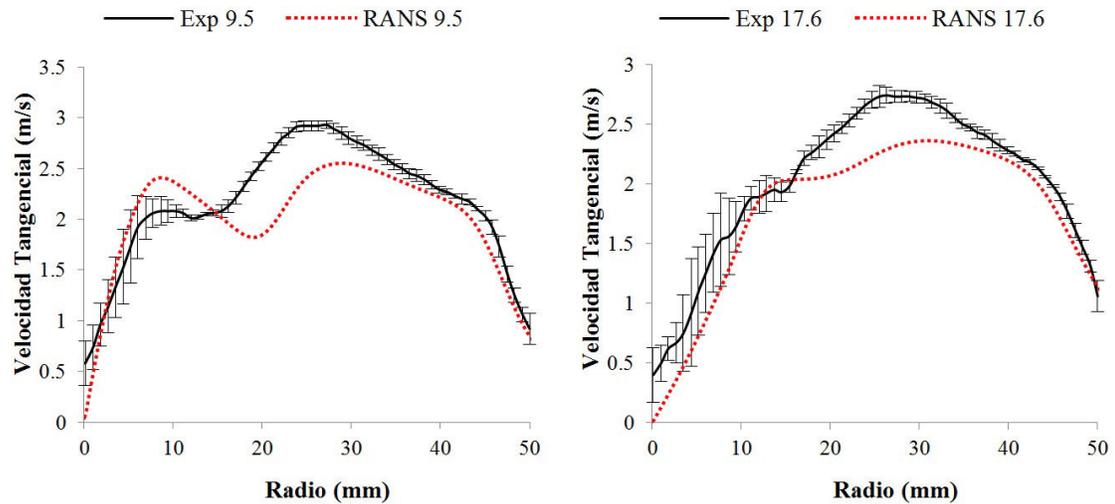


FIGURA 6. Perfil de velocidad tangencial a 9.5 y 17.6 mm del inyector.

en el perfil de velocidad axial, mayormente afectada por la velocidad del spray, mientras que el perfil de velocidad tangencial (Fig. 6) presenta la menor diferencia en esta zona.

Posterior a este intervalo de discrepancia, los resultados obtenidos de la simulación se ajustan a los resultados experimentales. El incremento de la velocidad radial en la dirección axial (Fig. 5), debido a la expansión del remolino en la cámara, es reproducido adecuadamente por la simulación. Por otra parte, el aumento en el máximo de velocidad axial en los perfiles simulados (Fig. 4) al aumentar la distancia axial con el inyector, se debe al incremento de temperatura. Considerando la incertidumbre de los datos experimentales e incluyendo la incertidumbre del perfil de velocidad a 1.4 mm del inyector a partir del cual se definió el perfil de entrada, los resultados de la velocidad dados por la simulación son aceptables.

En la Fig. 7 se comparan los resultados del número de densidad de gotas (cantidad de gotas por centímetro cúbico) a lo largo del eje radial y en diferentes planos axiales. Como se observa en esta figura, la dispersión de las gotas aumenta a lo largo del eje axial a medida que se expande el spray. El aumento en la dispersión de las gotas y su desplazamiento a lo largo del radio, a medida que avanzan en dirección axial, es captado adecuadamente por la simulación. La distancia (longitud) en la cual se distribuyen las gotas también se reproduce de forma adecuada. Sin embargo, la forma de la distribución presenta diferencias. Mientras que en el experimento la dispersión de gotas tiene la forma de una distribución normal, en la simulación la dispersión es homogénea en todo el ángulo de dispersión, presentando solo pequeños picos de concentración. Esto es debido a que el software asigna una dirección aleatoria (comprendida dentro del ángulo de dispersión) a las gotas que ingresan al dominio, por lo tanto su distribución resulta uniforme. Esta discrepancia en la distribución de gotas repercute en otras características medidas del spray, lo que se detalla a continuación.

El diámetro promedio de Sauter es una característica importante del spray cuando la interface entre las gotas y el medio es relevante, tal es el caso de la combustión. Es necesario

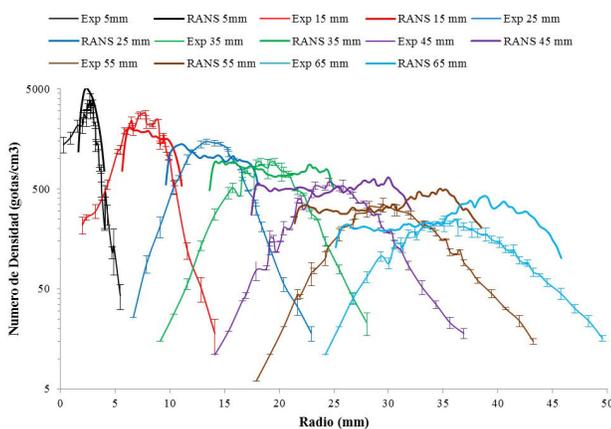


FIGURA 7. Número de densidad de gotas.

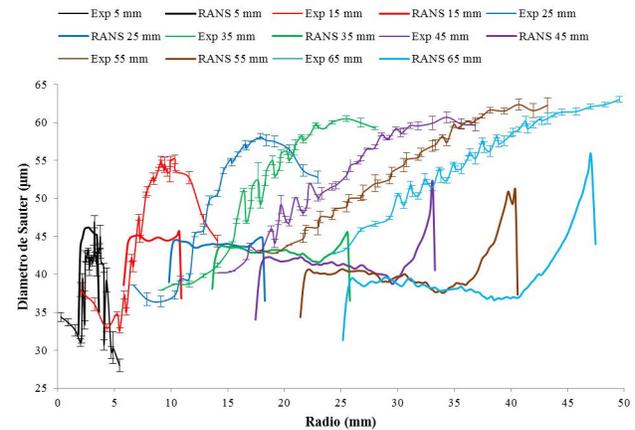


FIGURA 8. Diámetro de Sauter.

esta característica adecuadamente para lograr que el comportamiento del spray y la flama sea similar al experimento. En la Fig. 8 se observa que en general el diámetro de Sauter es subestimado en la simulación. Lo anterior indica que la superficie total de las gotas ha sido sobreestimada, sugiriendo que en general el diámetro de las gotas calculado es menor que el experimental. En la Fig. 8 también se observa que la evolución del diámetro de Sauter difiere respecto al experimento. De acuerdo a los resultados experimentales, el diámetro de Sauter aumenta en la dirección axial y radial. Este aumento en la dirección axial puede explicarse considerando que las gotas de menor tamaño se evaporan con mayor velocidad, por lo que las gotas más grandes predominan al aumentar la distancia axial. En contraste, en la simulación este efecto solo es apreciable en la zona externa del spray (zona a mayor distancia del eje axial) donde los picos de máximo diámetro aumentan en dirección axial, mientras que el diámetro de Sauter del resto de las gotas disminuye. Lo anterior indica que las gotas de menor tamaño predominan sobre las de mayor diámetro. Esto sugiere que la velocidad a la que se evaporan las gotas, especialmente las más grandes, es sobreestimado en la simulación. Por otro lado, el aumento del diámetro de Sauter en dirección radial, reportado por el experimento, se debe a la distancia de las gotas respecto a la flama. Mientras más cercanas se encuentran las gotas a la flama, su evaporación es mayor y su diámetro disminuye a mayor velocidad, de forma que el diámetro de las gotas presenta una pendiente positiva en dirección radial. Aunque esta pendiente no es captada adecuadamente en la simulación, en la zona externa del spray se presenta un máximo del diámetro que es congruente con su distancia respecto a la flama, además en esta zona las gotas tienen contacto con el aire que entra a menor temperatura (lo que reduce su evaporación). Dado que las gotas más grandes tienen mayor inercia alcanzan una mayor distancia radial, lo que también contribuye a su concentración en la zona externa del spray. En los resultados de la simulación de la Fig. 8 se observa la formación de un valle en la zona media del spray conforme se incrementa la distancia axial. Este valle indica una mayor concentración de gotas de menor diámetro en el centro del spray. Lo anterior posiblemente se debe al mayor

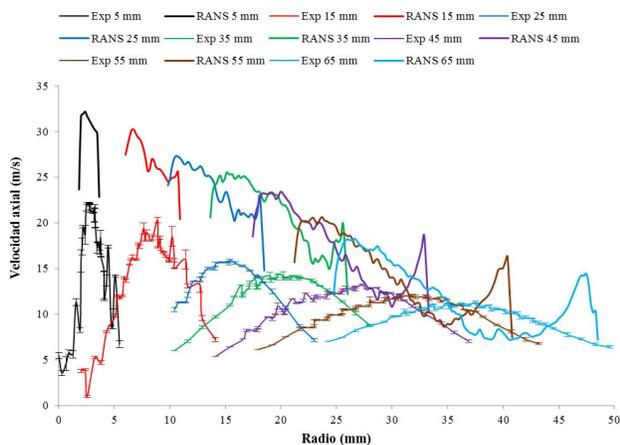


FIGURA 9. Velocidad axial de las gotas.

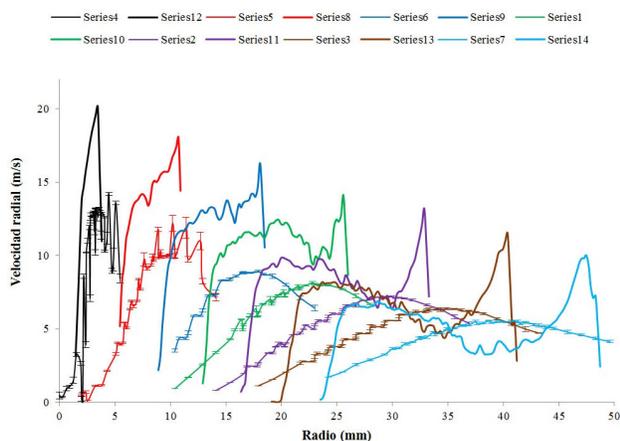


FIGURA 10. Velocidad radial de las gotas.

tiempo de residencia de estas gotas debido a su menor velocidad. Dada la diferencia en la distribución de gotas este efecto no se presenta en el experimento, donde la mayor cantidad de gotas se mantiene en el centro del spray (incluyendo las gotas de mayor tamaño).

En las Figs. 9 y 10 se grafica la velocidad axial y radial de las gotas respectivamente. En estas figuras se observa que ambos componentes de velocidad de las gotas son sobreestimados. No obstante, la evolución general de los perfiles de velocidad en dirección axial es captada por la simulación. Debido al ángulo del spray el componente de velocidad axial (Fig. 9) es mayor para las gotas más cercanas al eje axial y la velocidad radial (Fig. 10) es mayor en la zona externa del spray. En ambos casos se observa que la velocidad de las gotas en los extremos del spray disminuye a menor ritmo que la velocidad de las gotas en la zona central. En el caso de la zona externa del spray, las gotas pierden menor velocidad debido a su contacto con el flujo de aire de entrada que reduce el arrastre de las partículas. Por otro lado, las gotas cercanas al eje axial pierden menor velocidad debido al incremento de temperatura en esta zona. Dicho aumento de temperatura reduce la densidad del aire, que a su vez reduce el arrastre que experimentan las gotas. Ambos perfiles de velocidad (axial

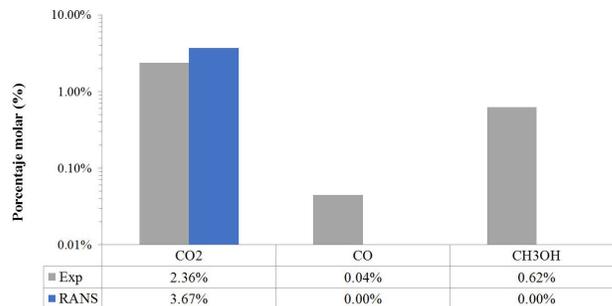


FIGURA 11. Composición del gas de escape.

y radial) difieren en su forma con los obtenidos en el experimento. Esto se debe a que, en el caso del experimento, la cantidad de gotas en los extremos del spray es mucho menor que las gotas en el centro del mismo. Por lo tanto, en el experimento, los efectos mencionados que se presentan en los extremos del spray no tienen un impacto significativo en la velocidad de las gotas.

De acuerdo con los datos experimentales, aproximadamente el 80 % del metanol que ingresa a la cámara se quema, el 20 % restante sale de la cámara reportada en forma de vapor [16]. Esto se debe a que algunas gotas (las de mayor tamaño) atraviesan la zona de reacción y se evaporan en una zona distante de la flama. Por lo tanto, aun cuando se evaporan y mezclan con el oxígeno, no alcanzan la temperatura de activación necesaria. Reproducir esta característica representa la mayor debilidad del modelo de combustión empleado, ya que se asume que la reacción química sucederá tan pronto ocurra el mezclado, sin que la temperatura afecte las especies producidas en la reacción (la reacción es función únicamente de f y χ_{st}). En la Fig. 11 se compara la composición del gas a la salida de la cámara, experimentalmente y en la simulación. En el experimento [16] la composición del gas es medida en diferentes puntos del área de salida. Sin embargo, debido a que en la simulación el modelo es simétrico y 2D, lo que se compara en la Fig. 11 es el promedio de los valores reportados en el experimento y el valor promedio obtenido en la simulación. Como se observa en esta figura, y de acuerdo a lo señalado, el modelo predice que la combustión es prácticamente completa, lo que se refleja en la fracción molar de CO₂ sobreestimada (0.0367), mientras que la fracción de CO (5.7×10^{-8}) y CH₃OH (1×10^{-27}) se subestima.

3.2. Propiedades del flujo

En la Fig. 12 se muestra el perfil de temperatura dentro de la cámara de combustión, donde se observa la forma de vela de la flama, que es congruente con la forma cónica del spray y similar a los resultados de las simulaciones anteriores [10-12]. La máxima temperatura alcanzada, de acuerdo a la simulación, es de aproximadamente 1880 K. No se reportan datos experimentales sobre la temperatura dentro de la cámara, sin embargo el resultado es similar a las simulaciones anteriores, donde Zhu *et al.* [17] reportan una temperatura máxima de 1850 K, Collazo *et al.* [2] de 2100 K y Crocker *et al.* [3] de

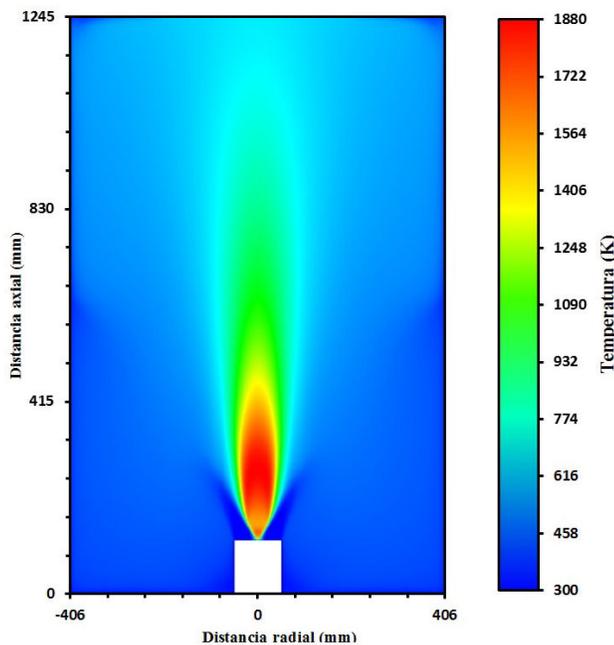


FIGURA 12. Contornos de temperatura (K).

1900 K. La temperatura promedio a la salida de la cámara es de 708 K. Dado que se modificó la salida de la cámara no es posible comparar directamente este resultado con el experimento. Sin embargo, y de acuerdo con lo señalado por Zhu *et al.* [17], si se considera que la temperatura de salida promedio reportada en el experimento es de 550 K, ubicándose la salida en un punto más alejado que en la simulación, entonces la temperatura dada por la simulación es congruente.

Los vectores de velocidad se presentan en la Fig. 13, donde se observan tres pequeñas zonas con recirculación de baja intensidad. Esta recirculación se debe al gradiente de presión entre el flujo de aire de entrada y el flujo de combustible. El flujo de combustible, de mayor velocidad que el flujo entrante de aire, produce una disminución de la presión estática, lo que atrae parte del flujo de aire de entrada. Las pequeñas zonas de recirculación laterales son congruentes con el perfil de velocidad axial reportado experimentalmente. Por otro lado,

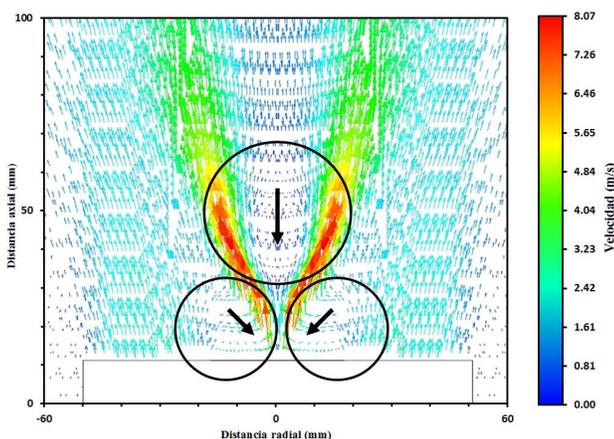
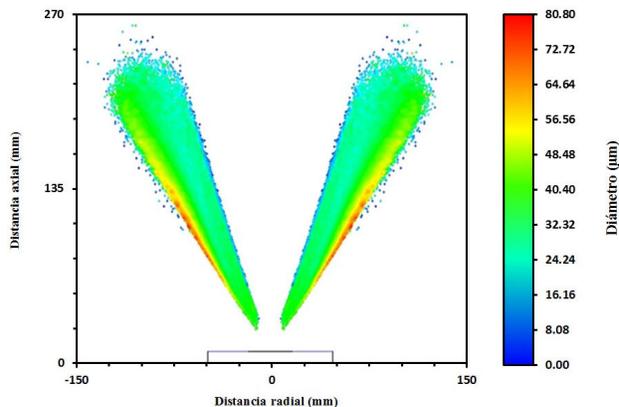


FIGURA 13. Vectores de velocidad del flujo (m/s).

FIGURA 14. Diámetro de las gotas del spray (μm).

no se presenta la ruptura de vórtice esperada, ya que no se observa una abrupta pérdida de la estructura del remolino o una zona de recirculación de mayor tamaño.

En la Fig. 14 se muestra la distribución y propiedades de las partículas de combustible (paquetes de gotas) que se encuentran en el dominio computacional durante la última iteración de la simulación. En esta figura se muestra la distribución del tamaño de gotas, donde se puede observar que en el interior del cono las gotas son más chicas (debido a la cercanía con la flama). Esto es congruente con la distribución del diámetro de Sauter analizado anteriormente. Todas las partículas se evaporan completamente y no se reportan trayectorias incompletas (partículas que escapan del dominio o chocan contra las paredes del mismo). Al comparar la distribución las gotas con el perfil de temperatura se observa que algunas gotas atraviesan la zona de alta temperatura, lo que es congruente con el porcentaje de metanol no quemado reportado experimentalmente (pese a que en la simulación se asume que este vapor también reacciona). La distancia de máxima al punto de inyección alcanzada por el spray es de aproximadamente 297 mm.

4. Conclusiones

En el presente trabajo se simuló el proceso de combustión turbulenta de spray del modelo experimental de cámara de combustión desarrollado por el NIST. Los datos experimentales y parámetros de operación han sido reportados en otros trabajos, al igual que en simulaciones previas. En esta simulación se empleó un modelo RANS para tratar la turbulencia del flujo. El modelo de combustión empleado es el modelo de *flamelets*, que demanda pocos recursos computacionales, considerando que la reacción es rápida comparada con los procesos turbulentos del flujo. Para simular el spray fue empleado el modelo LISA, considerando el ángulo del spray de 58° y un ángulo de dispersión de 15° , además de otros modelos para incluir las colisiones entre gotas y la dispersión turbulenta de las mismas. Los resultados de la simulación RANS son comparados con los datos experimentales y se encontró similitud en algunos aspectos de los mismos. Los

perfiles de velocidad del flujo son reproducidos adecuadamente por el modelo de turbulencia κ - ϵ . La distribución de gotas a lo largo del ángulo de dispersión es uniforme en la simulación, en contraste con la distribución experimental. Esto conlleva diferencias en la evolución del tamaño de las gotas y su velocidad. Los datos sugieren que el tamaño de gotas en general es menor que el tamaño de gotas del spray real. Posiblemente la evaporación de las gotas, especialmente las de mayor tamaño, es sobreestimada. De acuerdo a los resultados de la velocidad del flujo, no se presenta la ruptura de vórtice típica de los flujos con remolino. El modelo de combustión empleado no predice adecuadamente la emisión de CO y combustible no quemado, dado que considera una velocidad infinita de reacción que solo depende de la fracción de mezcla. Debido a esto, incluso las gotas que se evaporan fuera de la zona de flama se queman.

Nomenclatura

Parámetro	Nombre
η_b	Amplitud de onda crítica
η_0	Amplitud de onda inicial
C_L	Constante del ligamento
$C_{1\epsilon}, C_{2\epsilon}$	Constante del modelo $\kappa - \epsilon$
C_g, C_g	Constantes del modelo de combustión
d_0	Diámetro de gotas
d_L	Diámetro de ligamento
\bar{d}	Diámetro medio de gotas
χ	Disipación escalar
χ_{st}	Disipación escalar estequiométrica
ϵ	Disipación turbulenta
L_b	Distancia de atomización
κ	Energía cinética turbulenta
H	Entalpia
Y	Fracción de masa
f	Fracción de mezcla
t_s	Grosor de película de combustible inicial
h_f	Grosor de película de combustible en la zona de atomización
Da	Número de Damköhler
k_s	Número de longitud de onda
Oh	Número de Ohnesorge
σ	Número de Prandtl
n	Parámetro de dispersión de gotas
P_k	Producción de energía turbulenta
ϕ	Relación de equivalencia
τ_{ij}	Tensor de esfuerzos cortantes
m_s, F_s, f_s	Término fuente de masa, momento y fracción de mezcla
τ_t	Tiempo de la fluctuación turbulenta
τ_c	Tiempo de la reacción química

Parámetro	Nombre
$\widetilde{f}r^2$	Varianza de la fracción de mezcla
U_s	Velocidad de película de combustible
ω	Velocidad de reacción
Ω	Velocidad máxima de crecimiento de la perturbación
μ_t	Viscosidad turbulenta

Agradecimientos

Agradezco al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACyT) por el apoyo económico brindado durante este periodo de estudios. Asimismo agradezco al Instituto Politécnico Nacional (IPN) Unidad Ticomán por la disponibilidad del recurso computacional requerido en este trabajo.

1. Benchmark spray combustion database.
2. Collazo, J., Porteiro, J., Patiño, D., Míguez, J., Granda, E., and Moran, J., *Simulation and experimental validation of amethanol burner*
3. Crocker, D. S., Girdharan, M., Widmann, J. F., and Presser, C., *Fire and Computational Modeling of Industrial Combustion Systems* **23** (2000) 95-102.
4. Dombrowski, N., and Hooper, P. C. *Chemical Engineering Science* **4** (1962) 291-305.
5. Lee, E. J., Oh, S. Y., Kim, H. Y., James, S. C., and Yoon, S. S. *Experimental Thermal and Fluid Science* **8** (2010) 1475-1483.
6. Lefebvre, A. H., and Ballal, D. R. *Gas turbine combustion alternative fuels and emissions*, 3 ed. (2010).
7. Lindstedt, P., and Chen, J.-Y. *International workshop on measurement and computation of turbulent nonpremixed flames*, (2002).
8. Lindstedt, R. P., and Louloudi, S. A., *Proceedings of the Combustion Institute* **2** (2002) 2147-2154.
9. Magnuseen, B. F. *International Flame Research Foundation* (1989).
10. Magnussen, B. F. *19th American Institute of Aeronautics and Astronautics Aerospace Science Meeting* (1981).
11. Peters, N. *Laminar flamelet concepts in turbulent combustion*, 1986.
12. Pope, S. B. *Turbulent flows*. Cambridge University Press, (2000).
13. Schmidt, D. P., *Pressure-swirl atomization in the near field*, (1999).
14. Veynante, D., and Vervisch, L. *Turbulent combustion modeling. Progress in Energy and Combustion Science* **28** (2002) 193-266.
15. Warnatz, J., Maas, U., and Dibble, R. W. *Combustion, physical and chemical fundamentals, modeling and simulation, experiments, pollutant formation*, 4 ed. (2006).
16. Widmann, J. F., and Presser, C. A. *Combustion and Flame* **129** (2002) 47-86.
17. Zhou, L., Li, K., and Wang, F. *Chinese Journal of Chemical Engineering*, **2** (2012) 205-211.
18. Zhou, L. X., Wang, F., Hu, L. Y., Li, K., and Luo, K. *International Journal of Heat and Mass Transfer* **96** (2016) 154-163.
19. Zhu, S., Roekaerts, D., and Meer, T. v. d. *Numerical study of a methanol spray*