



**Universidad
Zaragoza**

Trabajo Fin de Grado

Desarrollo de un método Galerkin discontinuo para la simulación numérica detallada de evaporación de gotas

Development of a discontinuous Galerkin method for detailed numerical simulation of droplet evaporation

Autor

Daniel Betrán Hernando

Directores

Manuel Colera Rico
Álvaro Muelas Expósito

Ponente

Javier Ballester Castañer

Titulación del autor

Grado en Ingeniería Mecánica

Escuela de Ingeniería y Arquitectura
2024

Agradecimientos

En primer lugar, me gustaría dar las gracias a Álvaro Muelas y Manuel Colera por transmitirme todos los conocimientos necesarios para realizar este trabajo. Especialmente me gustaría agradecerles el trato excepcional y el apoyo constante que he recibido de su parte desde el primer día. Por otro lado, me gustaría agradecer a Javier Ballester el haberme dado la oportunidad de trabajar junto a Álvaro y a Manuel.

En segundo lugar, me gustaría expresar mi profundo agradecimiento a mi familia, especialmente a mis padres, por su apoyo incondicional durante todos estos años. Sin ellos, no sería la persona que soy ahora. También querría agradecer a aquellos amigos que he hecho durante este grado por llenar de positividad los momentos más difíciles.

Por último, agradecer a todos los miembros del LIFEn por la cálida acogida y el excelente trato que he recibido durante estos meses que he podido trabajar junto a ellos.

Resumen

Los combustibles líquidos, debido a sus características, han sido y son imprescindibles en la sociedad. En la mayoría de aplicaciones, estos combustibles son inyectados en cámaras de combustión en forma de un spray, el cual está formado por una gran cantidad de gotas de pequeño tamaño. Al entrar en un ambiente de alta temperatura, estas gotas incrementan su temperatura y se evaporan, siendo el vapor de estas el que, tras mezclarse con el gas circundante, experimenta reacciones de combustión. A la hora de estudiar detalladamente este complejo proceso se hace necesario el uso de herramientas numéricas que permitan modelar los procesos de transferencia de masa y energía entre la fase líquida y gas de una gota aislada. El objetivo principal de este Trabajo Fin de Grado es precisamente el desarrollo de un modelo numérico que permita simular detalladamente el proceso de evaporación de una gota.

Para el desarrollo de este modelo se ha hecho uso del método de discretización espacial conocido como Galerkin discontinuo (DG), el cual permite emplear funciones de aproximación de orden elevado, con una notable mejora la precisión de las soluciones. La discretización temporal ha sido realizada mediante el uso de un novedoso método conocido como EIN–RK (Explicit–Implicit–Null Runge–Kutta), este permite obtener resultados con una gran eficiencia y estabilidad.

Se ha desarrollado un modelo numérico para la simulación de una gota monocomponente evaporando en un ambiente multicomponente, suponiendo que las propiedades tanto del líquido como del gas se mantienen constantes. El modelo ha sido validado de forma detallada, dando resultados satisfactorios en todas las validaciones planteadas. Se considera que este modelo numérico puede servir de base para futuras ampliaciones, así como para estudios de investigación relacionados con diversos fenómenos que tienen lugar en la evaporación y combustión de gotas en condiciones de alta temperatura.

Abstract

Liquid fuels, due to their characteristics, have been and continue to be essential in society. In most applications, these fuels are injected into combustion chambers in the form of a spray, which consists of a large number of small droplets. Upon entering a high-temperature environment, these droplets increase their temperature and evaporate, with the fuel vapor subsequently mixing with the surrounding gas and undergoing combustion reactions. A detailed study of this complex process requires the use of numerical tools that can model mass and energy transfer processes between the liquid and gas phases for an isolated droplet. The main objective of this final-year project is precisely the development of a numerical model capable of simulating in detail the evaporation process of a droplet.

For the development of this model, the discontinuous Galerkin (DG) spatial discretization method has been employed, which allows the use of high-order approximation functions, significantly improving the accuracy of the solution. Temporal discretization has been achieved using a novel method known as EIN-RK (Explicit–Implicit–Null Runge–Kutta), which ensures efficient and stable results.

A numerical model has been developed for simulating a single-component droplet evaporating in a multi-component environment, assuming constant properties in both the liquid and gas phases. The model has been thoroughly validated, yielding satisfactory results across all validation tests. It is believed that this numerical model can serve as a foundation for future extensions and for research studies related to various phenomena occurring in the evaporation and combustion of droplets under high-temperature conditions.

Tabla de contenidos

1	Introducción.	1
1.1	Motivación y contexto.	1
1.2	Estado del arte	2
1.3	Objetivos	3
2	Evaporación de gotas: Mecanismos físicos y formulación matemática.	5
2.1	Descripción del problema.	5
2.2	Hipótesis del modelo.	6
2.3	Formulación matemática del problema.	7
2.4	Evaluación de propiedades.	9
2.5	Condiciones de contorno.	9
2.6	Condiciones iniciales.	11
3	Resolución numérica de las ecuaciones.	13
3.1	Discretización espacial mediante el método de DG-ALE.	13
3.1.1	Introducción al método DG-ALE.	13
3.1.2	Cálculo de los flujos entre elementos y condiciones de contorno.	15
3.1.3	Condiciones de acoplamiento en la superficie de la gota.	16
3.2	Discretización temporal. El método de EIN-RK.	17
4	Resultados y validación.	21
4.1	Validación de los métodos de discretización.	21
4.2	Validación de las condiciones de acoplamiento.	23
4.3	Determinación del $\eta_{\text{máx}}$ y el número de elementos M	25
4.4	Validación del modelo con un modelo analítico.	27
5	Conclusiones y trabajo futuro.	29
5.1	Conclusiones.	29
5.2	Trabajo futuro.	30
	Bibliografía	31
	Anexos	32
A	Condiciones iniciales.	35

Capítulo 1

Introducción.

1.1. Motivación y contexto.

Los combustibles líquidos desempeñan un papel fundamental en la sociedad actual debido a su fácil manejo y almacenamiento, además de su alta densidad energética. Combustibles como la gasolina, el diésel y el queroseno son fundamentales para el sector del transporte. Del mismo modo, una gran variedad de combustibles líquidos (muchos de ellos alternativos: bio-combustibles, líquidos obtenidos del tratamiento termoquímico de residuos, etc.) son utilizados tanto en transporte como en la generación de calor y energía en la industria: bio-querosenos, nuevos tipos de bio-diésel, bio-alcoholes, aceites de pirólisis de residuos, etc. Muchos de estos combustibles alternativos son de reciente desarrollo, por lo que conocer en detalle sus características de evaporación y combustión se convierte en una pieza fundamental para su adecuada introducción al sistema energético.

Con el fin de obtener energía aprovechable, cualquier combustible líquido debe ser introducido en una cámara de combustión, donde se evaporará, siendo los vapores generados los que experimenten reacciones de combustión en fase gas tras mezclarse con el aire circundante. Para lograr una completa conversión del combustible se debe atomizar el líquido, formando un spray compuesto por un grupo de gotas de tamaño muy reducido, aumentando así la superficie de contacto entre el combustible y el gas. Cuando las gotas que conforman el spray son introducidas en la cámara de combustión, se encuentran con condiciones de alta temperatura, lo que inicialmente provoca su calentamiento. Simultáneamente, ocurre una transferencia de masa desde la gota hacia el ambiente circundante, como resultado del cambio de fase del líquido. La distribución espacial del vapor combustible y su posterior mezcla con el aire dependen en gran medida del proceso de evaporación, por lo que éste resulta determinante en parámetros clave como el rendimiento de la combustión o las emisiones de inquemados y contaminantes (ver Fig. 1.1).

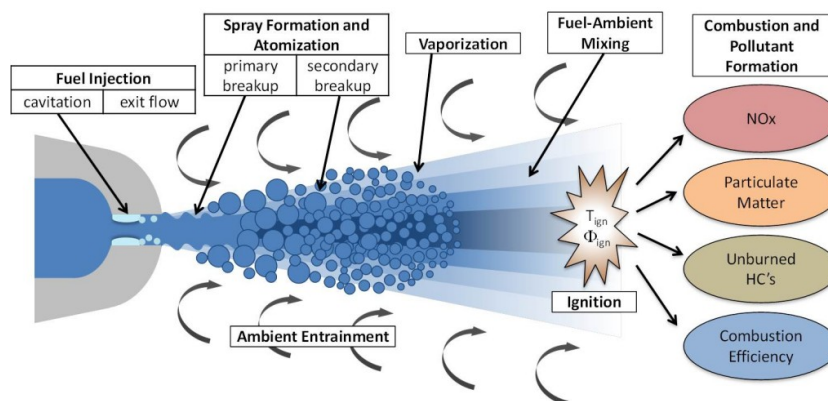


Figura 1.1: Representación del proceso de formación, evaporación y combustión del spray de combustible líquido. Imagen extraída de [1].

Por tanto, se hace necesario investigar detalladamente estos procesos de transferencia de masa y energía con el objetivo final de comprender y optimizar el proceso de evaporación de las gotas que conforman el spray. Este conocimiento podría contribuir significativamente a asegurar la viabilidad de

nuevos combustibles alternativos y reducir emisiones de contaminantes (materia particulada, hidrocarburos inquemados, CO, NOx, etc.) en los procesos de combustión. Por otro lado, la optimización del proceso de evaporación en cámaras de combustión redundaría en mejoras competitivas para diversas industrias, que deben cumplir con normativas ambientales cada vez más estrictas.

Para analizar con el detalle necesario los procesos que tienen lugar en la combustión, es necesario contar con herramientas numéricas que permitan modelar los procesos de transferencia de masa y energía entre la fase líquida y gas con la mayor fidelidad posible. En la combustión de sprays intervienen una serie de procesos físicos de enorme complejidad, a los que además de los propios de llamas turbulentas, debe añadirse el proceso de evaporación de gotas en condiciones de muy alta temperatura. La aproximación usual consiste en tratar de manera detallada el problema de evaporación de gotas aisladas, desarrollando submodelos que posteriormente se utilizan en el modelado del proceso completo, para el conjunto del spray. El presente trabajo está enfocado, precisamente, al desarrollo y validación de un modelo numérico de evaporación de gotas en condiciones representativas de llamas reales.

Este tipo de modelos numéricos resultan de gran utilidad para estudiar el comportamiento de las gotas en condiciones extremas, ya que replicar estas condiciones en un laboratorio resulta muy costoso. Por otro lado, estos modelos permiten evaluar detalladamente la influencia de ciertas variables, como la temperatura o el tamaño de la gota, en el fenómeno de evaporación. Conocer el papel que juegan estas variables resulta de gran utilidad para la elección y planificación de experimentos futuros. Por este motivo, los modelos numéricos también son un valioso complemento para la experimentación, a la hora de seleccionar las condiciones de mayor interés o de extrapolar los resultados a situaciones fuera del alcance de las posibilidades experimentales.

1.2. Estado del arte

Los modelos numéricos desarrollados para el estudio del proceso de evaporación de gotas habitualmente se basan en métodos bien establecidos, como elementos finitos [2], volúmenes finitos [3] y diferencias finitas [4]. Los primeros consisten en dividir el dominio en pequeños elementos y resolver las ecuaciones que describen el problema en estos elementos utilizando funciones de aproximación. Por otro lado, el método de volúmenes finitos utiliza volúmenes de control, en los cuales se aplican las leyes de conservación. Por último, los métodos de diferencias finitas consisten en aproximar las derivadas en las ecuaciones diferenciales mediante diferencias entre valores en puntos de una malla. Cada uno de estos métodos presenta ventajas e inconvenientes, en función del caso de aplicación [5].

En este trabajo se ha utilizado el método conocido como Galerkin Discontinuo (DG), el cual es un tipo específico de método de elementos finitos que incorpora algunas de las ventajas de los métodos de volúmenes finitos. Este método permite utilizar mallas no estructuradas en dominios con forma arbitraria, siendo además es un método conservativo. Adicionalmente, permite alcanzar una alta precisión mediante el uso de polinomios de alto orden dentro de los elementos. Gracias a estas y otras características, el método Galerkin Discontinuo ha ganado popularidad en el campo de la dinámica de fluidos computacional (CFD) [6].

Para realizar la discretización temporal en estos modelos numéricos, es común utilizar métodos explícitos o implícitos, como puede ser el método Runge–Kutta de orden 4 (RK4) [7] o el método de Euler implícito [4]. Los métodos explícitos necesitan pasos temporales muy pequeños para ser estables, lo que incrementa el coste computacional. Por otro lado, los métodos implícitos necesitan resolver sistemas de ecuaciones no lineales, lo cual dificulta su implementación, además de incrementar el coste computacional. Debido a estas limitaciones, en los últimos años ha habido un aumento en el uso de los métodos IMEX (Implicit–Explicit) [8] y se han desarrollado nuevos métodos como los EIN-RK (Explicit–Implicit–Null Runge–Kutta) [9], los cuales permiten obtener una mayor eficiencia.

1.3. Objetivos

El objetivo principal de este trabajo es desarrollar y validar un método Galerkin Discontinuo (DG) para simular numéricamente el proceso de evaporación de gotas en condiciones representativas de cámaras de combustión, pieza fundamental en el modelado de la combustión de líquidos en forma de sprays. Se ha seleccionado este método debido a su capacidad para emplear funciones de aproximación de orden elevado, lo cual mejora la precisión de las soluciones. Además, al igual que los métodos de volúmenes finitos, el método DG conserva localmente cantidades físicas como la masa y la energía, asegurando una representación precisa de los fenómenos físicos involucrados en la evaporación y combustión de las gotas.

Para la discretización temporal, se ha elegido implementar el método EIN-RK. Este método, de utilidad para ecuaciones diferenciales "rígidas" como el presente caso, se basa en descomponer la ecuación en una componente no lineal y no rígida, que es integrada explícitamente, más una componente lineal y rígida, que se integra de forma implícita. De esta forma, se dispone de un algoritmo muy estable y eficiente que sólo requiere resolver sistemas lineales en cada paso de tiempo.

El principal propósito del modelo desarrollado es la comparación con datos experimentales obtenidos en las instalaciones del Laboratorio de Ingeniería de Fluidos y Energía (LIFEn), centro donde se ha realizado el presente Trabajo Fin de Grado (TFG). Este modelo proporcionará una herramienta muy útil para complementar los resultados experimentales, aportando una descripción detallada del proceso y de las principales variables, totalmente fuera del alcance de los métodos experimentales en el estado del arte actual. El modelo desarrollado en este trabajo se ha diseñado para que sirva como una base sólida para futuras ampliaciones que permitirán el estudio de otros fenómenos que ocurren durante la evaporación y combustión de gotas.

Los objetivos específicos que se han marcado para este TFG son los siguientes:

- Implementar el método Galerkin Discontinuo y el método EIN-RK en un problema de convección-difusión monofásico.
- Validar la implementación de estos métodos.
- Implementar las condiciones de acoplamiento para un problema multifásico.
- Validar la implementación de las condiciones de acoplamiento.
- Validar el modelo en su conjunto.

Capítulo 2

Evaporación de gotas: Mecanismos físicos y formulación matemática.

2.1. Descripción del problema.

En primer lugar, se va a realizar una breve descripción del problema de la evaporación de gotas, introduciendo los principales fenómenos físicos y variables que intervienen (ver Figura 2.1). Cuando una gota de combustible de radio a es introducida en una cámara de combustión, se encuentra con un ambiente de alta temperatura. La diferencia de temperaturas entre el gas y la gota produce un flujo de energía (\dot{q}), que inicialmente se invierte principalmente en aumentar la temperatura (T) del líquido. Como consecuencia, se desplaza la condición de equilibrio líquido-vapor en la superficie de la gota, resultando en la generación de vapor combustible que pasa a la fase gas, cuantificada en términos del flujo másico (\dot{m}) de combustible que sale de la gota. El vapor generado es transportado radialmente debido a dos efectos distintos: difusión molecular (ley de Fick) y el flujo convectivo debido a la masa de vapor saliente (flujo de Stefan). Como resultado, se genera un perfil de fracción másica de vapor combustible, ($Y_{g,1}$), como se indica en la Figura 2.1. Análogamente, la temperatura en el gas también varía radialmente debido a estos efectos: transporte molecular (ley de Fourier) y flujo convectivo (flujo de Stefan, en este caso de sentido opuesto al transporte molecular). La evolución de las variables en el líquido y en el gas vienen determinados, por tanto, por los flujos de masa y energía que tienen lugar en la interfase (\dot{m} y \dot{q} , respectivamente), que a su vez constituyen las condiciones de acoplamiento entre los dos medios.

La herramienta numérica desarrollada en este trabajo debe, por tanto, describir con un alto grado de fidelidad estos procesos de difusión y convección de energía y especies, en función de las condiciones del problema (definidas por las propiedades físico-químicas del combustible, el tamaño de la gota y las condiciones del ambiente que rodea a la gota).

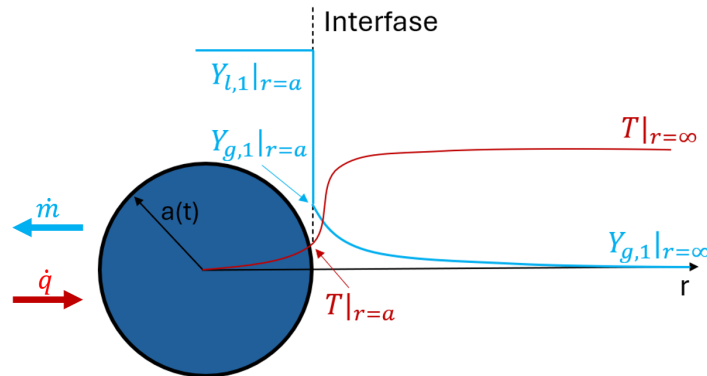


Figura 2.1: Esquema del proceso de evaporación de una gota en condiciones de simetría esférica.

2.2. Hipótesis del modelo.

Para desarrollar este modelo, se han formulado una serie de hipótesis que permiten simplificar el problema estudiado. Estas suposiciones son esenciales para simplificar el análisis y facilitar el desarrollo del modelo y, al mismo tiempo, son perfectamente válidas para la mayor parte de las situaciones de interés en problemas de evaporación y combustión de sprays.

- Hipótesis de gas ideal.
- Hipótesis de equilibrio líquido-vapor en la interfase.
- No se considera el calentamiento por radiación, ni los efectos Soret ni Dufour.
- Gota aislada en medio infinito, sin velocidad relativa gota-gas.
- Ausencia de fenómenos de condensación.
- Gota monocomponente y gas multicomponente.
- Propiedades en ambas fases constantes.

En estas condiciones, el problema de la evaporación de gotas se puede considerar unidimensional debido a su simetría esférica. Esta simetría existe porque el problema se estudia en condiciones de número de Reynolds del flujo alrededor de la gota muy bajo, como ocurre en casos de gotas de muy pequeño diámetro y/o muy baja velocidad relativa. Si se cumple esta condición, se puede considerar que las gotas son esferas perfectas (Fig. 2.2), y que sus perfiles de temperatura y composición son unidimensionales.

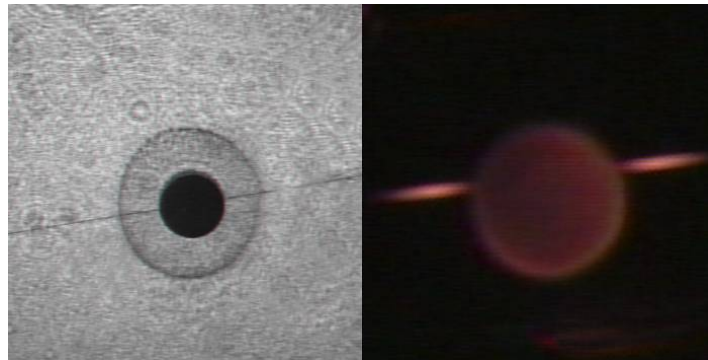


Figura 2.2: Gota de etanol puro rodeada de cáscara de hollín y su llama de difusión en condiciones de microgravedad. Imagen extraída de [10];

La esfericidad de la gota se debe en gran medida a la tensión superficial del líquido, que es una característica de los líquidos la cual se manifiesta como una fuerza que actúa sobre las moléculas que se encuentran en la superficie, lo que provoca que el líquido tienda a tener la mínima superficie posible. Dicha fuerza es el resultado de la atracción entre las moléculas del líquido. Las moléculas situadas en el interior del líquido son atraídas por todas las moléculas circundantes, lo que resulta en una fuerza neta nula. Sin embargo, las moléculas que se encuentran en la superficie del líquido solo son atraídas por las partículas situadas en el interior del líquido y por las demás partículas presentes en la superficie, ya que la fuerza ejercida por las moléculas del gas que rodea al líquido se puede considerar despreciable. Es decir, las partículas que se encuentran en la superficie experimentan una fuerza neta dirigida hacia el interior del líquido, tal y como se muestra en la Fig. 2.3. Esta fuerza neta no nula es la que provoca

que el área de la superficie tenga tendencia a ser la mínima posible. Por ello, una masa de líquido dada que no está sometida a ninguna fuerza externa, adquirirá la forma de una esfera.

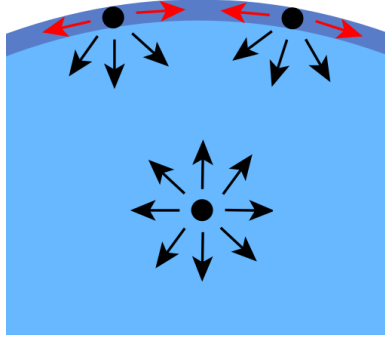


Figura 2.3: Representación esquemática de las fuerzas entre las moléculas del líquido según su posición.

En cuanto a la fase gas, el parámetro que determina su cercanía o lejanía con respecto a condiciones de simetría esférica es el número de Péclet:

$$Pe = \frac{Ua}{D_T}, \quad (2.1)$$

donde a es el radio de la gota, U la velocidad relativa entre la gota y el gas circundante y D_T la difusividad térmica. A partir de la abundante literatura sobre el problema de la evaporación y combustión de gotas (p.ej. [11]), puede concluirse que el número de Péclet es mucho menor que la unidad en un gran número de situaciones de interés práctico. Esto indica que la convección debida a la velocidad relativa entre el gas circundante y la gota es despreciable, por lo que el problema estudiado está dominado por la difusión y la convección debida a los flujos de Stefan. Por lo tanto, el campo de concentración de especies y de energía alrededor de la gota se puede considerar unidimensional, tal y como demuestra las llamas que se forman alrededor de la gota mostrada en la parte derecha de la Fig. 2.2.

2.3. Formulación matemática del problema.

El problema transitorio de evaporación de gotas en condiciones de simetría esférica se describe matemáticamente mediante las ecuaciones de conservación de especies y energía:

$$\frac{\partial(\varrho_{\beta,i})}{\partial t} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r}(r^2 \varrho_{\beta,i} v_\beta) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r}(r^2 J_{\beta,i}) = 0, \quad i = 1, \dots, N, \quad (2.2)$$

$$\frac{\partial(H_\beta)}{\partial t} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r}(r^2 H_\beta v_\beta) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r}(r^2 q_\beta) = 0, \quad (2.3)$$

donde $\beta = l$ o $\beta = g$ hace referencia a las fases líquida y gaseosa, respectivamente, $\varrho_{\beta,i} = \rho_\beta Y_{\beta,i}$, $Y_{\beta,i}$ es la fracción másica de la especie i , ρ_β es la densidad, v_β es la velocidad del fluido, H_β es la entalpía volumétrica, y N es el número de especies que existen en alguna de las dos fases. El subíndice i hace referencia a la i -ésima especie. Asimismo, los términos $J_{\beta,i}$ y q_β representan los flujos de difusión másica y de energía, respectivamente.

Es importante señalar que las variables anteriores satisfacen las siguientes relaciones:

$$\sum_{i=1}^N Y_{\beta,i} = 1, \quad \sum_{i=1}^N \varrho_{\beta,i} = \rho_\beta, \quad \sum_{i=1}^N J_{\beta,i} = 0, \quad (2.4)$$

de tal forma que la Ec. (2.2) proporciona la ecuación de conservación de masa:

$$\frac{\partial \rho_\beta}{\partial t} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \rho_\beta v_\beta) = 0. \quad (2.5)$$

Así mismo, si se tiene en cuenta que la gota está constituida por una única especie y se reserva el subíndice $i = 1$ para ésta, se tiene:

$$\varrho_{l,1} = \varrho_l, \quad \varrho_{l,2} = \dots = \varrho_{l,N} = 0. \quad (2.6)$$

Como se puede observar en las ecuaciones de conservación de energía y especies, el problema de la evaporación de una gota está dominado por los fenómenos de difusión y convección.

La difusión de especies es el proceso mediante el cual se produce el transporte espontáneo de una sustancia desde las regiones de mayor concentración hacia las regiones de menor concentración, impulsado por gradientes de dicha concentración. Esta difusión está descrita por la primera ley de Fick, que establece que el flujo de difusión es proporcional al gradiente de concentración:

$$J_{\beta,i} = -\rho_\beta D_{\beta,i} \frac{\partial Y_{\beta,i}}{\partial r} \quad (2.7)$$

donde destaca la propiedad de transporte conocida como el coeficiente de difusión, en este caso es el coeficiente de difusión de la especie i en el resto de especies presentes en la fase β , representado como $D_{\beta,i}$. Por otro lado, la difusión de energía está descrita por la ley de Fourier:

$$q_\beta = -k_\beta \frac{\partial T_\beta}{\partial r}, \quad (2.8)$$

donde k_β es la conductividad térmica y T_β es la temperatura.

Con el propósito de realizar la discretización numérica, es conveniente expresar los flujos de difusión másica y de calor en términos de las variables $\varrho_{\beta,i}$ y H_β . Para ello, se utiliza que ρ_β se supone constante y que [12]:

$$H_\beta = \sum_{i=1}^N \varrho_{\beta,i} h_{\beta,i}, \quad dh_{\beta,i} = c_{p,i} dT_\beta, \quad c_p = \sum_{i=1}^N c_{p,i} Y_{\beta,i}, \quad (2.9)$$

donde $h_{\beta,i}$ es la entalpía másica de la especie i , y $c_{p,i}$ y c_p representan el calor específico a presión constante del compuesto i y de la mezcla, respectivamente. En ese caso:

$$J_{\beta,i} = -D_{\beta,i} \frac{\partial \varrho_{\beta,i}}{\partial r}, \quad (2.10)$$

$$q_\beta = -D_{T,\beta} \left(\frac{\partial H_\beta}{\partial r} - \sum_{i=1}^N \frac{\partial \varrho_{\beta,i}}{\partial r} h_{\beta,i} \right), \quad (2.11)$$

donde $D_{T,\beta}$ es el coeficiente de difusión térmica de la mezcla en la fase β , expresada como $D_T = k/(\rho c_p)$.

Por otra parte, la convección puede entenderse como el transporte de una partícula con características específicas, como temperatura o concentración, de un punto a otro dentro de un fluido en movimiento. En este problema, se puede identificar la convección como el segundo término de las Ecs. (2.2), (2.3) y (2.5).

Como se ha mencionado previamente, este modelo incorpora la suposición de que $\partial \rho_\beta / \partial t = 0$ y $\partial \rho_\beta / \partial r = 0$. Tras la aplicación de esta simplificación, la ecuación de conservación de masa (Ec. (2.5)) en ambas fases se puede expresar de la siguiente manera:

$$r^2 v_\beta = cte. \quad (2.12)$$

Gracias a la existencia de esta relación, es posible determinar el campo de velocidades en toda la fase conociendo el valor de la velocidad en un único punto, tal y como se verá a continuación.

2.4. Evaluación de propiedades.

Para poder resolver las ecuaciones anteriores, es necesario calcular las propiedades termodinámicas de ambas fases como función de algunas de sus variables de estado como, por ejemplo, las fracciones másicas y la temperatura.

En el caso del gas, los calores específicos de las especies puras, $c_{p,i}$, y las entalpías másicas $h_{\beta,i}$ se obtienen a partir de la temperatura usando los polinomios de la NASA [13]. Por otra parte, el coeficiente de difusión de la especie i en la mezcla se calcula como [14]:

$$D_{g,i} = \frac{1 - X_{g,i}}{\sum_{j=1, j \neq i}^N \frac{X_{g,j}}{D_{bin,ij}}} \quad (2.13)$$

donde $X_{g,i}$ es la fracción molar de la especie i y $D_{bin,ij}$ es el coeficiente binario a dilución infinita calculado mediante la teoría cinética de gases según el método de [15]. La fracción molar se puede calcular de acuerdo a la fórmula:

$$X_{\beta,i} = \frac{Y_{\beta,i}/W_i}{\sum_{j=1}^N Y_{\beta,j}/W_j}, \quad (2.14)$$

siendo W_i el peso molecular de la especie i . Por otra parte, la conductividad térmica k_g (y por tanto el coeficiente de difusión térmica $D_{T,g}$) se obtiene calculando las conductividades de cada especie, $k_{g,i}$, a la temperatura de interés mediante el método descrito en [15]. Una vez se ha obtenido las conductividades individuales se puede calcular la conductividad de la mezcla mediante la regla de mezcla también propuesta en [15]:

$$k_g = \frac{1}{2} \left(\sum_{i=1}^N k_{g,i} X_{g,i} + \frac{1}{\sum_{i=1}^N X_{g,i}/k_{g,i}} \right). \quad (2.15)$$

Respecto a las propiedades de la fase líquida, no es necesario aplicar ninguna regla de mezcla, dado que se trata de un compuesto puro. Las propiedades de dicho compuesto puro han sido obtenidas a partir de las correlaciones propuestas en [16] y [17].

Notemos que las propiedades anteriores se calculan suponiendo conocidas las fracciones másicas y la temperatura, puesto que así es como figura en las bases de datos. Sin embargo, el modelo está planteado en términos de las densidades $\varrho_{\beta,i}$ y de la entalpía H_β . Por tanto, dadas estas últimas variables, hay que calcular primero:

$$Y_{\beta,i} = \frac{\varrho_{\beta,i}}{\sum_{j=1}^N (\varrho_{\beta,j})}, \quad (2.16)$$

mientras que la temperatura se obtiene resolviendo la ecuación no lineal:

$$H_\beta = \sum_{i=1}^N \varrho_{\beta,i} h(T)_{\beta,i} \quad (2.17)$$

con un método de Newton-Raphson [18].

2.5. Condiciones de contorno.

En el problema de la evaporación de gotas, deben imponerse condiciones de contorno en tres puntos diferente del dominio. El primero de estos puntos es el centro de la gota ($r = 0$). Puesto que los flujos

de difusión de masa y energía deben ser continuos y al mismo tiempo simétricos respecto de dicho punto, se deduce que deben ser nulos, es decir:

$$\left. \frac{\partial H_l}{\partial r} \right|_{r=0} = 0, \quad \left. \frac{\partial \varrho_{l,i}}{\partial r} \right|_{r=0} = 0. \quad (2.18)$$

Igualmente, la velocidad en el centro de la gota debe ser nula por simetría, $v_l|_{r=0} = 0$, por lo que de acuerdo a la Ec. (2.12):

$$v_l = 0. \quad (2.19)$$

A continuación, se debe imponer las condiciones de contorno en la lejanía del dominio, es decir, en $r \rightarrow \infty$. Al estar muy lejos de la superficie de la gota, se puede suponer que las propiedades del gas son uniformes, es decir:

$$T|_{r \rightarrow \infty} = T_\infty, \quad (2.20)$$

$$Y_{g,i}|_{r \rightarrow \infty} = Y_{g,i,\infty}, \quad (2.21)$$

donde T_∞ y $Y_{g,i,\infty}$ son valores constantes a lo largo del tiempo. Además, dado que la velocidad del gas v_g tiene una relación inversamente proporcional al cuadrado del radio (2.12), se puede asegurar que la velocidad del gas en $r \rightarrow \infty$ es nula.

Por último, se debe estudiar las condiciones de acoplamiento entre la fase líquida y la fase gaseosa. Para ello, es preciso recordar primero la condición de salto para ecuaciones de conservación. Se considera que una variable $\mathbf{u}(r, t)$ está gobernada por una ecuación de la forma:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \mathbf{f}(\mathbf{u})) = 0 \quad (2.22)$$

y presenta una discontinuidad en la esfera de radio $r = a$ y centro el origen de coordenadas. Entonces, la discontinuidad debe moverse con una velocidad $\dot{a} = da/dt$ tal que:

$$(\mathbf{u}^- - \mathbf{u}^+) \dot{a} = \mathbf{f}(\mathbf{u}^-) - \mathbf{f}(\mathbf{u}^+), \quad (2.23)$$

donde $-$ y $+$ hacen referencia a los valores de la solución en $r = a^-$ y $r = a^+$. Aplicando esta condición a las ecuaciones (2.2)-(2.3), y notando que $\partial \varrho_{l,i}/\partial r = 0$ de acuerdo a (2.6) se tiene:

$$\left[\varrho_{l,i}(v_l - \dot{a}) - D_l \frac{\partial \varrho_{l,i}}{\partial r} \right]_{r=a} = \left[\varrho_{g,i}(v_g - \dot{a}) - D_g \frac{\partial \varrho_{g,i}}{\partial r} \right]_{r=a}, \quad i = 1, \dots, N \quad (2.24)$$

$$\left[H_l(v_l - \dot{a}) - D_{T,l} \frac{\partial H_l}{\partial r} \right]_{r=a} = \left[H_g(v_g - \dot{a}) - D_{T,g} \left(\frac{\partial H_g}{\partial r} - \sum_{i=1}^N \frac{\partial \varrho_{g,i}}{\partial r} h_i \right) \right]_{r=a}. \quad (2.25)$$

Es importante recordar que la velocidad del líquido en cualquier punto del dominio es conocida gracias a la Ec. (2.19); sin embargo, la velocidad del gas sigue siendo una incógnita.

Además, debe satisfacerse la igualdad de temperaturas en la interfase:

$$T_l|_{r=a} = T_g|_{r=a}. \quad (2.26)$$

Para las especies presentes a la vez en la gota y en el gas, la condición de equilibrio termodinámico es:

$$P_{v,i} = P_{Total} X_{g,i}, \quad (2.27)$$

donde $P_{v,i}$ es la presión de vapor, que puede hallarse con la base de datos [16] como función de la temperatura en la superficie de la gota, y P_{Total} es la presión total en el sistema. En este caso, la ecuación anterior se puede aplicar sólo para $i = 1$ debido a que la gota se supone monocomponente.

Utilizando la Ec. (2.14), se puede reorganizar esta ecuación para trabajar con fracciones másicas, lo que simplifica aún más su integración en el modelo:

$$\frac{Y_{i,g}}{W_i} \sum_{j=1}^N \frac{Y_{j,l}}{W_j} = \frac{P_{v,i}}{P_{Total}} \frac{Y_{i,l}}{W_i} \sum_{j=1}^N \frac{Y_{j,g}}{W_j}. \quad (2.28)$$

Para las especies que sólo están presentes en el gas, simplemente se impone $\varrho_{l,i} = 0$.

Así mismo, en la interfase debe imponerse la ecuación de estado para el líquido y para el gas, es decir, se impone la ecuación central de (2.4) en ambas fases.

La ecuación correspondiente a la conservación de energía puede ser reescrita para facilitar su comprensión, para ello se debe imponer la conservación de masa en la interfase. Por lo que, teniendo en cuenta que la ecuación de conservación de masa a un lado y a otro de la interfase, queda:

$$\rho_g(v_g - \dot{a})_{r=a} = \rho_l(v_l - \dot{a})_{r=a} = \dot{m}'', \quad (2.29)$$

donde \dot{m}'' es la masa evaporada por unidad de tiempo dividida entre el área de la superficie de la gota. Reordenando la Ec. (2.25) obtenemos la siguiente ecuación:

$$\left[-D_{T,g} \left(\frac{\partial H_g}{\partial r} - \sum_{i=1}^N \frac{\partial \varrho_{g,i}}{\partial r} h_i \right) \right]_{r=a} = \left[-D_{T,l} \frac{\partial H_l}{\partial r} + (H_g(v_g - \dot{a}) - H_l(v_l - \dot{a})) \right]_{r=a} \quad (2.30)$$

Gracias a la definición de \dot{m}'' vista en la Ec. (2.29) se puede reescribir esta ecuación de tal forma que:

$$\left[-D_{T,g} \left(\frac{\partial H_g}{\partial r} - \sum_{i=1}^N \frac{\partial \varrho_{g,i}}{\partial r} h_i \right) \right]_{r=a} = \left[-D_{T,l} \frac{\partial H_l}{\partial r} + \dot{m}''(h_g - h_l) \right]_{r=a}, \quad (2.31)$$

donde el primer término corresponde al flujo que se transfiere a la gota mediante conducción de calor desde el gas. En cuanto al segundo término, también denominado calor sensible, es la parte de la energía que es absorbida por la gota y provoca un aumento en su temperatura. Finalmente, el tercer término, conocido como calor latente, corresponde a la energía absorbida por la gota que se invierte en realizar el cambio de estado líquido-vapor.

2.6. Condiciones iniciales.

Puesto que se trata de un proceso no estacionario, se hace necesario establecer unas condiciones iniciales, tanto para la gota líquida como para la fase gas. Si se considera una gota con un perfil de temperatura uniforme que es repentinamente situada ($t = 0$) en un ambiente gaseoso a una temperatura superior, los perfiles de temperatura y de fracción másica de especies presentarían una discontinuidad en la interfase, tal y como se muestra en la Fig. 2.4a para el caso de la temperatura. Este tipo de perfil inicial no cumple las condiciones de acoplamiento (Ecs. (2.24)-(2.28)), generando errores numéricos al evaluar gradientes infinitos en la interfase.

Por este motivo, la fase gaseosa del problema se integra hasta $t = t_0$ mediante las ecuaciones analíticas proporcionadas en [11]. El valor de t_0 se fija como el mínimo necesario para suavizar los perfiles iniciales, haciendo que cumplan las condiciones de acoplamiento. En la Fig. 2.4b se muestra en azul el perfil obtenido mediante estas ecuaciones analíticas para un $t_0 = 10^{-4}s$. En cuanto a la temperatura inicial de la fase líquida (en rojo), ésta se fija mediante una función exponencial capaz de mantener la mayor parte del volumen de la gota a una temperatura uniforme, presentando asimismo el gradiente en superficie requerido por las condiciones de acoplamiento. En el Anexo A se proporciona

mayor detalle sobre el tratamiento de estas condiciones iniciales, tanto para el caso de la temperatura como para el de la fracción másica.

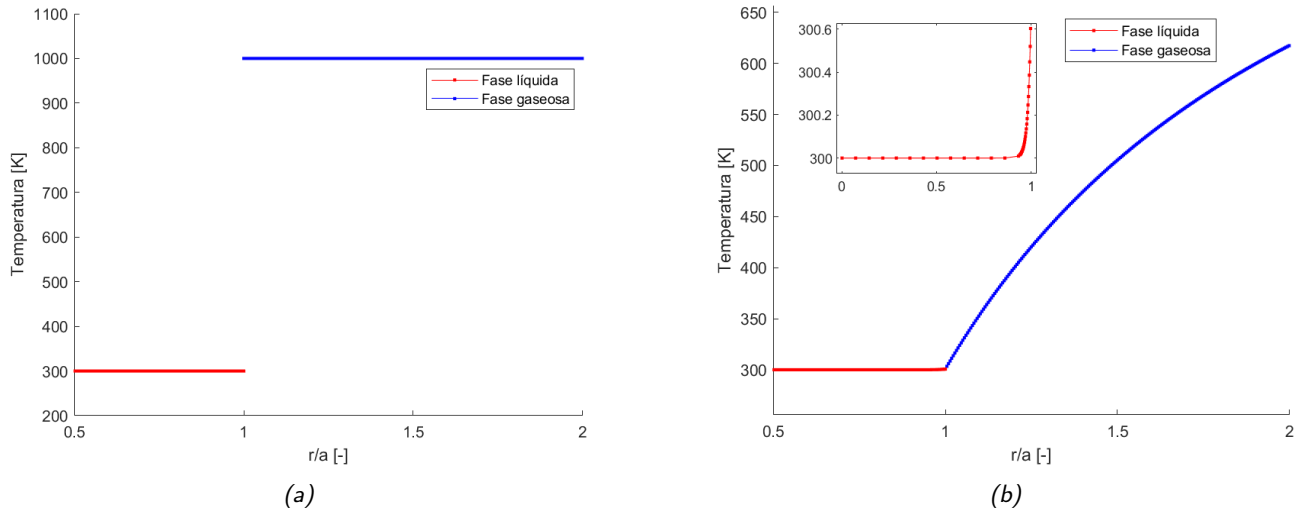


Figura 2.4: Perfiles de temperatura iniciales para $t = 0s$ (a) y $t = t_0 = 10^{-4}s$ (b) calculados para una gota de etanol a $300K$ que es introducida en un ambiente gaseoso a $1000K$.

Capítulo 3

Resolución numérica de las ecuaciones.

3.1. Discretización espacial mediante el método de DG-ALE.

3.1.1. Introducción al método DG-ALE.

Para el desarrollo de este modelo numérico se ha optado por el método de Galerkin discontinuo arbitrariamente Lagrangiano–Euleriano (DG-ALE).

En primer lugar, se considera como dominio espacial Ω la esfera de centro el origen y radio $r_{\text{máx}} \gg a$. A continuación, se divide el dominio en una malla móvil $\mathcal{T}_h(t)$ de elementos finitos con forma de corona esférica. Las caras de los elementos están situadas en las coordenadas radiales $0 = r_0 < r_1(t) < \dots < r_{M-1}(t) < r_M = r_{\text{máx}}$ y se desplazan con una velocidad arbitraria. Asimismo, el mallado se construye de tal forma que hay M_l elementos en la parte líquida y M_g en la parte gaseosa, con $M = M_l + M_g$, quedando la interfase justo en la frontera entre dos elementos, es decir, $r_{M_l}(t) = a(t)$. Por conveniencia, se denota la posición de la cara interna u oeste de un elemento $K(t) \in \mathcal{T}_h(t)$ como $r_w^K = r_{K-1}$ y la de la cara externa o este como $r_e^K = r_K$.

Entonces, la solución exacta, $\mathbf{u}(r, t)$, se aproxima por un polinomio $\mathbf{u}_h(r, t)$ de grado p definido a trozos en los elementos de la malla. Es decir, en cada elemento $K(t) \in \mathcal{T}_h(t)$,

$$\mathbf{u}_h|_K(r, t) = \sum_{j=0}^p \phi_j^K(r, t) \mathbf{u}_j^K(t), \quad (3.1)$$

donde $\phi_j^K(r, t)$ es una base de polinomios de grado p en un elemento K y \mathbf{u}_j^K son los llamados *grados de libertad*. Notemos que \mathbf{u}_h no tiene por qué ser continua en las fronteras de los elementos, una característica distintiva de este método.

Para definir la base de polinomios $\{\phi_j^K(r, t)\}$ en cada elemento K , lo más apropiado es hacer un cambio de variable lineal y transformar K en el *elemento de referencia* $\hat{K} = [-1, 1]$. Es decir, si el elemento K está en el intervalo $r_w^K \leq r \leq r_e^K$, se utiliza la transformación:

$$r = F_K(\xi, t) := r_w^K \frac{1 - \xi}{2} + r_e^K \frac{1 + \xi}{2}. \quad (3.2)$$

En el elemento de referencia, se ha optado por tomar como base $\{\hat{\phi}_0(\xi), \dots, \hat{\phi}_p(\xi)\}$ los polinomios de Legendre [19], ya que forman una base bien condicionada y su implementación en el modelo es sencilla. Así pues, en un elemento cualquiera K , las funciones de forma vienen dadas por:

$$\phi_i^K(r, t)|_{r=F_K(\xi, t)} = \hat{\phi}_i(\xi). \quad (3.3)$$

Es importante notar que las funciones base definidas por (3.3) no son constantes en el tiempo, sino que se “desplazan” siguiendo a los elementos sobre los que están definidas. En particular, se puede definir una velocidad de malla v_m tal que:

$$v_m|_{K(t)}(\xi, t) = \frac{\partial F_K}{\partial t} = \frac{dr_w^K}{dt} \frac{1 - \xi}{2} + \frac{dr_e^K}{dt} \frac{1 + \xi}{2}. \quad (3.4)$$

Es decir, en cada elemento $K(t)$, v_m varía de forma lineal (en términos de la coordenada natural ξ) entre las velocidades de los radios interno y externo del elemento, dr_w^K/dt y dr_e^K/dt . Puesto que $\widehat{\phi}_i(\xi)$ no depende del tiempo y $r = F_K(\xi, t)$, la regla de la cadena proporciona:

$$0 = \frac{\partial \widehat{\phi}_i(\xi)}{\partial t} = \frac{\partial \phi_i^K(r, t)}{\partial t} + \frac{\partial \phi_i^K(r, t)}{\partial r} \frac{\partial r}{\partial t} = \frac{\partial \phi_i^K}{\partial t} + v_m \frac{\partial \phi_i^K}{\partial r} \quad (3.5)$$

es decir, que los valores de las funciones base se transportan con la velocidad de la malla.

En el caso del problema de evaporación de gotas se va a resolver un problema de la forma:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial(r^2 \mathbf{f})}{\partial r} = 0, \quad (3.6)$$

donde $\mathbf{f} = \mathbf{f}(\mathbf{u}, \partial \mathbf{u} / \partial r)$. La ecuación (3.6) se conoce como *formulación fuerte*. En los métodos DG-ALE, se parte de la *formulación débil*, que se obtiene al multiplicar la formulación fuerte por una función arbitraria ψ continua en cada elemento de la malla tal que:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} + v_m \frac{\partial \psi}{\partial x} = 0, \quad (3.7)$$

e integrar por partes en cada elemento K . Cabe destacar que las funciones base ϕ_i^K satisfacen (3.7) de acuerdo a (3.5). En ese caso, se obtiene:

$$\frac{d}{dt} \int_{K(t)} \mathbf{u} \psi \omega \, dr = \int_{K(t)} \mathbf{f}^* \frac{\partial \psi}{\partial r} \omega \, dr + \widetilde{\mathbf{f}}_w^K \psi(r_w^K) \omega(r_w^K) - \widetilde{\mathbf{f}}_e^K \psi(r_e^K) \omega(r_e^K). \quad (3.8)$$

En la ecuación anterior, $\omega(r) = 4\pi r^2$, $\mathbf{f}^* = \mathbf{f} - v_m \mathbf{u}$ es el flujo relativo al movimiento de la malla, y $\widetilde{\mathbf{f}}_w^K$ y $\widetilde{\mathbf{f}}_e^K$ son unos flujos numéricos, evaluados en las caras interna w y externa e de cada elemento. En particular,

$$\mathbf{u} = \begin{bmatrix} \varrho_{\beta,1} \\ \vdots \\ \varrho_{\beta,N} \\ H_\beta \end{bmatrix}, \quad \mathbf{f}^* = \mathbf{f}^c + \mathbf{f}^d, \quad \mathbf{f}^c(\mathbf{u}) = (v_\beta - v_m) \mathbf{u}, \quad \mathbf{f}^d\left(\mathbf{u}, \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial r}\right) = \begin{bmatrix} J_{\beta,1} \\ \vdots \\ J_{\beta,N} \\ q_\beta \end{bmatrix} \quad (3.9)$$

donde v_β es la velocidad del fluido de la fase β , y $J_{\beta,i}$ y q_β son los términos definidos en las Ecs. (2.10) y (2.11), respectivamente. Nótese la separación del flujo \mathbf{f}^* en una componente convectiva, \mathbf{f}^c , y otra difusiva, \mathbf{f}^d . La expresión para los flujos numéricos $\widetilde{\mathbf{f}}_w^K$ y $\widetilde{\mathbf{f}}_e^K$ es más compleja, puesto que dependen también de la solución en los elementos adyacentes a K o de las condiciones de contorno.

Como se verá más adelante, conocida la solución \mathbf{u} (o su aproximación numérica \mathbf{u}_h), es posible calcular la velocidad de la superficie de la gota, \dot{a} , así como el campo de velocidades en el gas, v_g (conviene recordar que $v_l = 0$) y los flujos numéricos $\widetilde{\mathbf{f}}_w^K$ y $\widetilde{\mathbf{f}}_e^K$ en las caras de los elementos. Asimismo, la velocidad de la malla en las caras de los elementos se elige de tal forma que:

$$v_m(r_i) = \begin{cases} \frac{r_i}{a} \dot{a}, & i = 0, \dots, M_l, & \text{(fase líquida)} \\ \frac{r_{\text{máx}} - r_i}{r_{\text{máx}} - a} \dot{a}, & i = M_{l+1}, \dots, M_l + M_g, & \text{(fase gaseosa)} \end{cases} \quad (3.10)$$

mientras que en el interior de los elementos la velocidad de la malla viene dada por (3.4)¹. Es decir, conocida la solución \mathbf{u} , es posible calcular el lado derecho de la ecuación (3.8).

¹Nótese entonces que la velocidad es lineal en las fases líquida y gas. Esto se debe a la elección descrita en (3.10). Sin embargo, el método requiere únicamente que la velocidad sea lineal a trozos en cada elemento, tal y como indica la ecuación (3.4), y que $v_m(r_{N_l}) = \dot{a}$, por lo que perfectamente podrían haberse elegidos otros valores para $v_m(r_i)$.

Así pues, si se sustituye \mathbf{u} por \mathbf{u}_h en (3.8), se utiliza (3.1) y se hace $\psi = \phi_i^K$ para todos los grados de libertad i y elementos K posibles, se llega a un sistema de la forma:

$$\frac{d}{dt}(\mathbb{M}\mathbf{U}) = \mathbf{F}(\mathbf{U}), \quad (3.11)$$

donde \mathbb{M} es una matriz de masas, que depende de la geometría de la malla y por tanto varía con el tiempo, \mathbf{U} es un vector que contiene todos los grados de libertad, y $\mathbf{F}(\mathbf{U})$ es el vector correspondiente a la discretización del lado derecho de (3.8). La ecuación anterior debe ser complementada con:

$$\frac{dr_i}{dt} = v_m(r_i), \quad i = 0, \dots, M_l + M_g, \quad (3.12)$$

la cual determina el movimiento de la malla.

3.1.2. Cálculo de los flujos entre elementos y condiciones de contorno.

En lo que sigue, se supondrá que $\dot{a} < 0$, es decir, el tamaño de la gota siempre disminuye. En ese caso, las ecuaciones (2.19) y (2.29) proporcionan $v_g|_{r=a} = -(\rho_l/\rho_g - 1)\dot{a} > 0$, ya que $\rho_l > \rho_g$, y por tanto $v_\beta - v_m > 0$ de acuerdo a (2.12) y (3.10). Conviene recordar también que la cara $K - 1$ está comprendida entre los elementos $K - 1$ y K , como se muestra en la Fig. 3.1.



Figura 3.1: Posición relativa de la cara $K - 1$ respecto a los elementos K y $K - 1$

Se distingue ahora varios casos. En primer lugar, en las caras intermedias, se aplica *upwind* en el flujo convectivo puesto que $v - v_m > 0$. Además, se toma el valor medio del flujo viscoso y se añade un término de penalización contra las discontinuidades [6]:

$$\tilde{\mathbf{f}}_w^K = (v_\beta - v_m)_{r_{K-1}} \mathbf{u}_e^{K-1} + \frac{1}{2} \left[\mathbf{f}^d \left(\mathbf{u}_e^{K-1}, \frac{\partial \mathbf{u}_e^{K-1}}{\partial r} \right) + \mathbf{f}^d \left(\mathbf{u}_w^K, \frac{\partial \mathbf{u}_w^K}{\partial r} \right) \right] + \sigma_{K-1} (\mathbf{u}_e^{K-1} - \mathbf{u}_w^K), \quad (3.13)$$

donde \mathbf{u}_e^{K-1} y \mathbf{u}_w^K son, respectivamente, las soluciones en las caras este y oeste de los elementos $K - 1$ y K . Por otra parte,

$$\sigma_{K-1} = C_P \frac{1}{2} \left[\frac{\max\{D_{T,\beta}(\mathbf{u}_e^{K-1}), D_{\beta,i}(\mathbf{u}_e^{K-1})\}}{r_e^{K-1} - r_w^{K-1}} + \frac{\max\{D_{T,\beta}(\mathbf{u}_w^K), D_{\beta,i}(\mathbf{u}_w^K)\}}{r_e^K - r_w^K} \right] \quad (3.14)$$

es un parámetro de penalización, que depende de una constante $C_P \in [50, 200]$ elegida por el usuario. En este trabajo, se ha tomado $C_P = 50$. Para calcular los flujos a través de las caras este de los elementos, se tiene en cuenta que éstos son conservativos, es decir, $\tilde{\mathbf{f}}_e^{K-1} = \tilde{\mathbf{f}}_w^K$. Cabe destacar que el flujo numérico es consistente, es decir, si $\mathbf{u}_e^{K-1} = \mathbf{u}_w^K$ y $\partial \mathbf{u}_e^{K-1} / \partial r = \partial \mathbf{u}_w^K / \partial r$ entonces $\tilde{\mathbf{f}}_e^{K-1} = \tilde{\mathbf{f}}_w^K = \mathbf{f}^*(\mathbf{u}_w^K, \partial \mathbf{u}_w^K / \partial r)$.

En la cara $r = 0$, el valor del flujo es irrelevante, puesto que multiplica por $\omega(0) = 4\pi 0^2$. De esta forma, se impone de manera natural flujo nulo en el centro de la gota, como exige la simetría del problema.

En la cara $r = a^-$, es decir, la cara correspondiente a la interfase vista desde la fase líquida, o la frontera exterior de la parte líquida, el flujo numérico queda:

$$\tilde{\mathbf{f}}_e^K \Big|_{r=a^-} = (v_l - v_m)_{r=a} \mathbf{u}_e^K + \mathbf{f}^d \left(\mathbf{u}_e^K, \frac{\partial \mathbf{u}_e^K}{\partial r} \right) + \sigma_K (\mathbf{u}_e^K - \bar{\mathbf{u}}_l), \quad (3.15)$$

donde $K = M_l$ y $\bar{\mathbf{u}}_l$ es la condición Dirichlet impuesta en esta frontera, cuyo valor se obtiene al resolver las condiciones de acoplamiento.

En la cara $r = a^+$, es decir, la cara correspondiente a la interfase vista desde la fase gaseosa, o la frontera interior de la parte gaseosa, el flujo numérico queda:

$$\tilde{\mathbf{f}}_w^K \Big|_{r=a^+} = (v_g - v_m)_{r=a} \bar{\mathbf{u}}_g + \mathbf{f}^d \left(\mathbf{u}_w^K, \frac{\partial \mathbf{u}_w^K}{\partial r} \right) + \sigma_{K-1} (\bar{\mathbf{u}}_g - \mathbf{u}_w^K), \quad (3.16)$$

donde $K = M_l + 1$ y $\bar{\mathbf{u}}_g$ es la condición Dirichlet impuesta en esta frontera, nuevamente obtenida mediante las condiciones de acoplamiento.

Por último, en la cara $r = r_{\text{máx}}$, correspondiente a la frontera exterior de la parte gaseosa, el flujo numérico queda

$$\tilde{\mathbf{f}}_e^K \Big|_{r=r_{\text{máx}}} = (v_l - v_m)_{r=r_{\text{máx}}} \mathbf{u}_e^K + \mathbf{f}^d \left(\mathbf{u}_e^K, \frac{\partial \mathbf{u}_e^K}{\partial r} \right) + \sigma_K (\mathbf{u}_e^K - \mathbf{u}_g^\infty), \quad (3.17)$$

donde $K = M$ y \mathbf{u}_g^∞ es la condición Dirichlet impuesta en el infinito (2.20) y (2.21). En esta última cara,

$$\sigma_M = C_P \frac{\max\{D_{T,\beta}(\mathbf{u}_e^M), D_{\beta,i}(\mathbf{u}_e^M)\}}{r_e^M - r_w^M}. \quad (3.18)$$

Nótese que las condiciones de contorno Dirichlet no se imponen directamente en el valor de la solución, sino que se imponen de forma débil a través del flujo numérico en la frontera. Es decir, no se impone directamente el valor de la solución, se impone que el valor del flujo provoque que la solución en ese punto sea la condición Dirichlet. Por ejemplo, en la última cara del dominio no se impone el valor de \mathbf{u}_g^∞ , es el flujo de penalización $\sigma_K (\mathbf{u}_e^K - \mathbf{u}_g^\infty)$ el que provoca que \mathbf{u}_e^K adquiera el valor de la condición Dirichlet.

3.1.3. Condiciones de acoplamiento en la superficie de la gota.

Como se vio en el capítulo anterior, a través de la superficie de la gota deben satisfacerse las siguientes condiciones:

- Conservación de la masa de cada especie (2.24).
- Conservación de la energía (2.25).
- Continuidad de la temperatura (2.26).
- Equilibrio termodinámico (2.28).
- Ecuación de estado.

Por conveniencia, se llamará ahora L y R a los estados a la izquierda y la derecha de la superficie de la gota, es decir en la cara este del elemento M_l y la cara oeste del elemento M_{l+1} , respectivamente. Teniendo en cuenta los flujos numéricos utilizados, las condiciones anteriores dan lugar al siguiente

sistema de ecuaciones:

$$f_{\varrho_{iL}}^d + (v_L - \dot{a})\varrho_{iL} + \sigma_L (\varrho_{iL} - \overline{\varrho}_{iL}) = f_{\varrho_{iR}}^d + (v_R - \dot{a})\overline{\varrho}_{iR} + \sigma_R (\overline{\varrho}_{iR} - \varrho_{iR}), \quad i=1, \dots, N, \quad (3.19)$$

$$f_{H_L}^d + (v_L - \dot{a})H_L + \sigma_L (H_L - \overline{H}_L) = f_{H_R}^d + (v_R - \dot{a})\overline{H}_R + \sigma_R (\overline{H}_R - H_R), \quad (3.20)$$

$$T_l(\overline{\varrho}_{1L}, \dots, \overline{\varrho}_{NL}, \overline{H}_L) = T_g(\overline{\varrho}_{1R}, \dots, \overline{\varrho}_{NR}, \overline{H}_R), \quad (3.21)$$

$$\frac{\overline{\varrho}_{iR}}{W_{iR}} \sum_{j=1}^N \frac{\overline{\varrho}_{jL}}{W_{jL}} = \frac{p_{vi}(T_l(\overline{\varrho}_{1L}, \dots, \overline{\varrho}_{NL}, \overline{H}_L))}{P_{Total}} \frac{\overline{\varrho}_{iL}}{W_{iL}} \sum_{j=1}^N \frac{\overline{\varrho}_{jR}}{W_{jR}}, \quad i=1, \quad (3.22)$$

$$\overline{\varrho}_{iL} = 0, \quad i=2, \dots, N, \quad (3.23)$$

$$\sum_{i=1}^N \overline{\varrho}_{iL} = \rho_l, \quad (3.24)$$

$$\sum_{i=1}^N \overline{\varrho}_{iR} = \rho_g. \quad (3.25)$$

Es importante recordar que $v_L = 0$ al ser nula la velocidad en la fase líquida y que ρ_l y ρ_g se consideran conocidos. Así pues, suponiendo conocida la solución numérica en L y R , el sistema anterior proporciona $2N + 4$ ecuaciones para otras tantas incógnitas:

- los valores en azul $\overline{\varrho}_{iL}$, \overline{H}_L , $\overline{\varrho}_{iR}$, \overline{H}_R ($i = 1, \dots, N$) a la izquierda y la derecha de la interfase, los cuales se imponen como condiciones Dirichlet en las respectivas fronteras de las fases líquida y gas,
- los valores en verde de la velocidad del gas en la interfase, v_R , y la velocidad de ésta última, \dot{a} , las cuales determinan, respectivamente, el campo de velocidades del gas (2.12) y el movimiento de la malla (3.10).

El sistema anterior se resuelve mediante el método de Newton-Raphson [18].

3.2. Discretización temporal. El método de EIN-RK.

El objetivo de este apartado es explicar cómo, partiendo de una solución \mathbf{U}^n a la Ec. (3.11) en un instante t^n , se obtiene la solución \mathbf{U}^{n+1} en $t^{n+1} = t^n + \Delta t^n$.

Tras analizar distintos métodos numéricos para resolver este sistema se ha optado por el uso de los métodos Runge–Kutta (RK). Esta elección se basa en que los métodos Runge–Kutta de alto orden se caracterizan por su mayor precisión, así como por ser sencillos de implementar en el modelo. Dentro de la familia Runge–Kutta existen los métodos explícitos e implícitos, que presentan características distintas:

- Los esquemas explícitos son muy sencillos de implementar, pero requieren valores de Δt muy reducidos para asegurar la estabilidad, lo cual reduce significativamente la practicidad del modelo.
- Los esquemas implícitos son complejos de implementar, pero permiten asegurar la estabilidad del modelo con unos valores de Δt muchos mayores. El mayor inconveniente de estos esquemas viene de la necesidad de resolver un sistema no lineal de ecuaciones en cada paso de tiempo, lo cual requiere implementar un método iterativo para el cálculo de la solución en las distintas etapas del método, aumentando drásticamente el coste computacional.

Estas limitaciones de los esquemas explícitos e implícitos sirven de motivación para realizar la discretización temporal mediante un método EIN-RK (explicit–implicit–null Runge–Kutta). Para el desarrollo de este esquema se debe reescribir el sistema original (3.11) de la siguiente forma:

$$\frac{d}{dt}(\mathbb{M}\mathbf{U}) = (\mathbf{F}(\mathbf{U}) - \mathbb{J}\mathbf{U}) + \mathbb{J}\mathbf{U}. \quad (3.26)$$

donde \mathbb{J} es la matriz jacobiana de $\mathbf{F}(\mathbf{U})$ evaluada en \mathbf{U}^n . De esta manera, el lado derecho de la ecuación es la suma de un término no lineal y no rígido, $\mathbf{g}(\mathbf{U}) = \mathbf{F}(\mathbf{U}) - \mathbb{J}\mathbf{U}$, que se integrará de forma explícita, y un término lineal rígido, $\mathbf{L}(\mathbf{U}) = \mathbb{J}\mathbf{U}$, que se integrará de forma implícita.

Se debe recordar que en todo método Runge-Kutta la solución \mathbf{U}^{n+1} se obtiene a partir de la solución en s etapas intermedias. Tanto la parte implícita como la explícita del método están descritas mediante los *tableros de Butcher*:

$c^1 = 0$	0				0			
c^2	$a_I^{2,1}$	$a_I^{2,2}$			$a_E^{2,1}$			
c^3	$a_I^{3,1}$	$a_I^{3,2}$	$a_I^{3,3}$		$a_E^{3,1}$	$a_E^{3,2}$		
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\ddots	\vdots	\vdots	\ddots	
c^s	$a_I^{s,1}$	\dots	\dots	$a_I^{s,s}$	$a_E^{s,1}$	\dots	$a_E^{s,s-1}$	\dots
	b_I^1	\dots	\dots	b_I^s	b_E^1	\dots	b_E^{s-1}	b_E^s
	\widehat{b}_I^1	\dots	\dots	\widehat{b}_I^s	\widehat{b}_E^1	\dots	\widehat{b}_E^{s-1}	\widehat{b}_E^s

donde el vector c^i determina las posiciones de las etapas intermedias dentro del intervalo $[t^n, t^{n+1}]$, los coeficientes a^{ij} determinan cómo las derivadas de las soluciones intermedias se combinan para obtener la solución en la etapa i , y b^i (resp. \widehat{b}^i) son los pesos con los que se combinan las derivadas de las soluciones intermedias para obtener la solución final \mathbf{U}^{n+1} (resp. una solución de menor orden $\widehat{\mathbf{U}}^{n+1}$). En particular, en este trabajo se emplea el esquema de tercer orden conocido como ARS443 [8].

Por otra parte, el movimiento de la malla, gobernado por la Ec. (3.12), se integrará de forma explícita. Por conveniencia, se llamará $\chi := [r_0, \dots, r_M]$ al vector que contiene las coordenadas de los nodos de la malla, de tal forma que dicha ecuación también se puede escribir como:

$$\frac{d\chi}{dt} = \mathbf{v}_m(\chi), \quad (3.27)$$

la cual se integra explícitamente con la parte explícita del método. Una vez se conoce las posiciones de los nodos χ , la obtención de la matriz de masas \mathbb{M} correspondiente a estas posiciones es directa.

En particular, la primera etapa del método es igual a la solución en t^n , es decir

$$\begin{aligned} t^{[1]} &= t^n \\ \chi^{[1]} &= \chi^n \rightarrow \mathbb{M}^{[1]} = \mathbb{M}^n \\ \mathbf{U}^{[1]} &= \mathbf{U}^n \\ \mathbf{k}_g^{[1]} &= \mathbf{g}(\mathbf{U}^n) \\ \mathbf{k}_L^{[1]} &= \mathbf{L}(\mathbf{U}^n) = \mathbb{J}\mathbf{U}^n \\ \mathbf{k}_v^{[1]} &= \mathbf{v}_m(\chi^n). \end{aligned}$$

Para las etapas $i = 2, \dots, s$ se sigue un procedimiento análogo, en el que en primer lugar se obtiene la

matriz de masas $\mathbb{M}^{[i]}$ explícitamente,

$$\begin{aligned} t^{[i]} &= t^n + \Delta t^n c^i \\ \chi^{[i]} &= \chi^n + \Delta t^n \sum_{j=1}^{i-1} a_E^{ij} \mathbf{k}_v^{[j]} \\ \chi^{[i]} &\rightarrow \mathbb{M}^{[i]} \end{aligned}$$

y a continuación se calcula la solución $\mathbf{U}^{[i]}$:

$$\mathbb{M}^{[i]} \mathbf{U}^{[i]} = \mathbb{M}^n \mathbf{U}^n + \Delta t^n \sum_{j=1}^{i-1} a_E^{ij} \mathbf{k}_g^{[j]} + \Delta t^n \sum_{j=1}^{i-1} a_I^{ij} \mathbf{k}_L^{[j]} + \Delta t^n a_I^{ii} \mathbf{k}_L^{[i]} \quad (3.28)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{k}_g^{[i]} &= \mathbf{g}(\mathbf{U}^{[i]}) \\ \mathbf{k}_L^{[i]} &= \mathbf{L}(\mathbf{U}^{[i]}) = \mathbb{J} \mathbf{U}^{[i]} \\ \mathbf{k}_v^{[i]} &= \mathbf{v}_m(\chi^{[i]}). \end{aligned} \quad (3.29)$$

Como se puede ver, las ecuaciones (3.28) y (3.29) forman un sistema lineal de ecuaciones, debido a la definición de $\mathbf{L}(\mathbf{U})$ y a que el cálculo de $\mathbb{M}^{[i]}$ se realiza de forma explícita. Sustituyendo la ecuación (3.29) en (3.28) se obtiene la ecuación lineal:

$$\left[\mathbb{M}^{[i]} - \Delta t^n a_I^{ii} \mathbb{J} \right] \mathbf{U}^{[i]} = \mathbb{M}^n \mathbf{U}^n + \Delta t^n \sum_{j=1}^{i-1} a_E^{ij} \mathbf{k}_g^{[j]} + \Delta t^n \sum_{j=1}^{i-1} a_I^{ij} \mathbf{k}_L^{[j]}, \quad (3.30)$$

que puede ser resuelta fácilmente. Al hacerlo, se obtiene la solución $\mathbf{U}^{[i]}$ lo que posibilita la obtención de $\mathbf{k}_g^{[i]}$, $\mathbf{k}_L^{[i]}$ y $\mathbf{k}_v^{[i]}$, y con ello el comienzo de una nueva etapa del método. Se debe recordar que, una vez hallado $\mathbf{U}^{[i]}$, es necesario resolver las condiciones de acoplamiento (3.19)–(3.25) para hallar $\mathbf{k}_g^{[i]}$, $\mathbf{k}_L^{[i]}$ y $\mathbf{k}_v^{[i]}$. Dado que el método desarrollado es *globally stiffly accurate* (GSA), es decir, $b_E^i = a_E^{s,i}$ y $b_I^i = a_I^{s,i}$, no es necesario hallar \mathbf{U}^{n+1} como:

$$\mathbb{M}^{n+1} \mathbf{U}^{n+1} = \mathbb{M}^n \mathbf{U}^n + \Delta t^n \sum_{j=1}^s b_E^j \mathbf{k}_g^{[j]} + \Delta t^n \sum_{j=1}^s b_I^j \mathbf{k}_L^{[j]}, \quad (3.31)$$

sino que directamente tomamos $\mathbf{U}^{n+1} = \mathbf{U}^{[s]}$. Gracias a la aplicación de este método se consigue trabajar con unos valores de Δt mucho mayores a los utilizados en los métodos explícitos con un coste computacional razonable gracias a que la ecuación (3.30) es lineal. Por ello, se concluye que el uso de este método EIN-RK es muy indicado para el desarrollo de este modelo.

El modelo desarrollado cuenta con un paso de tiempo adaptativo [20], es decir, Δt^n no es constante. Estos Δt^n son calculados mediante la estimación del error cometido al realizar la integración temporal. Para ello, se obtiene primero la solución de menor orden definida por:

$$\mathbb{M}^{n+1} \hat{\mathbf{U}}^{n+1} = \mathbb{M}^n \mathbf{U}^n + \Delta t^n \sum_{j=1}^s \hat{b}_E^j \mathbf{k}_g^{[j]} + \Delta t^n \sum_{j=1}^s \hat{b}_I^j \mathbf{k}_L^{[j]}. \quad (3.32)$$

Entonces, el error cometido en el instante t^{n+1} se estima como:

$$\eta_T = \sqrt{\frac{1}{|\Omega|} \int \sum_I \left[\frac{u_{h,I}^{n+1} - \hat{u}_{h,I}^{n+1}}{\text{FN}_I} \right]^2 d\Omega}, \quad (3.33)$$

donde $u_{h,I}$ (resp. $\hat{u}_{h,I}$) es la I -ésima componente de la solución numérica \mathbf{u}_h^n (resp. $\hat{\mathbf{u}}_h^n$) determinada por \mathbf{U}^n (resp. $\hat{\mathbf{U}}^n$), y $\text{FN}_I = \max |u_{h,I}^0|$ es el factor de normalización para dicha componente. Este valor

η_T debe ser comparado con un valor máximo $\eta_{\text{máx}}$ cuya elección se detallará en el próximo capítulo. En el caso de que $\eta_T < \eta_{\text{máx}}$ el modelo procederá a realizar una nueva integración temporal con un nuevo Δt^{n+1} calculado como:

$$\Delta t^{n+1} = \Delta t^n \sqrt[3]{L \frac{\eta_{\text{máx}}}{\eta_T}}, \quad (3.34)$$

donde L es un factor de seguridad inferior a la unidad. En el modelo desarrollado se ha decidido establecer $L = 0.8$, tras haber realizado pruebas con distintos valores. En el caso de que $\eta_T > \eta_{\text{máx}}$, la solución \mathbf{U}^{n+1} es rechazada y calculada nuevamente con un paso de tiempo más pequeño determinado por:

$$\Delta t_{\text{new}}^n = \Delta t_{\text{old}}^n \sqrt[3]{L \frac{\eta_{\text{máx}}}{\eta_T}}. \quad (3.35)$$

Al utilizar paso de tiempo adaptativo, se consigue capturar la solución con precisión en intervalos temporales en los cuales ésta presenta grandes variaciones, como en los instantes iniciales y finales, manteniendo al mismo tiempo un coste computacional reducido.

Capítulo 4

Resultados y validación.

En este capítulo se validan diferentes aspectos del modelo desarrollado, tales como la implementación de los métodos de discretización espacial y temporal utilizados, así como la correcta aplicación de las condiciones de acoplamiento. Finalmente, se realiza una validación del modelo de evaporación de gotas en su conjunto mediante comparación con un modelo semi-analítico.

4.1. Validación de los métodos de discretización.

Debido a que el modelo de evaporación de gotas desarrollado resuelve un problema de convección-difusión, se plantea una primera validación mediante el problema de convección-difusión monofásico y escalar:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial(r^2 f)}{\partial r} = Q, \quad (4.1)$$

donde $f = a(r)u - \epsilon(u)\partial u/\partial r$, $a(r) = 0.1r$ es la velocidad, $\epsilon(u) = 0.01 + 0.01u$ es el coeficiente de difusión y $Q = Q(r, t)$ es un término fuente cuya expresión se obtiene al imponer una solución conocida $u(r, t)$. En ese caso, la formulación débil queda como:

$$\frac{d}{dt} \int_{K(t)} u \psi \omega \, dr = \int_{K(t)} f^* \frac{\partial \psi}{\partial r} \omega \, dr + \tilde{f}_w^K \psi(r_w^K) \omega(r_w^K) - \tilde{f}_e^K \psi(r_e^K) \omega(r_e^K) + \int_K Q \psi \omega \, dr. \quad (4.2)$$

Una vez se ha resuelto numéricamente este problema mediante las discretizaciones expuestas en el capítulo anterior, se puede calcular el error de la solución en la norma L^2 :

$$e_{L^2} = \|u - u_h\|_{L^2(\Omega)} = \left[\int_{\Omega} |u - u_h|^2 \, d\Omega \right]^{1/2} \quad (4.3)$$

donde u_h es la solución numérica y u es la solución teórica. La convergencia de este error L^2 es el que permitirá validar la implementación de los métodos. Es decir, si la convergencia de este error se comporta según las expectativas de los métodos de discretización, se validaría la implementación de estos. Este error debe converger como:

$$e_{L^2} = O(h^{p+1}) + O(\Delta t^3) \quad (4.4)$$

donde h es el tamaño del elemento y p es el grado de los polinomios de Legendre (véase Ec. (3.1)). A continuación, se van a estudiar los comportamientos del error L^2 frente a Δt y frente al tamaño de los elementos h .

En primer lugar, se considera $u(r, t) = 2.0 + \sin(\omega t) \cos(\lambda r)$, con $\omega = \pi/4$ y $\lambda = 2\pi$, en el dominio $[0, 1]$ y condiciones de contorno Dirichlet, y se establece $M = 50$ y $p = 3$ para que el error espacial sea despreciable. Además, se impondrá una velocidad en los nodos de la malla dada por $v_m(r_i) = 0.4(r_i - r_i^2)$. A continuación, se resolverá la ecuación para distintos Δt y se representará el error e_{L^2} obtenido en cada simulación.

Como se puede ver en la Fig. 4.1, el comportamiento de e_{L^2} frente a Δt representado en escala logarítmica es muy cercano a ser lineal con pendiente positiva 3, en buen acuerdo con la Ec. (4.4). Se muestra aquí un único caso de los muchos que se han explorado, en los cuales se ha observado el

mismo comportamiento de e_{L^2} . Gracias a ello se puede afirmar que el método EIN-RK (es decir, la discretización temporal) para el problema de convección-difusión está implementado correctamente.

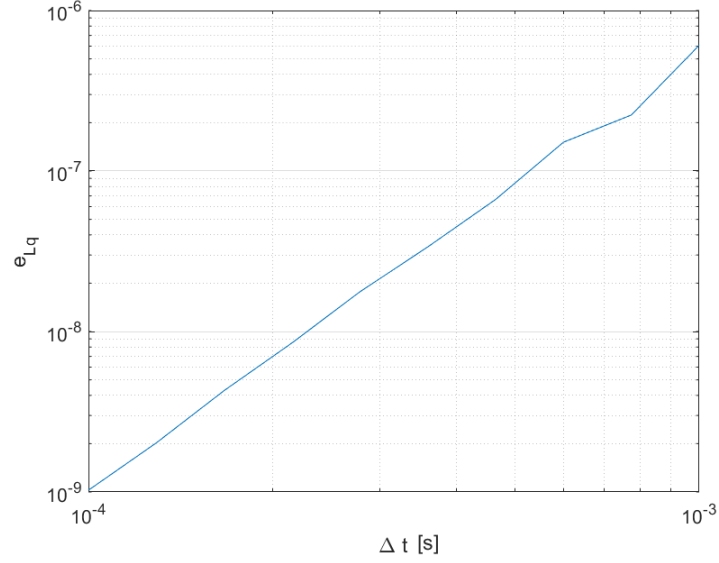


Figura 4.1: Representación en escala logarítmica del error e_{L^2} frente a Δt .

En segundo lugar, se considera $u(r, t) = 2.0 + \sin(\omega t) \cos(\lambda r)$, con $\omega = \pi/2$ y $\lambda = 4\pi$, en el dominio $[0, 1]$ y condiciones de contorno Dirichlet, y se establece $\Delta t = 10^{-5} s$ para que el error temporal sea despreciable. A continuación, se resuelve la ecuación para distintos M con $p = 4$ y se representa el error e_{L^2} obtenido en cada simulación.

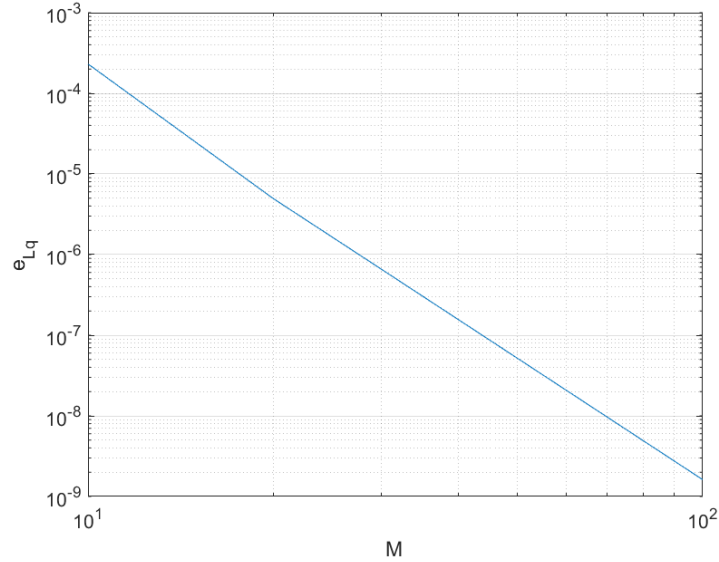


Figura 4.2: Representación en escala logarítmica del error e_{L^2} frente al número de elementos M .

Debido a la relación inversamente lineal de h y M , se puede deducir que la dependencia de $\log_{10}(e_{L^2})$ frente a $\log_{10}(h)$ es lineal con pendiente positiva $p + 1$, en buen acuerdo con Ec. (4.4). Por lo tanto, se puede afirmar que el método DG-ALE (es decir, la discretización espacial) está implementado correctamente para el problema de convección-difusión.

4.2. Validación de las condiciones de acoplamiento.

Una vez se ha validado la implementación de los métodos de discretización en un problema de convección-difusión se debe validar el cálculo de las condiciones de contorno del mismo. Como se ha comentado en anteriores capítulos encontramos tres puntos del dominio donde se deben imponer unas condiciones de contorno: en el centro de la gota ($r = 0$), en la interfase ($r = a$) y en la lejanía del dominio ($r \rightarrow \infty$).

En el primero de estos puntos es indiferente la condición de contorno que impongamos, ya que el flujo en esta primera cara del dominio será nulo debido a la geometría esférica del problema. Mientras que en $r \rightarrow \infty$ se imponen condiciones de contorno tipo Dirichlet, tal y como muestran las Ecs. (2.20)–(2.21). La simulación de múltiples casos muestra que estos valores impuestos se mantienen perfectamente constantes.

Por otro lado, para comprobar la correcta implementación de las condiciones de acoplamiento entre fases se debe demostrar que se cumple:

- La conservación de especies y energía (2.24) y (2.25).
- La igualdad de temperaturas en la interfase (2.26).
- La condición de equilibrio termodinámico (2.28).

Esta comprobación se realizará para el caso de una gota de etanol de $500\mu m$ de diámetro a $300K$ evaporando en un ambiente de N_2 a $1000K$. A continuación se muestra la evolución temporal de las diferencias encontradas entre la energía total del sistema (E_T) y la energía total del sistema en $t=0$ ($E_{T,t=0}$), es importante recordar que la condición inicial viene dada por el Anexo A:

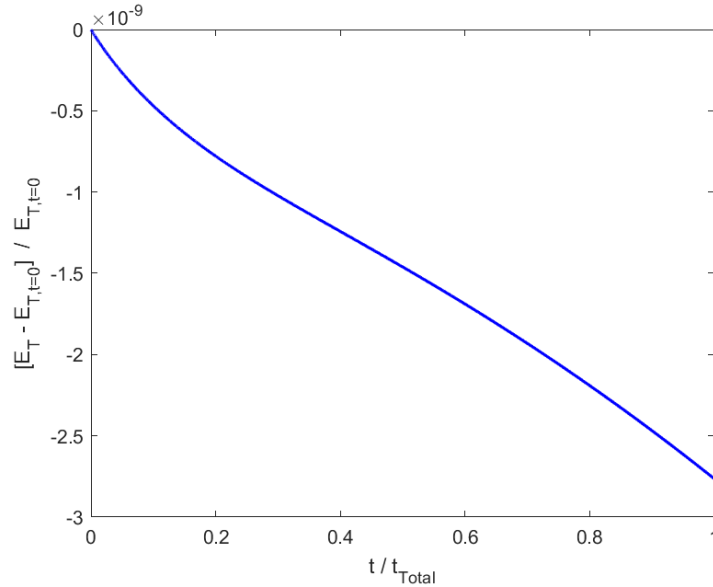


Figura 4.3: Representación de la evolución de la diferencia de energía del sistema respecto a la inicial a lo largo del tiempo.

Como se puede apreciar las diferencias de energía respecto a la energía del sistema inicial son despreciables, por lo que se puede concluir que se cumple la conservación de energía. A continuación se representa la evolución de las diferencias encontradas entre masa de cada especie (M_{et} y M_{N_2}) y la masa inicial de dicha especie ($M_{et,t=0}$ y $M_{N_2,t=0}$).

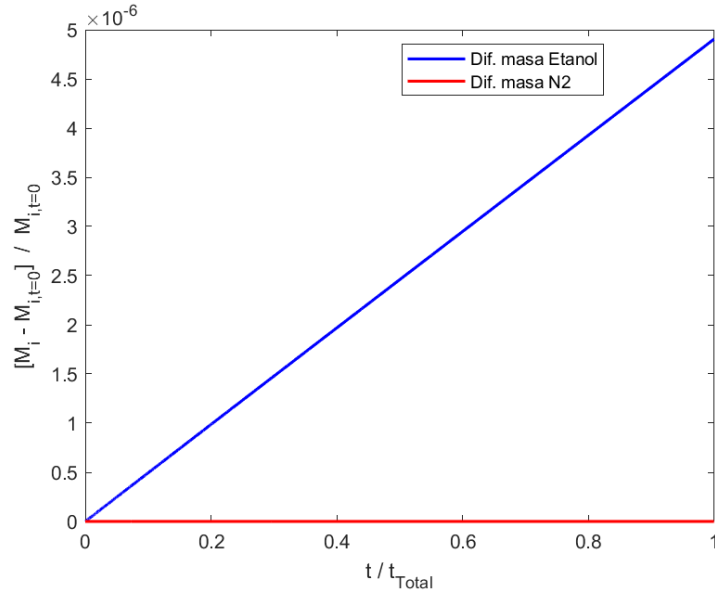


Figura 4.4: Representación de la evolución de la diferencia de masa de cada especie respecto a la inicial a lo largo del tiempo.

Como se puede observar las diferencias de masa del etanol son mucho mayores, esto se debe a que la cantidad de etanol en el dominio es mucho menor que la cantidad de N_2 , por ello las diferencias respecto a la masa inicial son más pronunciadas. En cualquier caso, la diferencia de la masa de cada especie frente a su cantidad de masa inicial son despreciables, por lo tanto se puede afirmar que se conserva la masa.

Por otro lado, es necesario comprobar que en la última cara de la fase líquida se tiene la misma temperatura que en la primera cara de la fase gaseosa, es decir, se debe comprobar que se cumple la continuidad de temperatura en la interfase. Para ello se mostrará la diferencia entre las temperaturas de cada fase en este punto a lo largo del tiempo.

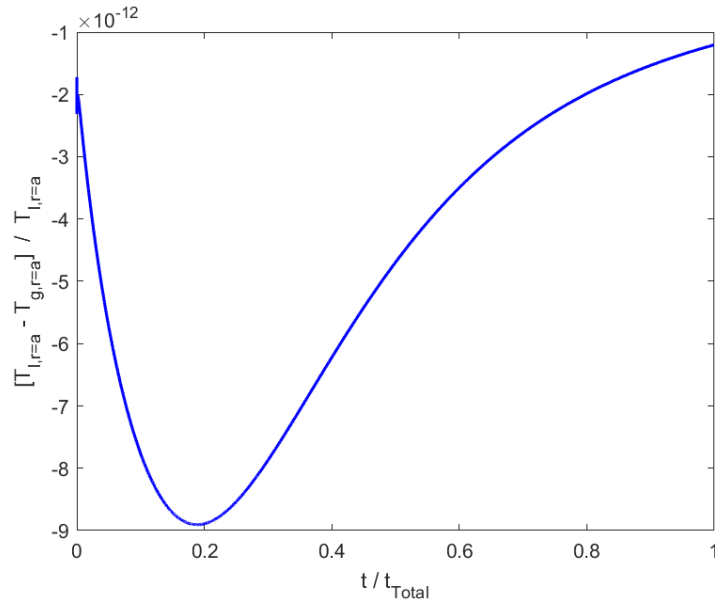


Figura 4.5: Representación de la evolución de la diferencia entre la temperatura de cada fase en la interfase a lo largo del tiempo.

Es evidente que las diferencias entre las temperaturas de cada fase en este punto son despreciables.

Por último se debe verificar que el equilibrio termodinámico se cumple en cualquier instante temporal, es decir, que $P_{v,i} = P_{\text{Total}}X_{g,i}$. Con el fin de mostrar el cumplimiento de esta igualdad se muestra a continuación la diferencia entre los dos lados de la ecuación.

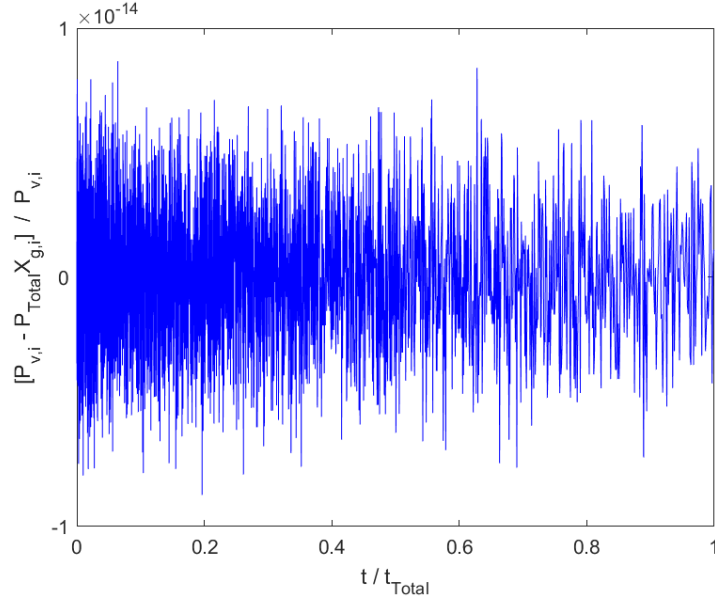


Figura 4.6: Representación de la evolución de la diferencia entre los dos lados de la ecuación de equilibrio termodinámico líquido-vapor a lo largo del tiempo.

En la figura se puede observar que las diferencias entre los dos lados de la ecuación son totalmente despreciables. Por consiguiente, se verifica que existe equilibrio termodinámico líquido-vapor en la interfase en todo instante temporal. Con todo ello, al comprobar el cumplimiento de todos los puntos anteriormente mencionados se puede confirmar que las condiciones de acoplamiento han sido correctamente implementadas.

4.3. Determinación del $\eta_{\text{máx}}$ y el número de elementos M .

En primer lugar se debe establecer el valor del término que determina el Δt en cada instante temporal. Este término es el denominado $\eta_{\text{máx}}$, cuya influencia en el Δt ha sido explicado en profundidad en el capítulo anterior en las Ecs. (3.34) y (3.35). Se han realizado diversas simulaciones con distintos $\eta_{\text{máx}}$ con el objetivo de determinar el valor óptimo de este. Se considerará como valor óptimo aquél cuya reducción no consiga variaciones por encima del 0.1 % en términos del tiempo de consumo de la gota. Los resultados presentados en la Fig. 4.7 corresponden a las simulaciones de una gota de etanol de $500\mu\text{m}$ de diámetro que se encuentra inicialmente a 300K evaporando en un ambiente de N_2 a 1000K .

De acuerdo con la figura 4.7 se observa que las diferencias entre los resultados obtenidos en cuanto al tiempo de consumo con los valores de $\eta_{\text{máx}} = 10^{-4}$ y $\eta_{\text{máx}} = 10^{-5}$ son mayores al 0.1 %, sin embargo, las diferencias que se encuentran entre $\eta_{\text{máx}} = 10^{-5}$ y $\eta_{\text{máx}} = 10^{-6}$ son menores al 0.1 %. Por lo tanto, el valor seleccionado para realizar las simulaciones de validación será $\eta_{\text{máx}} = 10^{-5}$.

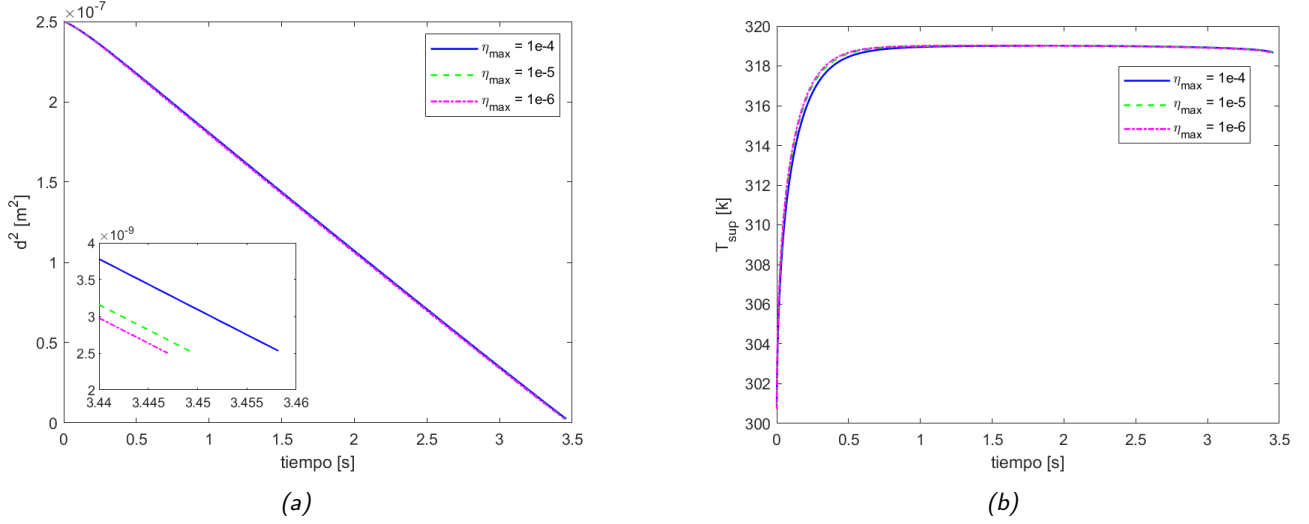


Figura 4.7: Diámetro de la gota al cuadrado frente al tiempo **(a)** y temperatura de la superficie de la gota frente al tiempo **(b)** para distintos valores del parámetro $\eta_{\text{máx}}$.

Por otro lado, se debe establecer el número óptimo de elementos que conforman las mallas para realizar las validaciones. Se utilizarán nuevamente las consideraciones anteriores para determinar el valor óptimo, es decir, se considerará que el número de elementos óptimo es aquel cuyo aumento no consiga variar el tiempo de consumo de la gota en más de un 0.1 %. Debido a la existencia de dos mallas distintas (una para el líquido, otra para el gas) se han realizado múltiples simulaciones. A continuación, en las figuras (4.8a) y (4.8b) se muestran las tres simulaciones más relevantes.

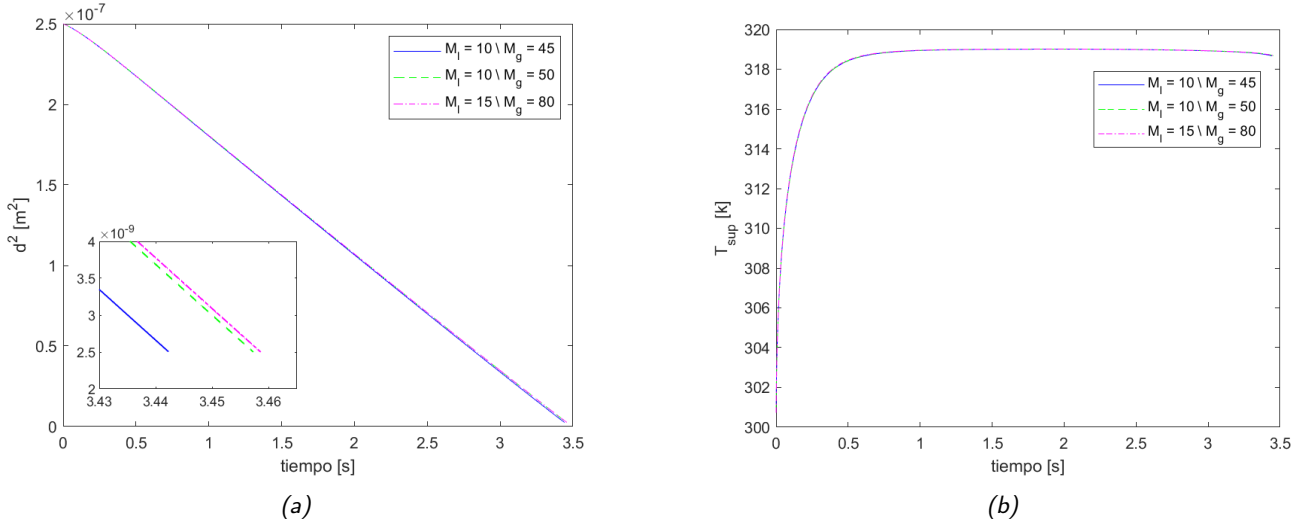


Figura 4.8: Diámetro de la gota al cuadrado frente al tiempo **(a)** y temperatura de la superficie de la gota frente al tiempo **(b)** para distinto número de elementos M para líquido y gas con $p = 6$.

Las figuras mostradas permiten ver que las diferencias entre los resultados en cuanto al tiempo de consumo con $(M_l = 10 \text{ y } M_g = 45)$ y $(M_l = 10 \text{ y } M_g = 55)$ son mayores al 0.1 %. En cambio, las diferencias que se encuentran entre $(M_l = 10 \text{ y } M_g = 55)$ y $(M_l = 15 \text{ y } M_g = 80)$ son menores al 0.1 %, por lo que se establecerá $M_l = 10$ y $M_g = 55$ (y $p = 6$) para realizar las simulaciones de validación.

4.4. Validación del modelo con un modelo analítico.

Tras haber validado la correcta implementación de los distintos métodos de discretización y de las condiciones de acoplamiento se procede a validar el modelo en su conjunto. Para ello se compararán los resultados obtenidos por este modelo con los resultados obtenidos por un modelo semi-analítico de evaporación de gotas, detallado en [21]. Este modelo resuelve la fase gas de forma analítica, mediante la suposición de que ésta se encuentra en estado cuasi-estacionario, hipótesis habitual en gran cantidad de modelos analíticos, y que consiste en despreciar los términos temporales en las Ecs. (2.2), (2.3) y (2.5). Por otro lado, la fase líquida se resuelve mediante un esquema numérico transitorio de elementos finitos. Como puede comprobarse en [21], los cálculos con este modelo semi-analítico muestran un alto grado de coincidencia con resultados experimentales. Por tanto, un buen acuerdo con respecto a este modelo serviría para validar el buen funcionamiento de la herramienta desarrollada en este trabajo.

Para esta validación se ha empleado nuevamente el caso de referencia utilizado en el apartado anterior: una gota de etanol de $500\mu\text{m}$ de diámetro que se encuentra inicialmente a 300K evaporando en un ambiente de N_2 a 1000K . Estas simulaciones se han realizado con propiedades constantes en ambas fases. Tanto en el modelo aquí desarrollado como en el modelo semi-analítico se han establecido las mismas propiedades. Los resultados obtenidos por ambos modelos para este caso se muestran en la Fig. 4.9, donde se presentan la evolución temporal del tamaño de la gota (a), así como del flujo másico evaporado (b).

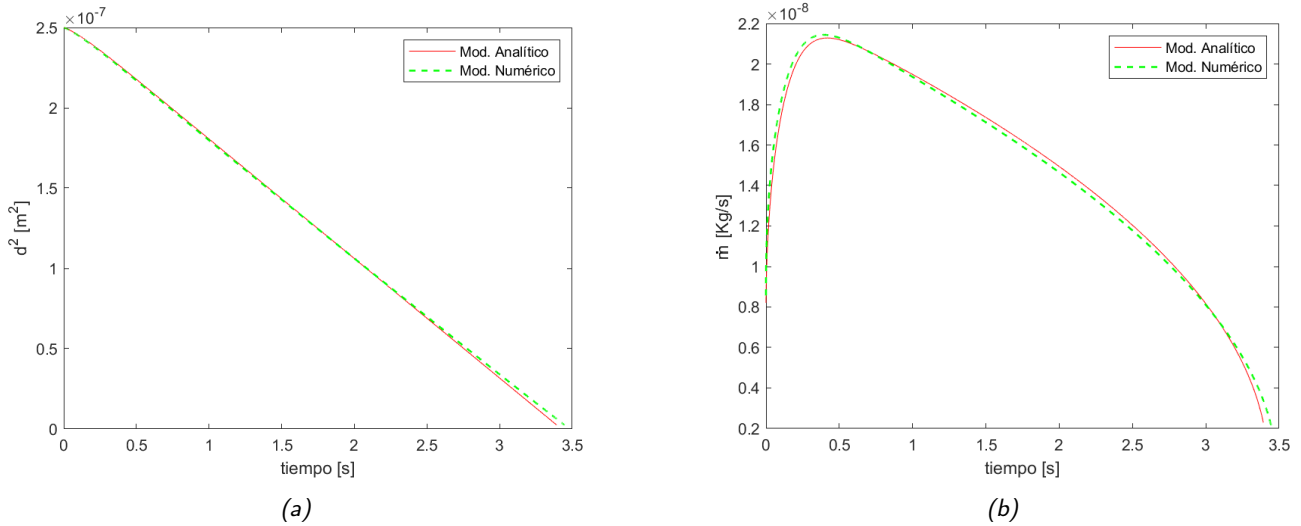


Figura 4.9: Diámetro de la gota al cuadrado frente al tiempo (a) y flujo másico evaporado frente al tiempo (b). El "Mod. Analítico" está descrito en [21] y el "Mod. Numérico" es el desarrollado en este trabajo.

En la Fig. 4.9 se puede observar un muy buen acuerdo entre ambos modelos, demostrando el buen funcionamiento de la herramienta desarrollada en el presente trabajo. El modelo numérico logra capturar perfectamente el comportamiento evaporativo de la gota de etanol, tanto en términos de la evolución del tamaño de la gota como de su gasto másico. Las diferencias en los tiempos de consumo de la gota con ambos modelos se estiman en alrededor del 1 %. Estas pequeñas discrepancias se atribuyen a diferencias en las distintas hipótesis empleadas en el desarrollo de ambos modelos. Mientras que en el modelo semi-analítico se supone la fase gas en estado cuasi-estacionario, esta simplificación no existe en el modelo numérico desarrollado aquí, que resuelve esta fase de forma transitoria (ver términos temporales en Ecs. (2.2), (2.3) y (2.5)). En [22] se evalúa la importancia de estos términos, concluyendo que su inclusión acelera la evaporación en los primeros instantes de vida de la gota, ralentizándose sin embargo en la fase final. Estas observaciones coinciden plenamente con las diferencias entre modelos en la Fig. 4.9, por lo que se puede afirmar que estas pequeñas desviaciones vienen causadas por un

modelaje más completo del proceso físico en la herramienta aquí desarrollada, al incluir estos efectos transitorios en la fase gas.

Capítulo 5

Conclusiones y trabajo futuro.

5.1. Conclusiones.

Revisando los objetivos específicos propuestos en el apartado 1.3, se puede concluir que en el presente TFG han alcanzado con todos ellos. Como resultado, se ha implementado un método Galerkin Discontinuo (DG) para la simulación numérica del fenómeno de evaporación de gotas. Debido a la complejidad de esta implementación, se ha realizado un esfuerzo importante en conocer y entender en profundidad el funcionamiento de este método, que presenta considerables ventajas respecto a otros métodos más convencionales. Entre las ventajas de mayor relevancia para esta aplicación se pueden destacar la gran precisión del método, siendo además un método conservativo. En cuanto a la discretización temporal del problema, se ha implementado un método EIN-RK (Explicit-Implicit-Null Runge-Kutta). Si bien se trata de un método relativamente poco conocido, se considera muy útil para la integración temporal del problema de evaporación de gotas, al permitir la descomposición del problema en dos términos: una parte no lineal y rígida (integrada explícitamente) y otra lineal y rígida (integrada de forma implícita). Tras su implementación, se han podido constatar las importantes ventajas que aporta, reduciendo el coste computacional de las simulaciones realizadas sin comprometer la estabilidad del algoritmo.

Estos métodos han sido implementados en Matlab y se han sometido a una serie de ejercicios de validación. En primer lugar, se han validado para un problema de convección-difusión escalar, obteniendo una convergencia del error entre las soluciones numérica y teórica que ha permitido confirmar que la implementación de estos métodos de discretización es correcta. También, se ha realizado una validación específica de las condiciones de acoplamiento entre las fases líquido y gas para el problema de evaporación de una gota. Al modelar un proceso multifásico, es necesario establecer unas condiciones que se deben cumplir en la interfase entre ambos medios, basadas, en la conservación de energía y masa, además de existir equilibrio termodinámico y continuidad de la temperatura. Implementar estas condiciones de acoplamiento en el modelo es una tarea compleja, ya que implica resolver un sistema de ecuaciones no lineales cuya dependencia con las variables estudiadas no es simple. Como se ha demostrado, la validación de estas condiciones de acoplamiento se ha realizado exitosamente.

Tras comprobar el buen funcionamiento de los métodos de discretización y de las condiciones de acoplamiento en la interfase, se ha realizado un estudio específico para fijar una discretización espacial y temporal adecuada para un primer caso de estudio completo, consistente en simular la evaporación de una gota de etanol en un ambiente de N_2 a una temperatura de $1000K$. Una vez establecidos los criterios para fijar este mallado temporal y espacial, se ha realizado una validación completa del proceso de evaporación de la gota bajo dichas condiciones, mediante la comparación de los resultados del modelo con los generados por un modelo semi-analítico. Las mínimas diferencias encontradas entre ambos métodos ha permitido validar satisfactoriamente la herramienta numérica desarrollada en este trabajo.

En conclusión, se han completado exitosamente todos los objetivos planteados para este trabajo, desarrollando y validando un modelo numérico de evaporación de gotas que servirá de base para futuros estudios y ampliaciones dentro del grupo de investigación donde se ha realizado el TFG.

5.2. Trabajo futuro.

Como se ha comentado anteriormente, el modelo desarrollado en este TFG constituye la base para realizar en un futuro cercano diversas ampliaciones, que lo convertirán en una herramienta aún más potente. Durante el desarrollo de este modelo siempre se han tenido presentes estas futuras ampliaciones, por lo que el código desarrollado está orientado hacia la fácil implementación de las mismas. En particular, se plantean las siguientes líneas de trabajo futuro.

- Flexibilizar el código para simular propiedades termofísicas no constantes. Esta es la primera ampliación prevista, ya el código desarrollado está claramente orientado a la consideración de propiedades variables.
- Habilitar la posibilidad de simular gotas multicomponentes. La implementación de esta ampliación no debería ser especialmente compleja, ya que el modelo actual es capaz de simular la fase gas como una mezcla de varios compuestos. En principio, debería ser suficiente con trasladar esta característica a la fase líquida.
- Considerar reacciones químicas en la fase gas, ya sean reacciones exotérmicas de combustión o endotérmicas de pirólisis. Se prevé que esta ampliación conlleve una mayor complejidad, ya que se deberá realizar un estudio de los mecanismos de reacción involucrados en procesos de combustión.
- Realizar tareas de optimización del código desarrollado. Reducir el coste computacional del modelo aumentaría el potencial de esta herramienta, especialmente cuando se plantee la simulación de casos multicomponente con reacción química que previsiblemente aumentarán significativamente el tiempo de cálculo.

Bibliografía

- [1] K. Luo, C. Shao, M. Chai, and J. Fan, "Level set method for atomization and evaporation simulations", *Progress in Energy and Combustion Science*, 73(2019), 65–94.
- [2] H. Hu and R. G. Larson, "Analysis of the microfluid flow in an evaporating sessile droplet", *Langmuir* 21(9) (2005), 3963–3971.
- [3] A. Millán-Merino, "Theoretical and numerical analysis of isolated ethanol droplets: evaporation and combustion", *Tesis Doctoral* (2020), Universidad Carlos III de Madrid.
- [4] P. A. Strizhak, R. S. Volkov, and A. O. Zhdanova, "Numerical simulation of water and water emulsion droplets evaporation in flames with different temperatures", *IV International Conference on Particle-based Methods* (2020), 991–997.
- [5] J.D. Hoffman and S. Frankel, "Numerical methods for engineers and scientists", 2018, CRC Press, Taylor and Francis, Nueva York (USA).
- [6] V. Dolejšti and F. Miloslav, "Discontinuous Galerkin Method: Analysis and Applications to Compressible Flow", 2015, SIP, Berlin(Alemania).
- [7] H. Zhao and F. Nadal, "Droplet evaporation in inert gases", *Journal of Fluid Mechanics*, 958(2023), A18.
- [8] U.M. Ascher, S.J. Ruuth and R.J. Spiteri, "Implicit-explicit Runge-Kutta methods for time-dependent partial differential equations", *Applied Numerical Mathematics*, 25(1997), 151-167.
- [9] M. Tan, J. Cheng and C. Shu, "Stability of high order finite difference and local discontinuous Galerkin schemes with explicit-implicit-null time-marching for high order dissipative and dispersive equations", *Journal of Computational Physics*, 464(2022), 111-314.
- [10] A. Yozgatligil, "Burning and Sooting Behavior of Ethanol Droplet Combustion under Microgravity Conditions", *Tesis Doctoral* (2005), Drexel University.
- [11] A. Liñan, "Theory of Droplet Vaporization and Combustion", 1985, Madrid(España).
- [12] S.R. Turns, "An introduction to combustion. Concepts and applications", 2000, McGraw-Hill, Inglaterra.
- [13] B. J. McBride, M. J. Zehe, and S. Gordon, "NASA Glenn coefficients for calculating thermodynamic properties of individual species", Report No. 20020085330, Glenn Research Center, Cleveland USA, 2002.
- [14] D.F. Fairbanks and C.R. Wike, "Diffusion Coefficients in Multicomponent Gas Mixtures", *Industrial & Engineering Chemistry*, 42(1950), 471-475.
- [15] R.J. Kee, M.E. Coltrin and P. "Chemically Reacting Flow, Theory and Practice", 2003, A John Wiley and Sons Publication, Nueva Jersey (USA).
- [16] NIST Chemistry Webbook 2024. Accedido en Junio de 2024, disponible en: <http://webbook.nist.gov/>.
- [17] W. Green and R.H. Perry, "Perry's Chemical Engineers' Handbook, Eighth Edition", 2008, McGraw-Hill, Inglaterra.
- [18] J.L. Kelley, "General Topology", 2017, Dover Publications, California(USA).
- [19] Wolfram Mathworld: Legendre Polynomial. Accedido en Junio de 2024, disponible en: <https://mathworld.wolfram.com/LegendrePolynomial.html>.
- [20] E. Hairer and G. Wanner, "Solving Ordinary Differential Equations II", 1991, Springer, Berlin (Alemania).
- [21] A. Muelas, "Experimental characterization and modeling of liquid fuel combustion. From pure compounds to real fuels.", *Tesis Doctoral* (2021), Universidad de Zaragoza.
- [22] J. Finneran and C.P. Garner, "Deviations from classical droplet evaporation theory", *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 477(2021), 20210078.

Anexos

Anexo A

Condiciones iniciales.

Para el cálculo de las condiciones iniciales se hace uso de ecuaciones integradas analíticamente para la fase gas, que pueden encontrarse en [11] y [21]. En primer lugar conociendo la temperatura inicial de la gota $T_{r=0}$ se puede calcular la presión de vapor del combustible y con ello la fracción másica de combustible en la interfase en el instante inicial, $Y_{g,1}|_{r=a}$. Con ello y las condiciones ambientales se obtiene un sistema de ecuaciones del cual podemos obtener el flujo másico evaporado \dot{m} y el calor sensible $\dot{q}_{sensible}$ como:

$$\begin{aligned}\dot{m} &= 4 \pi a \rho_g D_{g,1} \ln \left(1 + \frac{Y_{g,1}|_{r=a} - Y_{g,1}|_{r=\infty}}{1 - Y_{g,1}|_{r=a}} \right) \\ \dot{m} &= 4 \pi a \frac{k_g}{c_p} \ln \left(1 + \frac{c_p (T_\infty - T_{r=a})}{L_v + \dot{q}_{sensible}/\dot{m}} \right)\end{aligned}$$

donde L_v es el calor latente de vaporización. Una vez conocemos el flujo másico de combustible evaporado podemos obtener el calor latente de la siguiente manera:

$$\dot{q}_{latente} = \dot{m} L_v.$$

Posteriormente se puede obtener el calor total entrante a la gota como: $\dot{q}_{total} = \dot{q}_{sensible} + \dot{q}_{latente}$. Tras el cálculo de estos flujos de energía, podemos obtener los perfiles de temperatura y composición en la fase gas del combustible como [11]:

$$\begin{aligned}Y_{g,1}(r) &= 1 - (1 - Y_{g,1}|_{r=\infty}) \exp \left(\frac{-\dot{m}}{\rho_g D_{g,1} r} \right) \\ T_g(r) &= T_{r=a} - \frac{L'}{c_p} + \left(T_\infty - T_{r=a} + \frac{L'}{c_p} \right) \exp \left(\frac{-\dot{m} c_p}{k_g r} \right)\end{aligned}$$

donde $L' = L_v + \dot{q}_{sensible}/\dot{m}$. Por último, conociendo el $\dot{q}_{sensible}$ sabemos el valor de $\partial T/\partial r$ en $r = a$ en la fase líquida ya que:

$$q_{sensible} = k_l \left. \frac{\partial T}{\partial r} \right|_{r=a^-}.$$

Sabiendo este valor de $\partial T/\partial r$ se ajusta el perfil de temperaturas en la fase líquida mediante una función exponencial:

$$T_l(r) = A + B r + C \exp(D r)$$

la cual es forzada a cumplir las siguientes condiciones:

- $\partial T/\partial r|_{r=a} = \dot{q}_{sensible}/k_l$.
- $T_l|_{r=a} = T_g|_{r=a}$.
- $\partial T/\partial r|_{r=0} = 0$.
- $T_l|_{r=0} = T_{r=0}$.

Por último, se debe recordar que la gota es monocomponente por lo que el perfil de composición en la fase líquida queda: $Y_{l,1}(r) = 1$.