

SIMULACIÓN DE ATOMIZACIÓN MEDIANTE LA METODOLOGÍA VOF CON REFINAMIENTO ADAPTATIVO DE MALLA

SIMULATION OF ATOMIZATION THROUGH THE VOF METHODOLOGY WITH ADAPTIVE MESH REFINEMENT

César I. Pairetti^a, Stéphane Popinet^b, Santiago Márquez Damián^c, Norberto M. Nigro^c y
Stéphane Zaleski^b

^a*Escuela de Ingeniería Mecánica (EIM), Facultad de Ciencias Exactas Ingeniería y Agrimensura (FCEIA) Universidad Nacional de Rosario (UNR) - CONICET, Beruti 2109, Rosario, Santa Fe, Argentina* pairetti@fceia.unr.edu.ar <https://www.fceia.unr.edu.ar/>

^b*Institut Jean Le Rond D'Alembert, Sorbonne Université. 7, Place Jussieu, Paris, France, stephane.popinet@upmc.fr; stephane.zaleski@upmc.fr; <http://www.dalembert.upmc.fr/>*

^c*Centro de investigación en métodos computacionales (CIMEC, CONICET-UNL). Santa Fe, Argentina, santiagomarquezd@gmail.com, norberto.nigro@gmail.com <https://cimec.org.ar/>*

Palabras clave: Atomización, Volumen de Fluido, Refinamiento Adaptativo de Malla

Resumen. Durante los primeros instantes de la inyección de combustible, el chorro líquido se fragmenta hasta formar un *spray*. Este fenómeno, conocido como atomización, se ha estudiado experimentalmente, logrando importantes avances en la caracterización de aerosoles. Por otra parte, recientemente se han empleado modelos computacionales a fin de desarrollar un análisis más detallado, basado en la dinámica de los procesos de fragmentación. En este contexto, presentamos resultados obtenidos mediante un modelo de Volumen de Fluido (VOF) en un contexto de Método de Volúmenes Finitos (FVM), implementados en la suite Basilisk. Esta herramienta utiliza grillas octree para aplicar estrategias de refinamiento adaptativo (AMR) basadas en estimación de error numérico mediante wavelets. A partir del análisis de esta métrica, caracterizamos la precisión de las simulaciones en función del criterio de refinamiento.

Keywords: Atomization, Volume of Fluid, Adaptive Mesh Refinement, Basilisk.

Abstract. During the first stages of fuel injection, the liquid jet suffers fragmentation until turning into a spray. This process, known as atomization, has been studied experimentally improving our capabilities to characterize spray properties. On the other hand, computational models have been recently applied to develop more detailed descriptions based on the breakup process dynamics. In this context, we present results obtained using a Volume of Fluid (VOF) in a Finite Volume Method (FVM) implemented in the suite Basilisk. This tool employs octree grids to apply Adaptive Mesh Refinement (AMR) techniques based on wavelet error estimation, which allow to reduce grid size and computational cost. The accuracy of the results is analyzed by monitoring the error estimation function.

1. INTRODUCCIÓN

Los flujos multifásicos se encuentran presentes en la naturaleza y en un gran número de aplicaciones industriales. La atomización de chorros líquidos, en particular, es un fenómeno clave en la inyección de combustibles, aplicación de agroquímicos, procesos de enfriado o recubrimiento entre muchos otros. Este fenómeno consiste en la fragmentación de una estructura líquida hasta formar una nube de gotas de diámetro estable. Debido a su ubicuidad, los aerosoles son estudiados experimentalmente de forma intensiva desde la década de 1970. Nos limitaremos aquí a mencionar las detalladas revisiones de [Marmottant y Villermaux \(2004\)](#); [Guildenbecher et al. \(2009\)](#); [Lefebvre y McDonell \(2017\)](#)

Sin embargo, existen diversas limitaciones que no permiten un análisis exhaustivo del proceso. En general, el *spray* en su zona densa impide la observación de las inestabilidades en la zona cercana a la boquilla de inyección. En el caso de la inyección en motores, se suma el inconveniente de las elevadas temperaturas y presiones de operación.

Debido a estas problemáticas, la simulación numérica se presenta como una herramienta útil para el estudio de la atomización. Esta activa área de investigación apunta a realizar un análisis comprensivo que complemente los datos obtenidos en el laboratorio. A partir del aumento de las capacidades de cómputo y el desarrollo de técnicas numéricas para la simulación de flujos multifásicos, a principios de la década del 2000 se han propuestos diversos enfoques para esta tarea. [Gorokhovski y Herrmann \(2008\)](#) resumen los principales obstáculos para realizar Simulación Numérica Directa (DNS) de atomización:

- Gran amplitud de escalas espaciales y temporales. Los elevados números de Reynolds involucrados en la atomización implican escalas de Kolmogorov varios órdenes de magnitud inferior a la longitud característica del problema.
- Las propiedades del flujo son discontinuas, la representación numérica generalmente introduce errores que pueden producir a resultados no físicos.
- La tensión superficial debe implementarse con un esquema preciso, ya que es clave para los proceso de atomización secundaria (escala pequeña de la simulación). Esto requiere un tratamiento especial del término en la ecuación de momento.
- La turbulencia es un fenómeno tridimensional, lo cual eleva los costos de simulación.
- La deformación de la interfase ocurre rápidamente, la resolución temporal requerida es elevada.

Los números adimensionales que caracterizan a este problema son:

$$Re_g = \frac{\rho_g U D}{\mu_g} \quad We_g = \frac{\rho_g U^2 D}{\sigma} \quad Q_\rho = \frac{\rho_l}{\rho_g} \quad Q_\mu = \frac{\mu_l}{\mu_g}$$

En este trabajo, presentamos resultados de un caso típico de atomización empleando la librería de volúmenes finitos Basilisk [Popinet \(2014\)](#). La misma cuenta con una formulación del método de Volumen de Fluido (VOF) Lineal a trozos (PLIC) para mallas estructuradas. La implementación en grillas tipo octree permite aplicar Refinamiento de Malla Adaptativo (AMR) de forma eficiente. El criterio de refinamiento está basado en una estimación de error absoluto por wavelets, ajustado para asegurar la resolución de las escalas turbulentas acordes al paso de malla local.

2. MÉTODOS NUMÉRICOS E IMPLEMENTACIÓN

El modelo matemático empleado consiste en las ecuaciones de balances de masa y momento para un flujo incompresible, considerando la fuerza de tensión superficial:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (\mathbf{u}) &= 0 \\ \frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) &= -\nabla p + \nabla \cdot [2\mu \mathbf{D}] + \sigma \kappa \delta_s \mathbf{n}_s \end{aligned} \quad (1)$$

donde $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ es el campo de velocidad y $p(\mathbf{x}, t)$ el campo de presión. El tensor \mathbf{D} sigue la definición $\frac{1}{2}(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T)$. Las propiedades ρ y μ son la densidad y viscosidad de flujo respectivamente. La fuerza de tensión superficial, de acuerdo al modelo de [Brackbill et al. \(1992\)](#), se calcula como el producto de la constante σ , la curvatura de la interfase κ y el vector normal unitario \mathbf{n}_s . La delta de Dirac centrada en la superficie δ_s denota el carácter local de la fuerza de interfase ([Tryggvason et al. \(2011\)](#), capítulo 2).

La distribución espacial de las fases se representa en este trabajo mediante el método VOF [Hirt y Nichols \(1981\)](#); [Rudman \(1998\)](#), que considera un único campo de velocidad continuo y describe la distribución de cada fase mediante una *función de color* discontinua $c(\mathbf{x}, t)$ que asume valores 0 o 1 para cada fase. Esta función de Heaviside evoluciona de forma Lagrangiana, de acuerdo a la ecuación:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (c \mathbf{u}) = 0 \quad (2)$$

En el contexto de la técnica VOF-PLIC ([Tryggvason et al., 2011](#)), se resuelve el balance del valor medio de c en la celda $\tilde{c} = (1/V) \int_V c dV$, que representa la fracción de volumen ocupada por la fase principal ($c = 1$). De esta manera, la posición de la interfase está implícitamente definida por la función \tilde{c} . A nivel discreto, conocido el valor de la normal del plano en una celda, su posición está unívocamente definida por la fracción de volumen [Scardovelli y Zaleski \(1999\)](#). Asimismo, las propiedades del flujo en cada celda pueden calcularse mediante medias aritméticas:

$$\rho = \tilde{c} \rho_1 + (1 - \tilde{c}) \rho_2 \quad \mu = \tilde{c} \mu_1 + (1 - \tilde{c}) \mu_2 \quad (3)$$

Definido el conjunto de ecuaciones (1,2) y las variables a resolver (\tilde{c} , \mathbf{u} , p), es necesario definir los esquemas numéricos para resolver el sistema. La implementación que utilizamos, presente en Basilisk [Popinet \(2014\)](#), se basa en el Método de Volúmenes Finitos (FVM), resolviendo las ecuaciones de Navier-Stokes con el algoritmo de proyección aproximada de [Chorin \(1968\)](#). Siguiendo la notación de [Popinet \(2009\)](#), el sistema de ecuaciones algebraicas a resolver es el siguiente:

$$\begin{aligned} \frac{c_{n+\frac{1}{2}} - c_{n-\frac{1}{2}}}{\Delta t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}_n c_n) &= 0 \\ \rho_{n+\frac{1}{2}} \left(\frac{\mathbf{u}_* - \mathbf{u}_{n-\frac{1}{2}}}{\Delta t} + \mathbf{u}_{n+\frac{1}{2}} \nabla \cdot (\mathbf{u}) \right) &= \nabla \cdot [\mu_{n+\frac{1}{2}} (\mathbf{D}_n + \mathbf{D}_*)] + (\sigma \kappa \delta_s \mathbf{n}_s)_{n+\frac{1}{2}} \\ \mathbf{u}_{n+1} &= \mathbf{u}_* - \frac{\Delta t}{\rho_{n+\frac{1}{2}}} \nabla p_{n+\frac{1}{2}} \\ \nabla \cdot (\mathbf{u}_{n+1}) &= 0 \end{aligned} \quad (4)$$

El esquema de advección geométrico utilizado para la fracción de volumen fue desarrollado por [Weymouth y Yue \(2010\)](#). Si bien utiliza *splitting* direccional, este esquema conserva masa a precisión de máquina.

Los flujos advectivos de la ecuación de momento se calculan como el producto del flujo másico dado por la advección VOF y una aproximación de segundo orden de la velocidad en la cara [Bell et al. \(1989\)](#). Esto garantiza la misma precisión para la conservación de masa y momento. Una explicación más detallada de los efectos de usar esquemas de advección *momentum-conserving* puede hallarse en [Pairetti C. \(2018\)](#). El flujo total se calcula finalmente computando la difusión viscosa mediante Crank-Nicholson.

El término de tensión superficial se computa de forma consistente con el gradiente de presión, a fin de reducir las corrientes parásitas como se explica en [Popinet \(2018\)](#). La curvatura de la interfase se calcula mediante aproximaciones de segundo orden a partir de funciones altura calculadas en cada celda con la fracción de volumen y la normal, utilizando las formulaciones analíticas en [Scardovelli y Zaleski \(1999\)](#).

El método de refinamiento adaptativo empleado en este trabajo se basa en una aproximación de error absoluto de velocidad a partir del cálculo de wavelets ([Popinet, 2015](#); [van Hooff et al., 2018](#)). Este método es equivalente a utilizar criterios de refinamiento basados en el hessiano de la velocidad [Ozhan et al. \(2013\)](#).

2.1. Resolución de escalas turbulentas

Como mencionan [Gorokhovski y Herrmann \(2008\)](#), aplicar DNS en problemas de atomización es altamente costoso. Por esta razón en general se opta por una metodología de Simulación de Grandes Eddies (*Large Eddy Simulation*, LES), donde se modelan los efectos de las escalas subgrilla agregando un término difusivo turbulento. Usualmente, las hipótesis de estos modelos se respetan en casos de turbulencia homogénea, como se menciona en [Pope \(2001\)](#). Sin embargo, el problema analizado no cumple estas condiciones en las regiones de interés, particularmente en las zonas cercanas a la interfase donde se genera la transferencia de momento.

En este trabajo consideramos que el error numérico difusivo introducido por esquema de advección y que no es necesario emplear modelos subgrilla explícitos. Esta estrategia es normalmente conocida como LES Implícito (ILES), siendo inicialmente propuesta por [Boris et al. \(1992\)](#) y actualmente utilizada para caracterizar flujos de alto Reynolds [Grinstein et al. \(2007\)](#); [Cadieux et al. \(2017\)](#); [Sun y Domaradzki \(2018\)](#). En concreto, consiste en considerar que el campo de velocidad obtenido es la media en volumen, lo que es equivalente a emplear un filtro con kernel G de caja, es decir, que es por definición equivalente a la discretización FVM 5. Algunos autores como [Aniszewski et al. \(2012\)](#) consideran leyes de cierre explícitas para complementar el filtro LES de la grilla. Sin embargo, en esta instancia no consideramos dichas correcciones, que serán objeto de futuros análisis.

$$\bar{\mathbf{u}} = \frac{1}{V} \int_V G(\mathbf{x}) \mathbf{u} dV \quad G(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1 & (\mathbf{x} \in V) \\ 0 & (\mathbf{x} \notin V) \end{cases} \quad (5)$$

3. ATOMIZACIÓN DE CHORRO DIESEL

El problema a analizar en cuestión es un chorro en condiciones de inyección Diesel, definido por el grupo de [Ménard et al. \(2007\)](#) y [Lebas et al. \(2009\)](#) en CORIA, dirigido por Desjardins. Los parámetros de dicho caso se encuentran definidos en la tabla 1. La figura 1 muestra una instancia intermedia de simulación en la cual el aerosol todavía está desarrollándose.

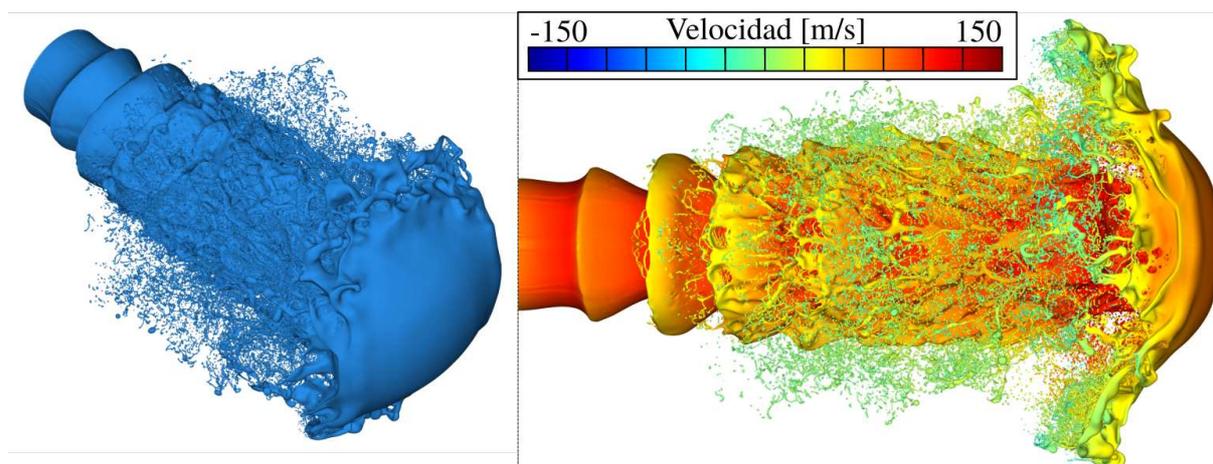


Figura 1: Gotas producidas por atomización del chorro para tiempo $t = 6 \mu\text{s}$. Colores por componente axial de velocidad.

3.1. Definición de caso de estudio y configuración del esquema numérico

La simulación consiste en un dominio cúbico de lado $L = 18D$, la condición de entrada está dada por un perfil de velocidad uniforme con variable en el tiempo según 6. Esta condición de entrada está limitada sólo al orificio por de diámetro D por donde se inyecta el líquido, el resto de esa cara dispone de condiciones de pared. Todas las otras caras del cubo tienen aplicadas condiciones de salida (presión fija y gradiente nulo de velocidad).

$$u_x = U_{inj} + \sin(2\pi ft) U_p \quad f = St \frac{U_{inj}}{D} \quad (6)$$

Las propiedades de los fluidos se listan en la tabla siguiente (en unidades del SI) junto con los datos geométricos del problema:

ρ_g	ρ_l	μ_g	μ_l	σ	U_{inj}	U_d	St
25.	696.	10^{-5}	$1,2 \times 10^{-3}$	0,06	100	5	1.3

Tabla 1: Definición del caso de atomización.

Shinjo y Umemura (2010) han analizado un régimen de alto Reynolds, con una malla uniforme de paso $0,35 \mu\text{m}$. Los resultados que exponemos a continuación utilizan una malla levemente más gruesa ($0,46 \mu\text{m}$) y una tolerancia de error en la velocidad de ($e(u) < 1\% U_{inj}$). Las distribuciones de gotas obtenidas en ambas simulaciones presentan el mismo grado de atomización, es decir, en ambos casos la moda consiste en gotas de $1 \mu\text{m}$ de diámetro, de las cuáles se cuentan más de 2000 gotas en un *spray* desarrollado. La distribución de velocidades en la figura 1 también presenta grandes similitudes con los resultados expuestos por Shinjo. Ambas comparaciones muestran que el uso de AMR no modifica el comportamiento físico del sistema, es decir, que el criterio de refinamiento no introduce errores significativos en el campo de velocidad en las zonas relevantes del flujo. Al respecto, cabe notar en $t = 10 \mu\text{s}$ la malla de este caso constaba de 4×10^8 celdas, menos del 7 % del tamaño de malla reportado por Shinjo (6×10^9).

3.2. Análisis del aerosol

El estudio de estos casos en general implica el análisis estadístico de diversas propiedades de las gotas producidas. En este sentido, la figura 2 muestra los histogramas diámetro, posición

radial y aspecto de forma para tres instantes (3, 6, 9 μ s). Estos datos permiten observar que el tamaño de gota más común es apenas superior a 1 μ m, que corresponde a un valor estable $We = 5$ para una velocidad relativa de 100 m/s. Este maximal es ligeramente superior a lo reportado por Shinjo y Umemura (2010), donde la cantidad de gotas es también considerablemente menor. Al observar la evolución temporal de los histogramas vemos un leve corrimiento del máximo a la derecha, pero conservando la misma distribución densidad.

En cuanto a la distribución espacial de las gotas, observamos una rápida expansión radial del espacio ocupado por la nube. Más aún, luego de 9 μ s, aproximadamente el 60 % de las gotas se encuentran a una distancia mayor a un diámetro del eje.

La figura 3 permite observar que las gotas de mayor tamaño son las más alejadas del núcleo. La distribución de gotas pequeñas es relativamente homogénea debido a que éstas se generan por ruptura catastrófica en toda la interfase. El hecho de que más del 95 % de las gotas se encuentren comprendidas en el rango entre 0.5 y 3 micrones de diámetro no debe opacar que la gran mayoría de la masa líquida se encuentra concentrada en el núcleo del chorro, como puede observarse en la figura derecha inferior.

Es notable también que las gotas de mayor velocidad son aquellas que se encuentran en la zona de recirculación posterior a la punta del chorro. El mismo tipo de vórtices se encuentran en las ondas de Kelvin-Helmholtz cercanas a la zona de inyección. A medida que las gotas se alejan del eje x , el efecto de drag reduce significativamente su velocidad.

Por cuestiones de brevedad, no se halla una descripción gráfica de la penetración del chorro. Sin embargo, en estas primeras instancias el arrastre aerodinámico no afecta significativamente la posición de la punta del chorro, que avanza a velocidad prácticamente constante (U_{inj}).

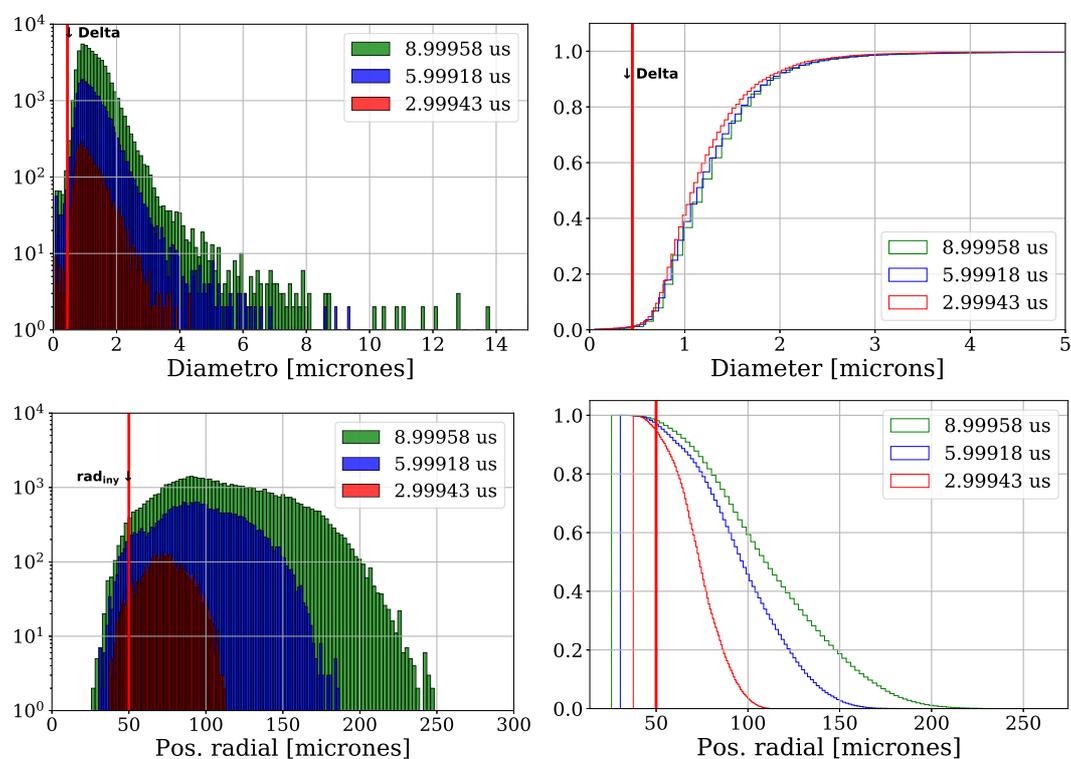


Figura 2: Histogramas (izquierda) y distribución acumulativa (derecha) de diámetros y posición radial de las gotas en el aerosol.

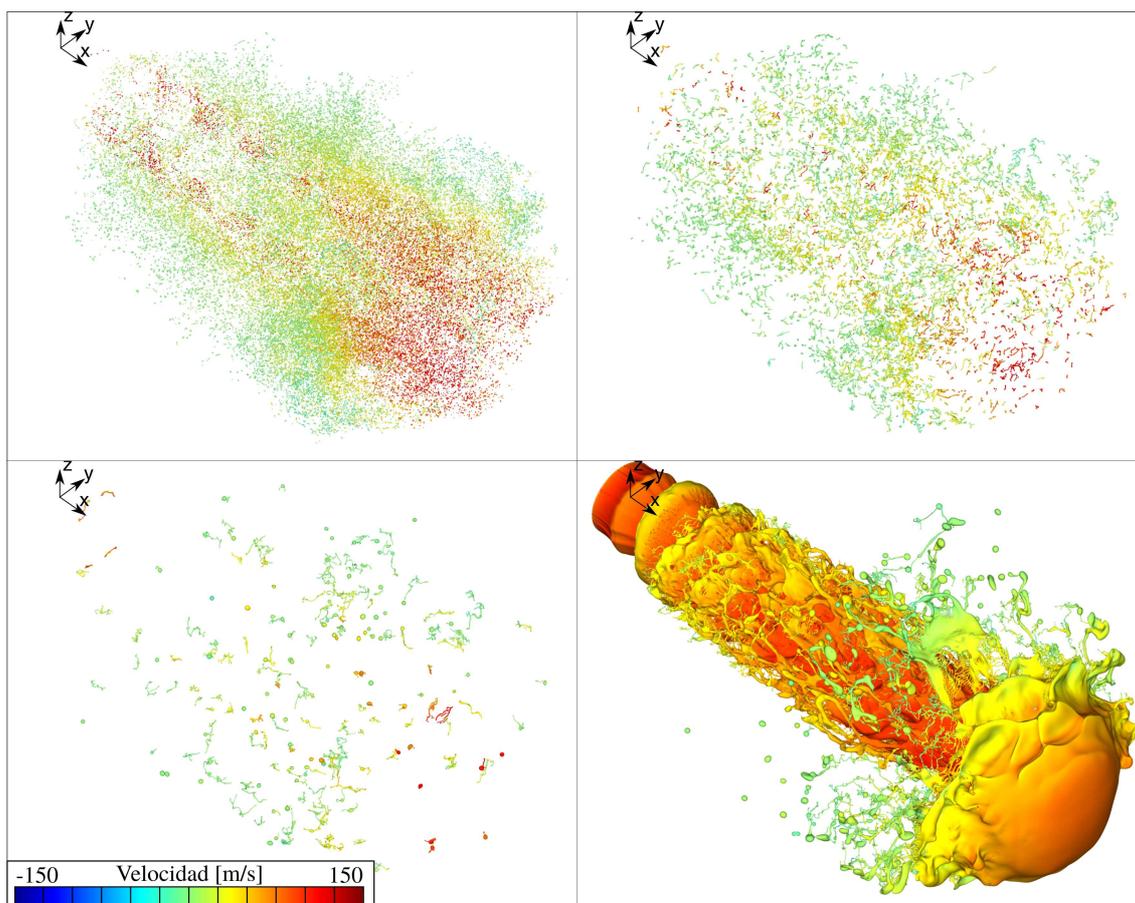


Figura 3: Gotas separadas por rangos de diámetro: $D \leq 1 \mu\text{m}$ (arriba izquierda), $1 \mu\text{m} \leq D \leq 2 \mu\text{m}$ (arriba derecha), $2 \mu\text{m} \leq D \leq 3 \mu\text{m}$ (abajo izquierda) y mayores diámetros (abajo derecha). Colores por componente axial de velocidad.

4. CONCLUSIONES

En este trabajo desarrollamos simulaciones preliminares de atomización de chorros líquidos empleando un *solver* FVM bifásico basado en VOF que aplica AMR en malla *octree*, implementado en la suite Basilisk. El uso de malla adaptativa permitió reducir la cantidad de celdas en un orden de magnitud, acotando los requerimientos de memoria que son la principal limitante en este tipo de problemas.

En cuanto a los resultados, se observó que el diámetro de gota más frecuente corresponde a un Weber bajo ($We = 5$) lejano a las condiciones de fragmentación. Asimismo, la cantidad de gotas en cada rango de tamaño se condicen con los resultados de mayor resolución en la bibliografía (Shinjo y Umemura, 2010) y con resultados experimentales (Guildenbecher et al., 2009). En este sentido, es alentador observar que la falta de resolución de la turbulencia en las regiones alejadas no parece haber afectado el comportamiento de la atomización. Aún así, aproximadamente la mitad de las estructuras líquidas se resuelven con apenas 3 celdas en un diámetro. Esto implica la necesidad de incrementar la resolución para garantizar la convergencia en malla.

Como trabajos a futuro, se realizarán simulaciones de regímenes a menor Reynolds, a fin de lograr una mejor representación de las escalas de Komogorov. Por otra parte, es necesario realizar simulaciones por períodos más largos de tiempo, a fin de observar el desarrollo radial

del cono, observar la longitud de rompimiento del núcleo y estudiar en qué momento de la inyección el comportamiento estadístico del aerosol alcanza una media estacionaria.

REFERENCIAS

- Aniszewski W., Bogusławski A., Marek M., y Tyliczszak A. A new approach to sub-grid surface tension for les of two-phase flows. *Journal of Computational Physics*, 231(21):7368–7397, 2012.
- Bell J.B., Colella P., y Glaz H.M. A second-order projection method for the incompressible navier-stokes equations. *Journal of Computational Physics*, 85(2):257–283, 1989.
- Boris J., Grinstein F., Oran E., y Kolbe R. New insights into large eddy simulation. *Fluid dynamics research*, 10(4-6):199–228, 1992.
- Brackbill J., Kothe D.B., y Zemach C. A continuum method for modeling surface tension. *Journal of computational physics*, 100(2):335–354, 1992.
- Cadieux F., Sun G., y Domaradzki J.A. Effects of numerical dissipation on the interpretation of simulation results in computational fluid dynamics. *Computers & Fluids*, 154:256–272, 2017.
- Chorin A.J. Numerical solution of the navier-stokes equations. *Mathematics of computation*, 22(104):745–762, 1968.
- Gorokhovski M. y Herrmann M. Modeling primary atomization. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, 40:343–366, 2008.
- Grinstein F.F., Margolin L.G., y Rider W.J. *Implicit large eddy simulation: computing turbulent fluid dynamics*. Cambridge university press, 2007.
- Guildenbecher D., López-Rivera C., y Sojka P. Secondary atomization. *Experiments in Fluids*, 46(3):371, 2009.
- Hirt C.W. y Nichols B.D. Volume of fluid (vof) method for the dynamics of free boundaries. *Journal of computational physics*, 39(1):201–225, 1981.
- Lebas R., Menard T., Beau P.A., Berlemont A., y Demoulin F.X. Numerical simulation of primary break-up and atomization: Dns and modelling study. *International Journal of Multiphase Flow*, 35(3):247–260, 2009.
- Lefebvre A.H. y McDonell V.G. *Atomization and sprays*. CRC press, 2017.
- Marmottant P. y Villermaux E. On spray formation. *Journal of fluid mechanics*, 498:73–111, 2004.
- Ménard T., Tanguy S., y Berlemont A. Coupling level set/vof/ghost fluid methods: Validation and application to 3d simulation of the primary break-up of a liquid jet. *International Journal of Multiphase Flow*, 33(5):510–524, 2007.
- Ozhan C., Fuster D., y Da Costa P. Efficient error estimation criteria to capture vortical structures in octree meshes. En *APS Meeting Abstracts*. 2013.
- Pairetti C. Popinet S. M.D.S.N.N.N.Z.S. Bag mode breakup simulations of a single liquid droplet. En ECCOMAS, editor, *ECCM-ECFD 2018*. 2018.
- Pope S.B. *Turbulent flows*. 2001.
- Popinet S. An accurate adaptive solver for surface-tension-driven interfacial flows. *Journal of Computational Physics*, 228:5838–5866, 2009.
- Popinet S. The basilisk code. 2014.
- Popinet S. A quadtree-adaptive multigrid solver for the serre–green–naghdi equations. *Journal of Computational Physics*, 302:336–358, 2015.
- Popinet S. Numerical models of surface tension. *Annual Review of Fluid Mechanics*, (0), 2018.
- Rudman M. A volume-tracking method for incompressible multifluid flows with large density

- variations. *International Journal for numerical methods in fluids*, 28(2):357–378, 1998.
- Scardovelli R. y Zaleski S. Direct numerical simulation of free-surface and interfacial flow. *Annual review of fluid mechanics*, 31(1):567–603, 1999.
- Shinjo J. y Umemura A. Simulation of liquid jet primary breakup: Dynamics of ligament and droplet formation. *International Journal of Multiphase Flow*, 36(7):513–532, 2010.
- Sun G. y Domaradzki J.A. Implicit les using adaptive filtering. *Journal of Computational Physics*, 2018.
- Tryggvason G., Scardovelli R., y Zaleski S. *Direct numerical simulations of gas–liquid multiphase flows*. Cambridge University Press, 2011.
- van Hooft J.A., Popinet S., van Heerwaarden C.C., van der Linden S.J., de Roode S.R., y van de Wiel B.J. Towards adaptive grids for atmospheric boundary-layer simulations. *Boundary-Layer Meteorology*, páginas 1–23, 2018.
- Weymouth G.D. y Yue D.K.P. Conservative volume-of-fluid method for free-surface simulations on cartesian-grids. *Journal of Computational Physics*, 229(8):2853–2865, 2010.