

CONTRASTACIÓN DE MODELOS PARA COMBUSTIÓN PREMEZCLADA EN APLICACIONES DE MOTORES DE COMBUSTIÓN INTERNA

Ezequiel J. López¹, Horacio J. Aguerre², César I. Pairetti³,
Santiago Márquez Damián⁴, Juan M. Giménez⁵, Norberto M. Nigro⁶

1-Dpto. de Mecánica Aplicada, Facultad de Ingeniería,
Universidad Nacional del Comahue, Buenos Aires 1400, Neuquén, Argentina.
ezequiel.lopez@fain.uncoma.edu.ar

2-Centro de Investigación en Métodos Computacionales,
Universidad Nacional del Litoral-CONICET, Predio CONICET "Dr. Alberto Cassano",
Colectora RN 168 s/n – Paraje El Pozo, Santa Fe, Argentina.
aguerrehoracio@gmail.com

3-Escuela de Ingeniería Mecánica,
Universidad Nacional de Rosario, Berutti 2109, Rosario, Argentina.
paire.cesar@gmail.com

4-Centro de Investigación en Métodos Computacionales,
Universidad Nacional del Litoral-CONICET, Predio CONICET "Dr. Alberto Cassano",
Colectora RN 168 s/n – Paraje El Pozo, Santa Fe, Argentina.
santiagomarquez@gmail.com

5-Centro de Investigación en Métodos Computacionales,
Universidad Nacional del Litoral-CONICET, Predio CONICET "Dr. Alberto Cassano",
Colectora RN 168 s/n – Paraje El Pozo, Santa Fe, Argentina.
jmarcelogimenez@gmail.com

6-Centro de Investigación en Métodos Computacionales,
Universidad Nacional del Litoral-CONICET, Predio CONICET "Dr. Alberto Cassano",
Colectora RN 168 s/n – Paraje El Pozo, Santa Fe, Argentina.
norberto.nigro@cimec.santafe-conicet.gov.ar

Palabras clave: Combustión Premezclada, *Extendend Coherent Flame Model*, Dinámica de Fluidos Computacional, OpenFOAM®.

Resumen

El empleo de la Dinámica de Fluidos Computacional (CFD, por *Computational Fluid Dynamics*) se ha constituido actualmente en una etapa ineludible para el análisis detallado del flujo de gas dentro de los motores de combustión interna, tanto en el diseño como en su optimización, con el objetivo de aumentar rendimiento, prestaciones y reducir emisiones. La combustión es uno de los procesos más importantes relacionados con estos objetivos, requiriendo por lo tanto de modelos lo más robustos y precisos posible. Además, dado que la combustión en un motor de combustión interna se desarrolla en régimen turbulento, la modelación de la turbulencia y su interacción con el proceso de combustión son aspectos que deben considerarse en conjunto.

En este trabajo se presentan resultados de la implementación de una librería de modelos para combustión premezclada en la suite OpenFOAM® integrada a un *solver* para flujo compresible. En particular, los modelos implementados corresponden a propuestas disponibles en la literatura donde se utiliza el concepto de *flamelet* para describir el frente de llama y una ecuación de transporte para la Densidad de Superficie de Llama (FSD, por *Flame Surface Density*), conocidos como modelos de combustión ECFM (*Extendend*

Coherent Flame Model). La ecuación para la FSD se resuelve en conjunto con una ecuación de transporte adicional para una variable de progreso de la combustión, además de las correspondientes ecuaciones de continuidad, momento y energía. La modelización de la turbulencia se realiza mediante modelos tipo RANS (*Reynolds-Average Navier-Stokes*), la cual es una hipótesis en el planteamiento de los modelos implementados. Por otro lado, se considera que la química del problema está representada por una ecuación irreversible de un paso, tornando a la variable de progreso de la combustión en un indicador de la generación de productos de la reacción. El encendido se resuelve, como primera aproximación, mediante la imposición de un valor para la FSD que surge de considerar un frente de llama esférico de un radio predeterminado en el momento y lugar de la ignición.

Los modelos implementados se comparan en primer lugar en una bomba de combustión cúbica con turbulencia congelada y donde el encendido de la mezcla se produce en el centro de la misma. Luego se los aplica a un motor de combustión interna alternativo con cámara de combustión tipo *pent-roof*.

1. Introducción

La aplicación de la Dinámica de Fluidos Computacional (CFD, por *Computational Fluid Dynamics*) avanza en forma sostenida abarcando los más diversos ámbitos de la ingeniería debido, por un lado al desarrollo de nuevos modelos y métodos numéricos y, por otro, a los avances en cuanto a la disponibilidad de software y capacidades de cómputo. Uno de estos campos lo constituye el estudio del flujo de gas dentro de motores de combustión interna, dada la búsqueda de nuevas tecnologías que permitan la mejora del rendimiento y la disminución de emisiones contaminantes. En relación a este objetivo, el proceso de combustión es uno de los más importantes experimentados por el gas a través del ciclo operativo y, además, su modelación presenta un desafío considerable por la complejidad originada en el fuerte acoplamiento de los campos de flujo y la existencia de un vasto rango de escalas espaciales y temporales.

En la literatura específica del tema se han propuesto una gran cantidad de modelos para diversos tipos de combustión y basados en diferentes enfoques. Particularmente en relación a la simulación de la combustión en motores encendidos por chispa operando en condiciones de altas cargas y velocidades intermedias es posible asumir que la combustión es premezclada y que el frente de llama se compone de *flamelets*. Bajo esta hipótesis, se supone que el espesor del frente de llama es despreciable y, localmente, el mismo preserva su estructura laminar. Por lo tanto, la llama se compone de una colección de *flamelets* y el efecto de la turbulencia es arrugar y estirar la llama, incrementando el área de su superficie. Un modelo para combustión turbulenta premezclada que resulta muy interesante para su aplicación a casos de motores es el ECFM (*Extendend Coherent Flame Model*), también conocido como de Densidad de Superficie de Llama (FSD, por *Flame Surface Density*), dada las posibilidades que el mismo posee para ser aplicado en los regímenes de combustión corrugado y arrugado (*corrugated and wrinkled flamelet regimes*) hasta bien entrado el régimen de zonas delgadas de reacción (*thin reaction zones regime*) [1]. Se han propuesto en la literatura tanto modelos algebraicos como de ecuación de transporte para el cálculo de la FSD. Para este último enfoque y en particular para turbulencia simulada con modelos tipo RANS (*Reynolds-Average Navier-Stokes*), se dispone de varias propuestas, las cuales se diferencian entre si en la forma en que los términos fuente de la ecuación para la FSD son modelados. En base a las consideraciones

anteriores, se procuró disponer de una implementación que emplee una ecuación de transporte para resolver la FSD en conjunto con una ecuación de transporte para una variable de progreso de la combustión y con turbulencia simulada mediante RANS.

El objetivo general en el cual se encuadra el presente trabajo consiste en el desarrollo de una herramienta dentro de la suite OpenFOAM® [2] para la simulación de motores de combustión interna. La distribución oficial de OpenFOAM® contiene el modelo $b - \Xi$ [3] para combustión turbulenta premezclada adaptada a modelos RANS, el cual constituyó la base para la implementación del un nuevo *solver* que emplee el ECFM. Dada las diferentes opciones disponibles en la literatura para modelar los términos fuente de la ecuación de transporte para la FSD, se decidió implementar un *solver* general que invoque a una librería de modelos según elección del usuario en tiempo de ejecución. De este modo, la implementación de un nuevo modelo se realiza de forma muy sencilla dado que sólo deben programarse las expresiones de los términos de producción y destrucción de FSD e integrarlo a la librería implementada. El objetivo del presente trabajo es, por un lado validar la implementación de la librería y, por otro, comparar el desempeño de los distintos modelos cuando se los utiliza en la simulación de motores de combustión interna.

El trabajo se organiza de la siguiente manera. En primer lugar se describen detalladamente las ecuaciones de gobierno del problema y las distintas opciones de modelos implementados para la resolución de la FSD. La siguiente sección presenta los esquemas numéricos utilizados para discretizar las ecuaciones de gobierno. Luego se presentan los resultados, los cuales incluyen la simulación de la combustión en una bomba de combustión cúbica y en un caso de un motor de combustión interna con cámara tipo *pent-roof*. Finalmente, se presentan las conclusiones y propuestas de trabajos futuros.

2. Modelo matemático

Las ecuaciones de gobierno para el flujo de gas corresponden a las ecuaciones de continuidad, momento y energía para un flujo compresible y viscoso. En las mismas se utiliza un promediado de Favre, el cual permite obtener una forma de la ecuación de continuidad para las variables promediadas idéntica a la ecuación sin promediar [1]. Para una variable $\varphi(t)$ genérica el promediado de Favre se define como $\tilde{\varphi} = \frac{\bar{\rho}\bar{\varphi}}{\bar{\rho}}$, donde $\bar{\varphi} = \frac{1}{T} \int_0^T \varphi(t) dt$ indica promedio de Reynolds. Utilizando las convenciones referidas, las ecuaciones pueden escribirse del siguiente modo:

- Ecuación de continuidad

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i) = 0 \quad (1)$$

- Ecuación de conservación de momento

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j) + \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[(\bar{\mu} + \bar{\mu}_t) \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \right) \right] - \frac{2}{3} \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{k}}{\partial x_i} \quad (2)$$

- Ecuación de conservación de la entalpía específica total

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{h}_t}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{h}_t) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\left(\frac{\bar{\lambda}}{c_{p,u}} + \bar{\rho} \tilde{\alpha}_t \right) \frac{\partial \tilde{h}_t}{\partial x_i} \right] = \frac{\partial \bar{p}}{\partial t} \quad (3)$$

- Ecuación de conservación de la entalpía específica para el gas sin quemar

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{h}_u}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{h}_u) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\left(\frac{\bar{\lambda}_u}{c_{p,u}} + \bar{\rho} \tilde{\alpha}_t \right) \frac{\partial \tilde{h}_u}{\partial x_i} \right] = \frac{\bar{\rho}}{\bar{\rho}_u} \frac{\partial \bar{p}}{\partial t} - \frac{\bar{\rho}}{\bar{\rho}_u} \frac{D \bar{\rho} \tilde{K}}{Dt} \quad (4)$$

donde $\bar{\rho}$ es la densidad del fluido, \tilde{u}_i es la i -ésima componente de la velocidad del flujo, \bar{p} es la presión, \tilde{h}_t es la entalpía específica total, \tilde{h}_u es la entalpía específica para el gas sin quemar, \tilde{k} es la energía cinética turbulenta, $\tilde{K} = \frac{1}{2} \tilde{u}_i \tilde{u}_i$ es la energía cinética del flujo medio, $\bar{\mu}$ es la viscosidad dinámica del fluido, $\bar{\lambda}$ es la conductividad térmica del fluido, $c_{p,u}$ es el calor específico a presión constante del gas sin quemar, $\bar{\mu}_t$ es la viscosidad dinámica turbulenta, $\tilde{\alpha}_t$ la difusividad térmica turbulenta y δ_{ij} es el tensor delta de Kronecker. La turbulencia se modela en el presente trabajo mediante el modelo k -epsilon estándar, cuyas ecuaciones pueden hallarse, por ejemplo, en [4]. El gas se asume como ideal.

Se supone también que la reacción química consiste en una ecuación de un único paso e irreversible y que el número de Lewis, el cual relaciona las difusividades térmica y de masa, es unitario. Bajo estas circunstancias, una variable de progreso \tilde{c} de la combustión es suficiente para indicar el grado de avance de la reacción [1]. En la implementación realizada se consideró una ecuación de transporte para la variable de regreso $\tilde{b} = 1 - \tilde{c}$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{b}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{b}) - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\nu_t}{\sigma_b} \frac{\partial \tilde{b}}{\partial x_i} \right) = -\bar{\rho} s_L \Sigma \quad (5)$$

donde $\nu_t = \bar{\mu}_t / \bar{\rho}$ es la viscosidad cinemática turbulenta, σ_b es el número de Schmidt turbulento para \tilde{b} , s_L es la velocidad de llama laminar y Σ representa la FSD. En este trabajo la propuesta es resolver una ecuación de transporte para la FSD. Esta ecuación se puede escribir en forma genérica del siguiente modo [1]:

$$\frac{\partial \Sigma}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\tilde{u}_i \Sigma) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\nu_t}{\sigma_\Sigma} \frac{\partial \Sigma}{\partial x_i} \right) + \kappa_m \Sigma + \kappa_t \Sigma - D \quad (6)$$

donde κ_m y κ_t representan la tasa de deformación actuando sobre la superficie de la llama inducidas por el flujo medio y las fluctuaciones turbulentas, respectivamente, D es un término de destrucción de la FSD, y σ_Σ es el número de Schmidt turbulento para Σ . La ecuación (6) representa la forma general para todos los modelos implementados, diferenciándose los mismos en el modo propuesto para los términos fuente de dicha ecuación. La Tabla 1 presenta las expresiones de estos términos para los distintos modelos implementados.

Tabla 1. Términos fuente propuestos en los distintos modelos para la ecuación de transporte de la FSD.

Modelo	$\kappa_m \Sigma$	$\kappa_t \Sigma$	D	Referencia
CPB	$A_{ik} \frac{\partial \bar{u}_k}{\partial x_i} \Sigma$	$\alpha_0 \alpha \sqrt{\frac{\bar{\varepsilon}}{\nu}} \Sigma$	$\beta_0 s_L \alpha^{2 + \exp(-aR)} \Sigma^2$ $R = \frac{b \bar{\varepsilon}}{s_L k \Sigma}$	Cant et al. [5]
CFM1	$A_{ik} \frac{\partial \bar{u}_k}{\partial x_i} \Sigma$	$\alpha_0 \frac{\bar{\varepsilon}}{k} \Sigma$	$\beta_0 \frac{s_L + c \sqrt{k}}{b} \Sigma^2$	Duclos et al. [6]
CFM2a	$A_{ik} \frac{\partial \bar{u}_k}{\partial x_i} \Sigma$	$\alpha_0 \Gamma_{\bar{K}} \frac{\bar{\varepsilon}}{k} \Sigma$	$\beta_0 \frac{s_L + c \sqrt{k}}{b} \Sigma^2$	Duclos et al. [6]
CFM2b	$A_{ik} \frac{\partial \bar{u}_k}{\partial x_i} \Sigma$	$\alpha_0 \Gamma_{\bar{K}} \frac{\bar{\varepsilon}}{k} \Sigma$	$\beta_0 \frac{s_L + c \sqrt{k}}{b(1-b)} \Sigma^2$	Duclos et al. [6]
CFM3	$A_{ik} \frac{\partial \bar{u}_k}{\partial x_i} \Sigma$	$\alpha_0 \Gamma_{\bar{K}} \frac{\bar{\varepsilon}}{k} \Sigma$	$\beta_0 s_L \frac{b' - \bar{b}}{b(1-b)} \Sigma^2 + s_L \nabla^2 \bar{b}$	Veynante et al. [7]
CD	0	$\alpha_0 \frac{\bar{\varepsilon}}{k} \Sigma$ si $\kappa_t \leq \alpha_0 K_c \frac{s_L}{\delta_t}$	$\beta_0 \frac{s_L \bar{\rho}_u}{\bar{p}} \Sigma^2$	Cheng y Diringer [8]
CH1	0	$\alpha_0 \sqrt{\frac{\bar{\varepsilon}}{15\nu}} \Sigma$	$\beta_0 \frac{s_L}{b(1-b)} \Sigma^2$	Choi y Huh [9]
CH2	0	$\alpha_0 \frac{u}{l_{te}} \Sigma$	$\beta_0 \frac{s_L}{b(1-b)} \Sigma^2$	Choi y Huh [9]

En las expresiones presentadas en la Tabla 1, α_0 , β_0 , a , C , b^* y l_{tc} son constantes de ajuste para los distintos modelos, $\bar{\varepsilon}$ es la disipación de energía cinética turbulenta, $\bar{\nu}$ es la viscosidad cinemática del fluido, $\bar{\rho}_u$ es la densidad del gas sin quemar y $u' \approx \sqrt{\bar{k}}$ es la velocidad turbulenta RMS (*Root-Mean Squared*). Además,

- $A_{ij} = \delta_{ij} - \langle n_i n_j \rangle_s$, siendo n_i la i -ésima componente del versor normal a la superficie del frente de llama y $\langle \cdot \rangle_s$ el operador de promediado a lo largo de la superficie de la llama. El tensor A_{ij} se modela como $A_{ij} = \delta_{ij} - (M_i M_j + 1/3 \delta_{ij} \alpha)$, donde $M_i = \langle n_i \rangle_s = \frac{1}{\Sigma} \frac{\partial \bar{b}}{\partial x_i}$ y $\alpha = 1 - M_i M_i$ es el denominado factor de orientación.
- $\Gamma_{\bar{K}}$ es la función de eficiencia del modelo ITNFS (*Intermittent Turbulent Net Flame Stretch*) que incluye la posibilidad de *quenching* que podría presentarse en el caso de una elevada tasa de *stretch*, dada por la expresión [10]

$$\Gamma_{\bar{K}} = \Gamma_K - \frac{3}{2} \left(\frac{l_t}{\delta_L^0} \right) \left(\frac{u'}{s_L^0} \right)^{-1} \ln \left(\frac{1}{1 - P_q} \right) \quad (7)$$

donde

$$\log_{10}(\Gamma_K) = - \frac{\exp[-(s + 0.4)]}{s + 0.4} + \{1 - \exp[-(s + 0.4)]\}(\sigma_1 s - 0.11) \quad (8)$$

siendo $s = \log_{10} \left(\frac{l_t}{\delta_L^0} \right)$, $\sigma_1 = \frac{2}{3} \left\{ 1 - \frac{1}{2} \exp \left[- \left(\frac{u'}{\delta_L^0} \right)^{1/3} \right] \right\}$, $P_q = \frac{1}{2} [1 + \tanh(\text{sign}[x]x^2)]$, $x = \frac{\log_{10} \left(\frac{u'}{s_L^0} \right) - g}{0.04 s}$, $g = \left(0.7 + \frac{1}{s} \right) e^{-s} + (1 - e^{-s})(1 + 0.36 s)$. l_t es la escala de longitud integral y δ_L^0 es el espesor de llama laminar, el cual se calcula de manera aproximada mediante el *blint tickness* δ_L^b [1]

$$\delta_L^0 \cong \delta_L^b = 2 \frac{\alpha_u}{s_L} \left(\frac{T_2}{T_1} \right)^{0.7} \quad (9)$$

donde α_u es la difusividad térmica del gas sin quemar, y T_1 y T_2 son las temperaturas del gas sin quemar y quemado, respectivamente.

El encendido se resuelve aplicando un modelo muy simplificado, el cual supone que la fase de ignición es muy rápida, permitiendo así imponer un valor inicial predefinido para el núcleo de la llama dado por la expresión [9]

$$(\bar{\rho}\Sigma)_c = \bar{\rho}_u \frac{4\pi r_0^2}{V_c} \quad (10)$$

donde el subíndice c indica valor en la celda, en este caso la celda donde se verifica la ignición, V_c el volumen de la celda y r_0 el radio inicial de la llama. La ecuación (10) indica el modo de inicializar el campo Σ .

3. Esquema numérico

La implementación del nuevo *solver* y librería de modelos en OpenFOAM® fue realizada sobre la base del esquema PIMPLE, el cual es uno de los que se utilizan en este software para resolver flujos compresibles transientes. El procedimiento PIMPLE es una combinación de los esquemas SIMPLE (*Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations* [11]) y PISO (*Pressure-Implicit with Splitting Operators* [12]), permitiendo una resolución disgregada de las ecuaciones dentro de un proceso iterativo para acoplar los campos de flujo. El algoritmo PISO es un método predictor-corrector que itera, en cada paso de tiempo, una cantidad fija de veces a través de las ecuaciones realizando una iteración externa (predictor de momento) y dos o más iteraciones internas para el corrector presión/velocidad. Tanto el predictor de momento como el paso corrector de la presión dan lugar a un sistema de ecuaciones lineales que resulta de la discretización de las correspondientes ecuaciones diferenciales, mientras que el paso corrector para la velocidad es explícito. El algoritmo PIMPLE, en comparación con el PISO, permite utilizar un mayor número de iteraciones externas con factores de sub-relajación para cada paso de tiempo, lo cual lo torna similar al esquema SIMPLE. Las ecuaciones para el modelo de turbulencia se resuelven luego del paso corrector, dado que el acoplamiento entre estos campos no es tan fuerte como el de presión/velocidad.

Las ecuaciones que deben adicionarse al *solver* compresible son las correspondientes a la variable de regreso de la combustión y a la FSD. Estas dos ecuaciones se resuelven en forma desacoplada luego del paso predictor de momento y antes del paso corrector. Dado que la

variable Σ interviene en el término fuente de la ecuación para \tilde{b} , se resuelve primero la ecuación para la FSD. La discretización de ambas ecuaciones da lugar a un sistema de ecuaciones con matriz rala. Estas ecuaciones se resuelven por cada paso de tiempo tantas veces como número de iteraciones externas hayan sido estipuladas por el usuario.

4. Resultados

4.1. Bomba de combustión cúbica

Este primer caso se plantea a fin de evaluar la implementación realizada de los distintos modelos de combustión, habiéndose tomado la propuesta del trabajo de Choi y Huh [9]. El problema consiste en una bomba de combustión cúbica de 12 cm de lado con el encendido ubicado en el centro del cubo. El gas se compone de una mezcla estequiométrica propano-aire. Inicialmente el fluido se encuentra en reposo a una presión de 1 atm y una temperatura de 355.77 K, y los campos de energía cinética turbulenta y disipación de energía cinética turbulenta son uniformes. Además, se asume que la turbulencia permanece congelada. Para el encendido, se asume un radio inicial de la llama $r_0 = 0.5 \text{ mm}$. Los números de Schmidt turbulentos para las ecuaciones de \tilde{b} y Σ se suponen unitarios.

El caso fue estudiado experimentalmente por Checkel y Thomas [13], quienes definieron el siguiente criterio para hallar la velocidad de quemado turbulenta (s_T):

$$\frac{s_T}{s_L} = \frac{(dp/dt)_{turbulento}}{(dp/dt)_{laminar}} \quad (11)$$

donde dp/dt es la derivada de la curva de presión respecto al tiempo y se evalúa en el instante en el cual la presión dentro de la bomba alcanza un valor de 2.2 veces la presión inicial. Bradley et al.[14] determinaron la siguiente correlación para s_T como una función de los números de Karlovitz (K) y de Lewis (Le)

$$\frac{s_T}{u'} = 0.88(KLe)^{-0.3} \quad (12)$$

El número de Karlovitz se calcula en este trabajo siguiendo la propuesta de Abdel-Gayed et al. [15]

$$K = 0.145 \left(\frac{u'}{s_L} \right)^2 Re_T^{-0.5} \quad (13)$$

donde $Re_T = u' l_t / \bar{\nu}$ es el número de Reynolds turbulento. El número de Lewis es unitario. La velocidad de quemado laminar se calcula utilizando la correlación propuesta por Metghalchi y Keck [16]

$$s_L = s_L^0 \left(\frac{T_u}{T_0} \right)^a \left(\frac{p_u}{p_0} \right)^b \quad (14)$$

donde $a = 2.18 - 0.8(\phi - 1)$, $b = -0.16 + 0.22(\phi - 1)$, $s_L^0 = 0.342 - 1.387(\phi - 1.08)^2$, $T_0 = 298 K$, $p_0 = 1 atm$ y ϕ es la relación de equivalencia. La viscosidad dinámica del gas se corrige siguiendo la expresión de Sutherland $\mu(T) = A_s T^{3/2} / (T + T_s)$, donde $A_s = 1.8226 \times 10^{-6} Pa \cdot s / K^{0.5}$ y $T_s = 170.672 K$.

Las constantes de los distintos modelos se ajustaron a la correlación (12) para la condición $u' = 2.45 m/s$, $l_t = 6.3 mm$ y $KLe = 0.14$, obteniéndose los valores incluidos en la Tabla 2. Una vez establecidos estos valores para las constantes, se mantuvieron inalterados para el resto de las condiciones simuladas.

Tabla 2. Constantes de ajuste halladas para los distintos modelos para la condición $u' = 2.45 m/s$, $l_t = 6.3 mm$ y $KLe = 0.14$ en el caso de la bomba de combustión cúbica

Modelo	α_0	β_0	a	C	b^*	l_{tc}
CPB	0.3463	1.000	10.0	-	-	-
CFM1	12.1000	0.180	-	0.5	-	-
CFM2a	5.6000	0.275	-	0.5	-	-
CFM2b	10.2000	0.100	-	0.5	-	-
CFM3	3.2500	0.500	-	-	0.5	-
CD	11.7750	0.600	-	-	-	-
CH1	1.2000	0.100	-	-	-	-
CH2	1.2100	0.100	-	-	-	1.635 mm

El objetivo del presente caso es calcular la velocidad de quemado turbulenta empleando el criterio dado por la ecuación (11). Para tal fin resulta necesario conocer el valor de $(dp/dt)_{laminar}$ cuando la presión dentro de la bomba alcanza las $2.2 atm$ en condiciones de quemado laminar. Este valor fue estimado del siguiente modo. Tomando el primer modelo de Choi y Huh (modelo CH1), se resolvió el caso utilizando las constantes sugeridas originalmente por los autores, determinándose $(dp/dt)_{turbulento}$ cuando $p = 2.2 atm$. Con este valor y la correlación (12) se obtuvo una estimación de $(dp/dt)_{laminar}$ que fue la utilizada para el resto de los casos.

Para todas las simulaciones se utilizó una malla homogénea de 21 celdas en cada lado del dominio. Se impone como condición de contorno para todas las variables la condición de gradiente nulo sobre la pared de la cámara, excepto para la velocidad, para la cual se asume la condición de no-deslizamiento.

El primero de los casos resueltos consiste en calcular s_T en función de u' para los distintos modelos manteniendo $KLe = 0.14$ constante. Por lo tanto, la única condición inicial que varía es el valor de la energía cinética turbulenta. La Figura 1 presenta los resultados obtenidos. La curva en línea continua, la cual se referencia en la figura como "Exp.", representa la correlación dada por la ecuación (12) y, para el caso analizado, la misma es una recta. Con diferente grado de acuerdo, con los modelos CH1, CH2, CPB, CFM2a, CFM2b y CFM3 se obtiene un incremento de la velocidad de quemado turbulenta cuando u' aumenta, lo cual no ocurre para los modelos CD y CFM1. En estos dos últimos casos, se aplica el análisis que hacen Choi y Huh [9] del modelo CD. Tanto para el modelo CD como para el CFM1 el término de producción κ_t es proporcional a $1/\tau_t$ (en ambas propuestas

τ_t es proporcional a $\tilde{k}/\tilde{\varepsilon}$, mientras que el número de Karlovitz es proporcional a $u'/\sqrt{\tau_t}$ (véase la ecuación (13)). Entonces, un incremento (disminución) de u' implicaría que τ_t también se incremente (disminuya) para mantener constante K , produciendo así una disminución (aumento) en el término de producción de FSD y disminuyendo (aumentando) por lo tanto la velocidad de quemado turbulenta. Los modelos CFM2a, CFM2b y CFM3 poseen en este término de producción la modulación de la función de eficiencia $\Gamma_{\bar{K}}$ que revierte el comportamiento referido. Para $u'/s_L = 2$ los modelos CFM2a, CFM2b y CFM3 presentaron una tasa de quemado muy baja, no pudiéndose alcanzar un valor de presión de 2.2 veces la presión inicial para tiempos de simulación "razonables" (del orden de 4 veces el tiempo empleado por los otros modelos para el mismo valor de u'/s_L).

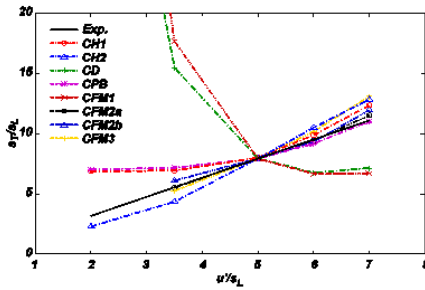


Figura 1. Velocidad de quemado turbulenta en función u' para $KL_e = 0.14$ en una bomba de combustión cúbica con el encendido en el centro. La referencia "Exp." corresponde a la correlación propuesta por Bradley et al., dada por la ecuación (12).

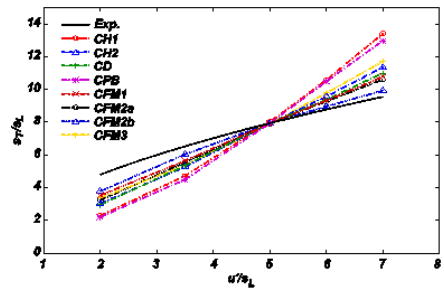


Figura 2. Velocidad de quemado turbulenta en función u' para $l_t = 6.33 \text{ mm}$ en una bomba de combustión cúbica con el encendido en el centro. La referencia "Exp." corresponde a la correlación propuesta por Bradley et al., dada por la ecuación (12).

El segundo caso consiste en calcular s_T/s_L en función de u'/s_L manteniendo constante la escala de longitud integral en el valor de ajuste de 6.33 mm . Bajo estas condiciones, los valores iniciales para \tilde{k} y $\tilde{\varepsilon}$ varían con el valor que adopte la variable u'/s_L . Los resultados obtenidos se presentan en la Figura 2, donde también se grafica el valor de la correlación (12) calculando el número de Karlovitz mediante la ecuación (13). Los modelos CD, CFM1 y CFM2a presentan un aumento lineal de la velocidad de quemado turbulenta con el aumento de u' . Los restantes modelos se alejan de este comportamiento lineal, aunque los modelos CH1, CH2, CPB y CFM3 presentan una curvatura inversa a la que presenta la correlación de Bradley et al. [14] El modelo que mejor ajusta los datos experimentales y el comportamiento de la velocidad de quemado turbulenta en este caso es el CFM2b.

El último de los casos analizados consiste en determinar la velocidad de quemado turbulenta al variar la escala de longitud integral manteniendo constante u' . Dado que u' se mantiene constante, sólo se modifica el valor inicial de $\tilde{\varepsilon}$ para cada l_t utilizada. La Figura 3 ilustra los resultados obtenidos, incluyendo también la correlación experimental dada por la ecuación (12). Como puede observarse, de acuerdo con esta correlación la velocidad

de quemado turbulenta se incrementa con el aumento de la escala de longitud integral. Esta tendencia la presentan los modelos CH2, CFM2a, CFM2b y CFM3; mientras que los restantes modelos poseen el comportamiento opuesto. Se observa que el mejor ajuste en este caso se presenta para el modelo CH2. Para este problema tampoco se pudieron obtener resultados de los modelos CFM2a, CFM2b y CFM3 cuando $l_t/\delta_L^0 = 10$.

4.2. Motor de combustión interna con cámara tipo *pent-roof*

La segunda aplicación que se realiza de la librería desarrollada consiste en la simulación del proceso de combustión dentro de la cámara de un motor de combustión interna. Como caso particular se tomó el tutorial denominado *kivaTest* de la distribución oficial de OpenFOAM®, el cual consiste en la simulación de la carrera de compresión, combustión y parte de la expansión en un motor con cámara de combustión del tipo *pent-roof* de cuatro válvulas. El cilindro del motor posee un diámetro de 92 mm , la carrera del pistón es de 84.23 mm , el largo de la biela es de 147 mm y se asume que el motor gira a 1000 rpm . La Figura 4 muestra una vista de la geometría del cilindro indicando además el punto donde se inicia la combustión. La ignición se produce 15° aPMS (antes del Punto Muerto Superior), utilizándose el mismo radio inicial que en el caso de la bomba de combustión. La simulación comienza con el pistón en el PMI (PM Inferior), correspondiendo al ángulo de cigüeñal $\theta = -180^\circ$ y se realiza en dos etapas: la primera desde $\theta = -180^\circ$ hasta $\theta = -15^\circ$, donde no hay combustión, y luego la segunda con cálculo de combustión, que se extiende hasta $\theta = 60^\circ$. Inicialmente se tiene dentro del cilindro una mezcla estequiométrica de aire e iso-octano vaporizado perfectamente mezclados, a una presión de $1 \times 10^5\text{ Pa}$ y una temperatura de 373 K . Debido a que no se simula el proceso de admisión, el campo de flujo se inicializa con un perfil de *swirl* sintético. Las variables del modelo de turbulencia se inicializan con los siguientes valores: $\tilde{\kappa} = 4\text{ m}^2/\text{s}^2$, $\tilde{\varepsilon} = 450\text{ m}^2/\text{s}^3$.

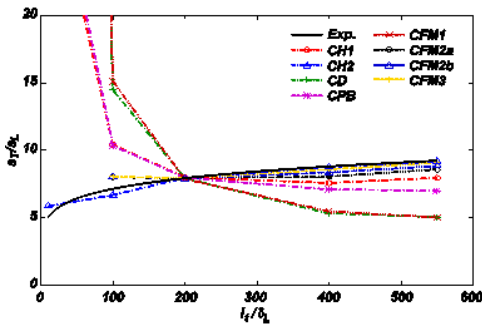


Figura 3. Velocidad de quemado turbulenta en función l_t para $u' = 2.45\text{ m/s}$ en una bomba de combustión cúbica con el encendido en el centro. La referencia "Exp." corresponde a la correlación propuesta por Bradley et al., dada por la ecuación (12).

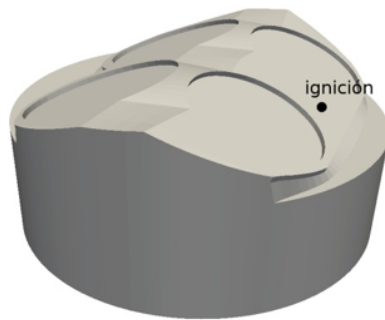


Figura 4. Vista del dominio para el caso del motor de combustión interna alternativo con cámara tipo *pent-roof*.

La malla utilizada posee 27544 celdas, cantidad que permanece constante a lo largo de toda la simulación. Sólo las celdas comprendidas entre el plano superior de la cabeza del pistón y el plano inferior de la tapa de cilindros se deforman debido al movimiento del pistón. Dicha deformación se calcula de manera proporcional a la distancia entre el pistón y la tapa de cilindros. En cuanto a las condiciones de contorno, se imponen leyes de pared para la velocidad, \tilde{k} y $\tilde{\varepsilon}$. En particular se impone gradiente normal nulo para \tilde{k} y la disipación de energía cinética turbulenta se calcula como $\tilde{\varepsilon} = C_{\mu}^{0.75} \tilde{k}^{1.5} / \kappa d$ [4], donde $C_{\mu} = 0.09$ es una constante del modelo k-epsilon, κ es la constante de von Karman y d es la distancia del punto de evaluación a la pared. Para las variables \tilde{p} , \tilde{b} y Σ se impone la condición de gradiente nulo en la dirección normal a la pared. Finalmente, la temperatura se impone sobre las paredes con los valores 433 K sobre la cabeza del pistón, 373 K sobre la camisa y 383 K sobre el cielo de la tapa de cilindros. Para este problema, la velocidad de llama laminar se calcula recurriendo a la correlación propuesta por Gülder^[17].

Se comenzó utilizando el modelo CH2, que fue uno de los que tuvo mejor desempeño en el caso de la bomba de combustión. Los restantes modelos ensayados son: CH1, CFM1 y CFM2a. Estos modelos fueron adoptados como representativos del modo en que se modela el término de producción en la ecuación de transporte para la FSD (véase la Tabla 1). La Figura 5 presenta los valores de la presión media dentro del cilindro en función del ángulo del cigüeñal a partir de que comienza la combustión y hasta la finalización de la simulación para los cuatro modelos considerados. La Figura 6 muestra la temperatura media del gas. Los resultados promedio presentados en estas figuras no muestran indicios de problemas dado que los valores obtenidos podrían representar valores encontrados en el motor considerado. Sin embargo, se detectaron problemas para algunos de los modelos cuando se observa la posición del frente de llama (representado por la iso-superficie $\tilde{b} = 0.5$) dentro de la cámara. Por ejemplo, la Figura 7 (izq.) muestra la posición calculada del frente de llama para un 10 % de progreso de la combustión cuando se considera el modelo CH1. La misma figura muestra, además, la distribución del campo Σ sobre un plano distante 6 mm del eje del cilindro. Como puede observarse, además de la llama iniciada con el encendido que representa la bujía, con este modelo se genera un frente de llama sobre la cabeza del pistón, lo cual no es físicamente realista (de hecho, la región de la pared es una zona de extinción para la llama). El frente de llama "espurio" que se genera sobre la cabeza del pistón se debe a la distribución de los campos $\tilde{\varepsilon}$ y Σ , y la forma propuesta por el modelo para el término de producción en la ecuación de la FSD. En la zona cercana a la cabeza del pistón $\tilde{\varepsilon}$ presenta valores relativamente elevados y, a su vez, el transporte de Σ produce valores no nulos sobre la cabeza del pistón por debajo del frente de llama iniciado en el proceso de ignición que, al ser multiplicados por $\sqrt{\tilde{\varepsilon}}$, provocan que el término de producción sea elevado en dicha zona, originando así la llama "ficticia". Una modificación al modelo CH1 es el CH2, donde se propone otra expresión para el término de producción de FSD que no depende de $\tilde{\varepsilon}$. La Figura 7 (der.) muestra la posición del frente de llama y la distribución de Σ sobre un plano para el mismo porcentaje de progreso de la combustión considerado anteriormente. Se observa que en este caso sólo se genera un frente de llama (en la ignición) que se propaga de acuerdo a un modo que podría ser físicamente posible.

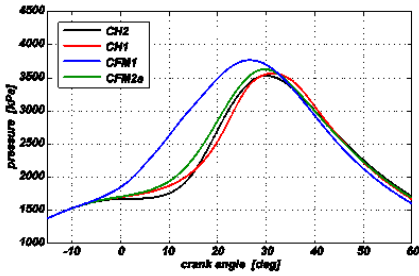


Figura 5. Presión media dentro del cilindro durante la combustión.

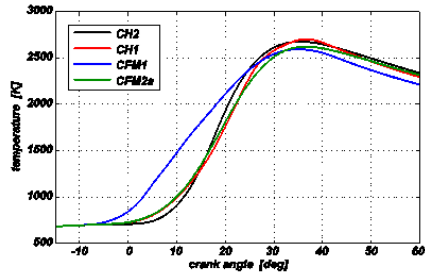


Figura 6. Temperatura media dentro del cilindro durante la combustión.

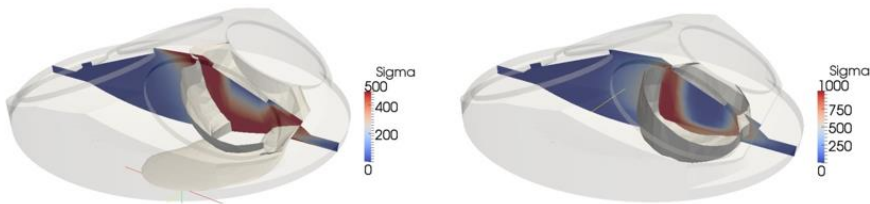


Figura 7. Distribución de Σ en [1/m] en un plano cercano al eje del cilindro e iso-superficie $\bar{b} = 0.5$, para un 10 % combustionado. Izq.: modelo CH1 ($\theta = 5^\circ$), der.: modelo CH2 ($\theta = 10^\circ$).

Otro de los modelos considerados y que muestra deficiencias similares al modelo CH1 es el modelo CFM1, donde ahora el término de producción de Σ es proporcional a $\tilde{\epsilon} / \bar{k}$. En la Figura 8 (izq.) se muestra la posición del frente de llama para distintos avances de la combustión. Nuevamente se observa la generación de un frente de llama en la zona cercana a la cabeza del pistón que, incluso, pareciera predominar sobre el frente de llama iniciado en la ignición. Las razones que explican este comportamiento se atribuyen a las mismas esgrimidas en el caso del modelo CH1, consistentes en el elevado valor de $\tilde{\epsilon}$ sobre la cabeza del pistón y el hecho de que Σ no sea nulo sobre dicha superficie. Este mismo comportamiento lo presenta el modelo CD, cuyo término de producción de Σ es el mismo que en el caso del modelo CFM1 y fue observado en otros estudios sobre el tema, como por ejemplo en [18]. Introduciendo la función de eficiencia $\Gamma_{\bar{K}}$ del modelo ITNFS en el término de producción de Σ es posible solucionar los problemas que muestra el modelo CFM1. Por ejemplo, el modelo CFM2a permite calcular resultados más realistas, como se observa en la Figura 8 (der.).

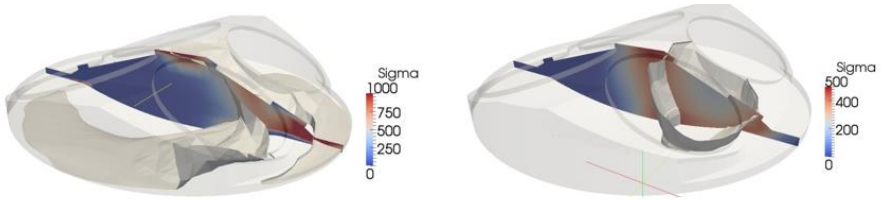


Figura 8. Distribución de Σ en [1/m] en un plano cercano al eje del cilindro e iso-superficie $\tilde{b} = 0.5$, para un 10 % combustionado. Izq.: modelo CFM1 ($\theta = 2^\circ$), der.: modelo CFM2a ($\theta = 8^\circ$).

5. Conclusiones

Se presentaron resultados obtenidos de la implementación de una librería de modelos de combustión turbulenta premezclada en la suite OpenFOAM®. En particular se utiliza el modelo ECFM, el cual se basa en considerar al frente de llama como una colección de *flamelets* que son distorsionados por el flujo turbulento. Se consideró una ecuación de transporte para la FSD, donde los distintos modelos se diferencian en la forma propuesta para los términos fuente de la misma. La librería fue aplicada a la resolución de la combustión dentro de una bomba de combustión cúbica y un caso de un motor de combustión interna con cámara tipo *pent-roof*. En ambos casos, los modelos que presentaron un mejor desempeño fueron aquellos en los que el término de producción de FSD no es proporcional a una potencia de $\tilde{\epsilon}$ o, si lo es, su efecto está modulado por la función de eficiencia del modelo ITNFS. En el caso del motor de combustión interna se mostró además que no es suficiente considerar los valores medios de las variables dentro del cilindro en función del ángulo del cigüeñal, dado que aún obteniendo valores plausibles de estas variables, algunos de los modelos presentaron la formación de frentes de llama "ficticios". Como trabajos a futuro se proponen una validación más exhaustiva de la librería en casos de motores de combustión interna, incluyendo la comparación con resultados experimentales, la implementación de modelos de ignición más elaborados y de *quenching* con las paredes de la cámara.

6. Referencias

- [1] Poinso, Thierry, Veynante, Denis, "Theoretical and Numerical Combustion", Third Edition, Poinso T. and Veynante D., 2012.
- [2] "OpenFOAM®: Open Field Operation and Manipulation CFD Toolbox", 2004-2016, <http://www.opencfd.co.uk/openfoam/>
- [3] Weller, H.G., "The development of a new flame area combustion model using conditional average", Thermo-Fluids Section Report TF/9307, Department of Mechanical Engineering, Imperial College of Science Technology and Medicine, 1993.
- [4] Wilcox, David C., "Turbulence Modeling for CFD", 2nd edition, D C W Industries, 2002.
- [5] Cant, R.S., Pope, B., Bray, K.N.C., "Modelling of flamelet surface-to-volume ratio in turbulent premixed combustion", Twenty-Third Symposium (International) on Combustion/The Combustion Institute, 809-815, 1990.

- [6] Duclos, J.M., Veynante, D., Poinso, T., "A comparison of flamelet models for premixed turbulent combustion", *Combustion and Flame*, 95:101-117, 1993.
- [7] Veynante, D., Piana, J., Duclos, J.M., Martel, C., "Experimental analysis of flame surface density models for premixed turbulent combustion", *Twenty-Sixth Symposium (International) on Combustion/The Combustion Institute*, 413-420, 1996.
- [8] Cheng, Wai K., Diringer, Joachim A., "Numerical modelling of SI engine combustion with a flame sheet model", *SAE Technical Paper 910268*, 1991.
- [9] Choi, Chang R., Huh, Kang Y., "Development of a coherent flamelet model for a spark-ignited turbulent premixed flame in a closed vessel", *Combustion and Flame*, 114:336-348, 1998.
- [10] Meneveau, C., Poinso, T., "Stretching and quenching of flamelets in premixed turbulent combustion", *Combustion and Flame*, 86:311-332, 1991.
- [11] Patankar, Suhas V., "Numerical Heat Transfer and Fluid Flow", Taylor & Francis, 1980.
- [12] Versteeg, H., Malalasekera, W., "An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method", 2nd edition, Ed. Pearson, 2007.
- [13] Checkel, M.D., Thomas, A., "Turbulent combustion of premixed flames in closed vessels", *Combustion and Flame*, 96:351-370, 1994.
- [14] Bradley, D., Lau, A.K.C., Lawes, M., "Flame stretch rate as a determinant of turbulent burning velocity", *Philosophical Transactions of the Royal Society A*, 338:359-387, 1992.
- [15] Abdel-Gayed, R.D., Bradley, D., Lawes, M., "Turbulent burning velocities: a general correlation in terms of straining rates", *Proceedings of the Royal Society A*, 414:389-413, 1987.
- [16] Metghalchi, Mohamad, Keck, James C., "Burning velocities of mixtures of air with methanol, isooctane, and indolene at high pressure and temperature", *Combustion and Flame*, 48:191-210, 1982.
- [17] Gülder, Ö., "Correlations of laminar combustion data for alternative S.I. engine fuels", *SAE Technical Paper N° 841000*, 1984.
- [18] Angelberger, C., Poinso, T., Delhay, B., "Improving near-wall combustion and wall heat transfer modeling in SI engine computations", *SAE Technical Paper N° 972881*, 1997.