



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO**  
PROGRAMA DE MAESTRÍA Y DOCTORADO EN INGENIERÍA  
INGENIERÍA MECÁNICA – TERMOFLUIDOS

ANÁLISIS NUMÉRICO DE LA ATOMIZACIÓN ULTRASÓNICA DE GASOLINA

TESIS  
QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:  
MAESTRO EN INGENIERÍA

PRESENTA:  
ING. JOSÉ EDUARDO RAMÍREZ PÉREZ

TUTOR PRINCIPAL  
DR. WILLIAM VICENTE Y RODRÍGUEZ, INSTITUTO DE INGENIERÍA

CIUDAD DE MÉXICO, DICIEMBRE 2020



Universidad Nacional  
Autónoma de México



**UNAM – Dirección General de Bibliotecas**  
**Tesis Digitales**  
**Restricciones de uso**

**DERECHOS RESERVADOS ©**  
**PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL**

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

## ➤ AGRADECIMIENTOS

Doy gracias infinitas a mi DIOS, por permitirme obtener un logro más en mi vida, ya que sin él, no hubiera podido obtener lo que ahora tengo. Por abrir mi mente y pensamiento para poder comprender diferentes cosas, las cuales sin su ayuda no hubiera podido comprender.

A mis padres y hermanas, porque gracias a su apoyo he podido salir adelante en mi vida personal y académica, por preocuparse por mí y estar pendiente de mi bienestar físico y mental.

Al Dr. William, a quien yo considero un gran ser humano y excelente maestro. Por brindarme parte de su tiempo y haberme transmitido sus conocimientos, sin los cuales este trabajo de tesis no hubiera sido, el que hoy se presenta.

A la Universidad Nacional Autónoma de México, al proyecto PAPIME PE108418 "Desarrollo de equipo y manuales para prácticas de laboratorio de motores de combustión interna" por la ayuda proporcionada para la compra de material.

Al proyecto PAPIIT IG101018 "Simulación de la combustión en motores de combustión interna usando biocombustibles, y medición de la masa de contaminantes, a fin de estructurar un inventario de emisiones en el Valle de México" por la ayuda proporcionada para la compra de material.

Se agradece al CONACYT por la beca recibida que permitió el satisfactorio desarrollo del presente proyecto.

Al Instituto de Ingeniería de la UNAM, por las facilidades otorgadas para la realización de simulaciones numéricas.

➤ **Índice**

<b>1</b>	<b>Introducción .....</b>	<b>1</b>
1.1	El campo del ultrasonido .....	1
1.1.1	Fundamentos de la onda acústica .....	2
1.2	Flujo multifásico .....	7
1.3	Métodos de análisis.....	8
1.4	Estudios realizados sobre atomización ultrasónica.....	10
1.4.1	Estudios numéricos previos .....	19
1.5	Objetivo de la tesis.....	28
<b>2</b>	<b>Ecuaciones de gobierno .....</b>	<b>29</b>
2.1	Fluidos compresibles e incompresibles .....	29
2.2	Ecuación de conservación de masa.....	29
2.3	Ecuación de conservación cantidad de movimiento .....	30
2.4	Modelo numérico para flujos multifásicos .....	31
2.4.1	Euleriano-Lagrangiano .....	31
2.4.2	Euleriano-Euleriano.....	31
2.5	Modelo de Superficie Libre .....	31
2.5.1	Método de Volumen de Fluido (VOF) .....	32
2.6	Modelo de Fuerza de Superficie Continua (CSF).....	37
<b>3</b>	<b>Método de solución .....</b>	<b>39</b>
3.1	Método de Volúmenes Finitos .....	40
3.2	Método SIMPLE.....	45
3.3	Métodos de Relajación.....	48
3.4	Discretización espacial.....	50
3.5	Condición Courant Friedrich Lewy (CFL) .....	52
<b>4</b>	<b>Sistema para simular .....</b>	<b>53</b>
4.1	Configuración a simular.....	53
4.2	Análisis numérico .....	54
4.3	Detalles numéricos.....	55
4.4	Casos para simular .....	56
4.4.1	Casos que utilizan agua y agua destilada.....	57
4.4.2	Casos para atomización de gasolina en 2D .....	59
<b>5</b>	<b>Resultados.....</b>	<b>61</b>
5.1	Análisis de flujo .....	61

5.2	Comparación de longitud de onda capilar. Configuración en 2D.....	66
5.3	Comparación de diámetros medios de partículas (gota) en configuraciones 2D...	73
5.4	Comparación de longitud de onda capilar en configuraciones 2D, aplicado a gasolina.....	77
5.5	Comparación de diámetros medios de partículas (gota) en configuraciones 2D, aplicado a gasolina.....	78
<b>6</b>	<b>Conclusiones y recomendaciones para trabajos futuros.....</b>	<b>80</b>
<b>Apéndice A</b>	<b>.....</b>	<b>85</b>
<b>7</b>	<b>Referencias.....</b>	<b>91</b>

# 1 Introducción

En este capítulo, se van a presentar los fenómenos que están asociados con potencias, frecuencias y ondas capilares, los cuales, tienen una enorme aplicación científica, ingenieril, industrial, química, médica y biológica. Algunos autores hablan sobre el ultrasonido que, “si bien es una extensión lógica de principios bien conocidos, su crecimiento ha sido señalado por el descubrimiento de fenómenos propios del nuevo rango de frecuencias”, así que exploran el “fenómeno peculiar” de las altas frecuencias definiéndolas como “ultrasonidos de potencia” cubriendo los fundamentos y desarrollos de vanguardia en el campo [40].

Para el diseño de atomizadores o inyectores ultrasónicos, se requiere del estudio que describe el fenómeno de eyección de gotas, desde que comienza con la llamada inestabilidad de Faraday hasta el momento en que ocurre la atomización; sin embargo, estos diseños y configuraciones se basan principalmente en la experimentación, en la cual la aplicación de los atomizadores ultrasónicos en estos momentos es muy poco conocida.

El alcance que tiene la atomización ultrasónica es muy amplia pero este trabajo está enfocado para atomizar diferentes fluidos líquidos, de entre los cuales se encuentra un combustible, ya que el avance en los motores de combustión interna se basa en generar una mezcla óptima de aire-combustible. El tamaño y la concentración de gotas de combustible en la neblina atomizada influyen en el proceso de combustión, así como en la correcta operación del motor.

## 1.1 El campo del ultrasonido

El ultrasonido, es definido como un sonido mayor a la frecuencia de 20 [kHz], el cual el oído humano ya no puede escuchar.

En adición a las propiedades de los materiales, las propiedades físicas del ultrasonido emitido en el líquido son considerados en la sonoquímica, que es una ciencia dentro de la física y la química que trata con fenómenos y reacciones, inducidos por ondas de choque generadas por una alta presión, y de baja y alta temperatura [39].

El campo del ultrasonido puede ser dividido en 2 áreas:

- Baja-potencia, aplicaciones a Alta-frecuencia
- Alta-potencia, aplicaciones a Baja-frecuencia

Para el caso de baja-potencia, a alta-frecuencia, el nivel de potencia aplicado al transductor es muy bajo, a menudo en el rango de ( $1E-03$  [W]), mientras que las frecuencias son muy altas, en el rango de los [MHz] o mayores [40].

Los fundamentos que sustentan la física del ultrasonido se presentan a continuación.

### 1.1.1 Fundamentos de la onda acústica

Cuando un objeto vibra en un fluido, ya sea gas o líquido, el fluido directamente en contacto con la superficie vibrante es desplazado por la componente del movimiento normal a la superficie.

Como una consecuencia de este movimiento, la presión en una capa cerca de la superficie aumenta o disminuye instantáneamente, por la acción de la contracción o expansión, respectivamente.

Subsecuentemente, el cambio de presión transitoria moverá a las partículas vecinas del fluido más allá de esta capa, y así sucesivamente; el movimiento periódico que se propaga de tal manera es una onda acústica. El desplazamiento del medio es paralelo a la dirección, en la cual, una onda acústica se propaga. Esta onda, también es llamada onda longitudinal u onda dilatacional [39].

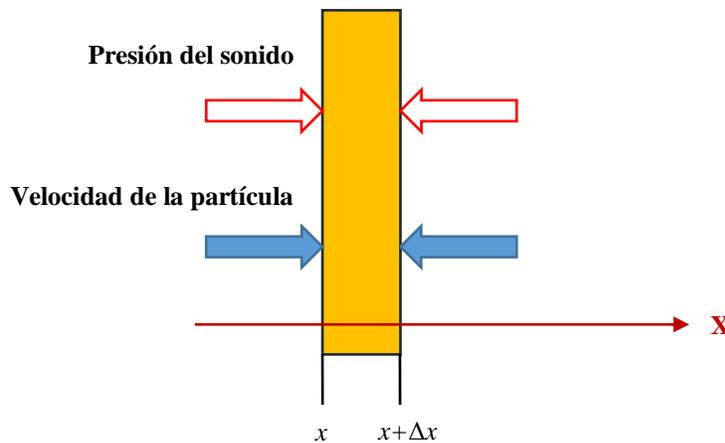
➤ **Ecuaciones básicas**

Para el caso de la propagación de una onda acústica en un fluido continuo y uniforme, y la presión y la densidad del fluido en un estado de equilibrio denotadas por  $P_0$  y  $\rho_0$ , respectivamente. Cuando una onda acústica es aplicada a un medio en este estado, las partículas que forman el medio comienzan a vibrar de manera paralela a la dirección de propagación. La velocidad de vibración  $\mathbf{u}$  es la velocidad de la partícula y ésta  $\mathbf{u}$  varía con la ubicación a lo largo de la propagación, así como también la densidad varía. El incremento de la densidad de  $\rho_0$  es denotado por  $\rho$ . En orden para describir la vibración de un fluido sin usar un vector  $\mathbf{u}$ , la velocidad potencial  $\phi$ , es definida por la siguiente ecuación [39]:

$$\mathbf{u} = -\nabla\phi = -\left(\frac{\partial\phi}{\partial x}, \frac{\partial\phi}{\partial y}, \frac{\partial\phi}{\partial z}\right) \quad (1.1)$$

donde los valores de  $\mathbf{u}, \rho$  cambian con el tiempo  $t$ .

Una onda en el plano que se propaga en la dirección  $(x)$ , se muestra en la figura 1.1, la diferencia entre las presiones que actúan sobre ambos lados de un elemento que ocupa el espacio entre  $(x)$  y  $(x+\Delta x)$  equivale a  $p(x) - p(x + \Delta x) \approx -\left(\frac{\partial p}{\partial x}\right) \Delta x$ . Esta fuerza es aplicada a una masa de  $(\rho_0 \Delta x)$ , por lo que, la ecuación de movimiento para la aceleración  $\frac{du}{dt}$  es obtenida de la manera siguiente.



**Figura 1.1.** Onda que se propaga en una dirección.

Dado que una partícula de fluido ubicada inicialmente en  $(x)$ , se desplaza a  $(x + u\Delta t)$  después de un lapso de tiempo  $\Delta t$ , la aceleración puede ser evaluada como:

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{[u(x+u\Delta t, t+\Delta t) - u(x, t)]}{\Delta t} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{[u(x+u\Delta t, t+\Delta t) - u(x, t+\Delta t) + u(x, t+\Delta t) - u(x, t)]}{\Delta t} = u \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial t} \quad (1.2)$$

Reacomodando los términos:

$$\rho_0 \left( \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} \right) = - \frac{\partial p}{\partial x} \quad (1.3)$$

Cuando  $u \approx 0$ , la ecuación (1.3) es aproximadamente igual a:

$$\rho_0 \frac{\partial u}{\partial t} = - \frac{\partial p}{\partial x} \quad (1.4)$$

Además, como se observó en la figura 1.1, mientras la masa  $\rho_0 u(x)$  fluye a través del plano  $x$ , la masa por unidad de área y unidad de tiempo  $\rho_0 u(x + \Delta x)$ , sale a través de  $(x + \Delta x)$ . La diferencia  $\rho_0 [u(x) - u(x + \Delta x)] = -\rho_0 \left( \frac{\partial u}{\partial x} \right) \Delta x$ , es básicamente el incremento de la masa entre los elementos  $(x)$  y  $(x + \Delta x)$ . Por lo que, la ecuación de continuidad se deriva de la siguiente manera:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\rho_0 \frac{\partial u}{\partial x} \quad (1.5)$$

El cambio de la presión es expresado como una función del cambio de la densidad fraccional,  $\frac{\rho}{\rho_0}$ ,

a partir de la ecuación de estado:

$$P = k \frac{\rho}{\rho_0} \quad (1.6)$$

donde  $k$  es la elasticidad de volumen.

Para un gas ideal,  $k$  esta dado como  $k = \gamma P_0$ , donde,  $\gamma$  es la relación de calor específico.

Ahora sustituyendo la ecuación (1.1) en la ecuación (1.4), se obtiene:

$$p = \rho_0 \frac{\partial \phi}{\partial t} \quad (1.7)$$

donde la presión acústica puede ser obtenida de la velocidad.

Combinando las ecuaciones (1.4), (1.5) y (1.6), para eliminar  $u$  y  $\rho$ , se obtiene lo siguiente:

$$\frac{\partial^2 p}{\partial x^2} - \frac{1}{c_0^2} \frac{\partial^2 p}{\partial t^2} = 0 \quad (1.8)$$

donde  $c_0^2$  es la ecuación de onda de d'Alembert en una dimensión, que se representa de la siguiente manera:

$$c_0^2 = \frac{k}{\rho_0} \left( \frac{\partial p}{\partial \rho} \right) \quad (1.9)$$

### ➤ Relación entre la presión acústica y la velocidad de partícula

Asumiendo una onda acústica con una velocidad de partícula de:

$$U = U_1 e^{-jkx} - U_2 e^{jkx} \quad (1.10)$$

En la ecuación (1.10), el primer término del lado derecho representa la onda de avance que viaja en la dirección  $+x$ , y el segundo término representa la onda de atraso, que viaja en la dirección  $-x$ .

En orden para asegurar que la velocidad de la partícula en la dirección de propagación es siempre positiva, un signo negativo ha sido adjuntado para el regreso de la onda [39]. Sustituyendo el valor de  $u = U e^{(j\omega t)}$ , dentro del lado derecho de la ecuación (1.5), y usando las ecuaciones (1.6) y (1.9), se obtiene:

$$P = \rho_0 c_0 U_1 e^{-jkx} + \rho_0 c_0 U_2 e^{jkx} \quad (1.11)$$

Comparando las ecuaciones (1.10) y (1.11), se observa que la presión acústica siempre toma el valor de la velocidad de la partícula, multiplicada por una constante  $\rho_0 c_0$ . La constante  $Z_0 = \rho_0 c_0$  es llamada impedancia característica o impedancia acústica específica. El valor de  $\rho_0$ ,  $c_0$ , y  $Z_0$  de algunos gases y líquidos son listados en la tabla 1.

**Tabla 1.** Propiedades acústicas en diferentes medios [39]

Medio	Densidad $\rho_0$ $\left[\frac{kg}{m^3}\right]$	Velocidad del sonido $c_0$ $\left[\frac{m}{s}\right]$	Impedancia característica $Z_0$ $\left(10^6 \left[\frac{kg}{m^2s}\right]\right)$
Agua	1000	1500	1.5
Aire	1.3	330	0.00043
Metanol	790	1120	0.88
Etanol	790	1180	0.93
Glicerina	1260	1920	2.42

### ➤ **Potencia ultrasónica**

La potencia ultrasónica está dentro del campo del ultrasonido para estudiar las aplicaciones de alta intensidad. El ultrasonido es usado para cambiar las propiedades físicas, químicas o biológicas de materiales o sistemas para el cual es aplicado. Los niveles de potencia que son usados están en el rango de 10, 100, o 1000 [W], mientras las frecuencias pueden ser del orden de 1000 [Hz]. Las frecuencias de operación comunes para aplicaciones que necesitan alta potencia estarán en el rango entre 20 y 100 [kHz].

Las aplicaciones de potencia ultrasónica están generalmente basadas en los efectos de fenómenos no lineales e incluye la distorsión de ondas, saturación acústica, presión, cavitación en líquidos, formación y movimiento de dislocaciones en sólidos [40].

Como se describió anteriormente, la partícula de fluido expuesta a la presión acústica  $p$  se mueve con una velocidad de  $u = \frac{p}{\rho_0 c_0}$ . En tal situación, el trabajo hecho por la onda acústica que actúa contra el medio, fuerza x distancia, es  $pu = \frac{p^2}{\rho_0 c_0}$ ; esta es la potencia instantánea por unidad de área [39]. Por lo tanto, la potencia acústica de la onda con una amplitud compleja  $P$  resulta en:

$$I = \frac{|P|^2}{2\rho_0 c_0} \quad (1.12)$$

La ecuación (1.12) es llamada intensidad del sonido o la intensidad ultrasónica. Dado que la intensidad  $I$  es la potencia acústica transportada por un medio en el rango de  $c_0$  [m], se observa que la energía acústica es:

$$W = \frac{|P|^2}{2\rho_0 c_0^2} = \frac{|P|^2}{2k} \quad (1.13)$$

## 1.2 Flujo multifásico

El término flujo multifásico se utiliza para referirse a cualquier flujo de fluido que consiste en más de una fase o componente. Estos elementos presentes en el flujo multifásico se clasifican en fases primarias (continua) o secundarias (dispersa). La fase primaria se caracteriza como la fase continua o de envolvente de la fase secundaria; la fase secundaria es la que se distribuye por toda la fase primaria. Cada fase presente en el flujo multifásico puede ser laminar o turbulenta, lo que conduce a una variedad de regímenes de flujo para múltiples fases en el mismo conducto [4].

Las fases físicas de la materia son de gas, líquido y sólido, pero el concepto de fase en un sistema de flujo multifásico se aplica en un sentido más amplio. En el flujo múltiple, una fase se puede definir como una clase de material que tiene una respuesta inercial particular a la interacción con el flujo y el campo en el que está inmerso. Por ejemplo, un flujo líquido con partículas sólidas de

diferentes tamaños del mismo material, se pueden tratar como diferentes fases, ya que cada conjunto de partículas con el mismo tamaño tendrá una respuesta dinámica similar a la del campo fluido.

Generalmente, se pueden identificar dos tipologías generales de flujo multifásico: *flujos dispersos* y *flujos separados*. Por *flujos dispersos* se refiere a los que consisten en partículas finitas, gotas o burbujas (fase dispersa) distribuidos en un volumen conectado de la fase continua. Los *flujos separados* constan de dos o más corrientes continuas de diferentes fluidos separados por interfases [5].

En este capítulo se va a presentar una clasificación de algunos métodos de análisis que existen y que son comúnmente utilizados con fines ingenieriles.

### 1.3 Métodos de análisis

Hay dos grandes grupos en los cuales se pueden clasificar los métodos de análisis: el método experimental y el método numérico.

Para llevar a cabo un trabajo experimental, se requiere del diseño y fabricación de un modelo físico donde se pueda realizar dicho experimento, teniendo como inconveniente de que el tiempo para obtener resultados es muy grande por el número de experimentos a realizar, así como el equipo de medición que puede ser costoso y no siempre pudiéndose colocar en el experimento de manera no intrusiva. Adicionalmente, no siempre se puede hacer el escalamiento a las escalas requeridas, por lo que, para evitar esta problemática, pero sobre todo por la rápida evolución que han tenido los recursos computacionales y la creación de algoritmos específicos, se ha generado un gran avance en la solución numérica de dichos problemas lo que da como resultado el uso de los métodos numéricos. De modo que, al utilizar esta alternativa la cual no solo es más económica o rápida,

sino que también, proporciona información más detallada de las variables implicadas en el fenómeno.

Para realizar un modelo numérico existen tres opciones, principalmente, las cuales son: simulación numérica directa (Direct Numerical Simulation, DNS), simulación de las grandes escalas (Large Eddys Simulation, LES), y por último, la técnica de las ecuaciones promediadas de Reynolds (Reynolds-Averaged Navier-Stokes Equations, RANS).

#### ➤ **DNS (Direct Numerical Simulation)**

El método DNS resuelve las ecuaciones de Navier-Stokes, tanto en flujos laminares como en turbulentos, de manera espacial y temporal, directamente, es decir, sin ninguna aproximación, lo que lo hace más preciso. A pesar de su precisión, este modelo tiene como limitación el gran tiempo de cómputo necesario para su resolución, ya que requiere un número de celdas de aproximadamente de Reynolds al cubo; lo que restringe su uso a estudios con geometrías sencillas.

#### ➤ **LES (Large Eddy Simulation)**

Dentro de las escalas espaciales y temporales presentes en los flujos turbulentos, las más efectivas para el transporte de propiedades son las grandes escalas, mientras que las demás escalas son muy débiles en el transporte de dichas propiedades. El modelo de turbulencia de las grandes escalas (LES) resuelve las escalas mayores de un flujo turbulento sin ninguna aproximación, sumando los efectos de las escalas más pequeñas a éstas; las pequeñas escalas son modeladas. Sin embargo, las simulaciones realizadas con LES exigen una gran capacidad computacional y tiempo de cálculo, la cual no se compara con la DNS, pero aun hace que este tipo de simulación sea muy costosa,

sobre todo en dominios donde se tienen geometrías complejas, ya que las simulaciones son temporales.

➤ **RANS (Reynolds-Averaged Navier-Stokes Equations)**

Los flujos estudiados en ingeniería son muy complejos, debido a esto son utilizadas aproximaciones basadas en métodos estadísticos para su estudio. Es así como surge una gran variedad de modelos desarrollados a partir de (Reynolds Averaged Navier-Stokes Equations, RANS).

Este modelo descompone todas las variables en su valor medio y su valor fluctuante, y promedia las ecuaciones de conservación en periodos de tiempo muy grandes en comparación al tiempo característico de las fluctuaciones; esto tiene como resultado la aparición de nuevos términos, los cuales requieren modelización. Para propósitos ingenieriles se está más interesado en el comportamiento del flujo medio que en los detalles de las fluctuaciones existentes, por lo que se adopta esta aproximación estadística de dichas fluctuaciones. A diferencia de los dos métodos anteriormente presentados, para este método no es necesario tener una gran cantidad de elementos discretos que compongan el dominio computacional, por lo que el tiempo de cálculo necesario para realizar las simulaciones disminuye considerablemente.

#### 1.4 Estudios realizados sobre atomización ultrasónica

Si bien es cierto que el crecimiento de la atomización ultrasónica se intensifica a partir de los años 90, es a partir de la mitad del siglo XX, que existen investigaciones realizadas donde se estudió el fenómeno.

Por ejemplo, ya en el año de 1955, **J.W.S. Rayleigh [19]**, había propuesto que la expresión para la longitud de onda capilar fuera:

$$\lambda^3 = \frac{2\pi\sigma}{\rho f^2} \quad (1.14)$$

donde  $\sigma$  es la tensión superficial del líquido atomizado,  $\rho$  es la densidad del líquido, y  $f$  es la frecuencia de las ondas superficiales en el líquido.

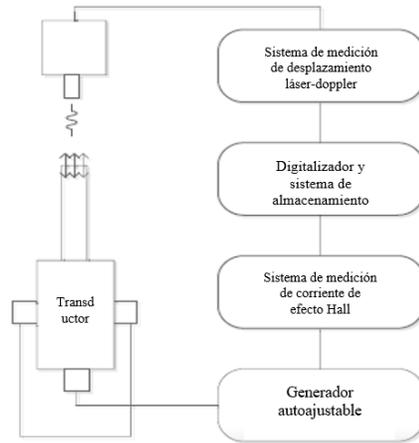
**W. Eisenmenger [7]**, demostró analíticamente que las ondas capilares oscilan a la mitad de la frecuencia de excitación. Eisenmenger, reemplazó la frecuencia capilar ( $f$ ) por la frecuencia de excitación ( $F=2f$ ) en la ecuación (1.14), la cual se convierte en:

$$\lambda_c^3 = \frac{8\pi\sigma}{\rho F^2} \quad (1.15)$$

Uno de los pioneros en la investigación de atomización ultrasónica fue **R.J. Lang [21]**, quien incluyó un factor experimental para predecir el diámetro medio  $\Phi$  de una gota atomizada:

$$\Phi = 0.34 \left( \frac{8\pi\sigma}{\rho F^2} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (1.16)$$

**D. Briceño-Gutiérrez et al. [22]**, estudiaron los fenómenos de atomización de líquidos. Para este estudio, se diseñó y construyó una configuración experimental, donde se utilizan nueve transductores ultrasónicos de alta potencia, como se muestra en la figura 1.2.



**Figura 1.2.** Esquema del experimento [22].

Para conocer la amplitud de vibración durante la experimentación, realizaron una curva entre la corriente de alimentación y la amplitud de vibración. Ellos se basaron en la teoría de la atomización desarrollada por Yu. Ya. Boguslavskii et al. [23]. Esta teoría predice el límite de atomización a partir de un modelo teórico basado en un artículo publicado por V.I. Sorokin en 1957 [24]. La teoría predice un límite para la formación de ondas capilares, y cuando una amplitud crítica ( $A_t$ ) se supera en una pequeña cantidad, las ondas capilares se vuelven inestables, sus amplitudes crecen exponencialmente y comienza la atomización. Ellos encontraron que las amplitudes obtenidas analíticamente, son inferiores a las experimentales en un tercio. Sin embargo, la curva de tendencia es similar para frecuencias de hasta 22 [kHz]. Para frecuencias superiores a 22 [kHz], los experimentos muestran valores crecientes en el límite de atomización, mientras que las predicciones teóricas continuaron disminuyendo.

**R. Pohlman et al. [25]**, propusieron una expresión para calcular la amplitud crítica de atomización, en función de la densidad ( $\rho$ ), viscosidad ( $\eta$ ), tensión superficial del líquido ( $\sigma$ ) y frecuencia ( $F$ ):

$$A_{crit} = \left(\frac{2\eta}{\rho}\right) \left(\frac{\rho}{\pi\sigma F}\right)^{\frac{1}{3}} \quad (1.17)$$

**Goodridge et al. [26], [27]**, utilizaron la escala capilar viscosa e introdujeron la frecuencia de forzado adimensional,  $\Omega = \omega v^3 \Gamma^{-2}$ , donde  $\omega$  es la frecuencia angular,  $v$  es la viscosidad cinemática y  $\Gamma$  es la tensión superficial, para estudiar la aceleración crítica de forzamiento.

Ellos encontraron que si  $\Omega \leq 10^{-5}$ , el proceso de expulsión de gotas está dominado por la tensión superficial (el régimen no viscoso), de lo contrario, está dominado por la viscosidad del fluido (el régimen viscoso).

**R. Rajan and A.B. Pandit [28]**, consideraron 3 números adimensionales:

En primer lugar, el número de Weber modificado:

$$We = \frac{fQ\rho}{\sigma} \quad (1.18)$$

El número de Ohnesorge, modificado:

$$Oh = \frac{\eta}{fA_m^2\rho} \quad (1.19)$$

El número de intensidad:

$$In = \frac{f^2 A_m^4}{cQ} \quad (1.20)$$

donde  $Q$  es el flujo volumétrico,  $A_m$  es la amplitud de la longitud de onda,  $c$  la velocidad del sonido en el fluido,  $\sigma$  es la tensión superficial y  $\eta$  es la viscosidad del fluido.

En base a estos números adimensionales encontrados experimentalmente, ellos propusieron una ecuación para el diámetro medio de gota:

$$\phi = \left( \frac{\pi\sigma}{\rho F^2} \right)^{\frac{1}{3}} (1 + A(We)^{0.22}(Oh)^{0.166}(In)^{-0.0277}) \quad (1.21)$$

donde  $F$  es la frecuencia de excitación y  $A$  es la amplitud.

Para ellos los parámetros más influyentes son: la frecuencia de excitación, la amplitud y la tensión superficial del líquido.

**M. Dobre and L. Bolle [29]**, publicaron un trabajo acerca del estudio en el diseño de atomizadores ultrasónicos, para maximizar el caudal, pero sin afectar las cualidades de la atomización.

Para cálculos prácticos, utilizaron un modelo corregido propuesto por Lang en [21], para obtener la longitud de onda:

$$\lambda = \left( \frac{16\pi\sigma}{\rho f^2} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (1.22)$$

El diámetro medio superficial, que también es llamado  $D_{30}$  lo calcularon de la siguiente forma:

$$D_{30} = 10 \frac{\sigma}{\rho f^2 \lambda} = 0.73 \left( \frac{\sigma}{\rho f^2} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (1.23)$$

Una característica importante de la atomización ultrasónica es que depende tanto de los parámetros de frecuencia como también, de las propiedades del líquido (tensión superficial, densidad).

Ellos enfocan su diseño a tres aspectos:

- Cambio de escala de todo el atomizador.
- Aumento del área de superficie de resonancia, modificando la forma de la punta del atomizador.
- Aumento de la amplitud de onda que puede lograrse si se aumenta el número de elementos piezoeléctricos.

Los resultados mostraron que el tamaño global del atomizador y la amplitud de la onda son parámetros importantes.

Ellos encontraron que al aumentar el tamaño global del atomizador en un 50%, también, aumentó el caudal de líquido atomizado en un 74%. Además, el uso de un diseño de cuatro elementos

piezoeléctricos aparte de duplicar la amplitud de la onda de superficie inicial, también aumentará el caudal en un 44%. En cambio, aumentando el área resonante, se encuentra que causa menos efecto en el caudal de líquido atomizado; si se aumenta el 100% de la superficie resonante, solo provoca un aumento del 11% del caudal de líquido atomizado.

También, ellos observaron que los efectos son acumulativos, ya que se obtiene el caudal máximo si se utiliza atomizadores más grandes y a la vez utilizan 4 piezoeléctricos.

Adicionalmente, los experimentos mostraron que cuando se aumenta la superficie resonante del atomizador disminuye ligeramente el diámetro medio en 3%. Por otro lado, cuando se aumenta la totalidad del tamaño del atomizador y el número de elementos piezoeléctricos, tendrá un efecto importante en el diámetro medio, ya que al aumentar la frecuencia se reduce el diámetro medio.

También, ellos se percataron que, si se aumenta el tamaño del atomizador, también tendrá que aumentarse el número de piezoeléctricos, ya que, si sólo se aumenta el tamaño del atomizador, aumentará el caudal de líquido atomizado, pero dará como resultado una distribución de tamaño de gota más grande, lo que alterará la atomización. Por lo que, se tendrá que aumentar simultáneamente el tamaño del atomizador y la frecuencia de resonancia.

**D. Sarkovic and V. Babovic [30]**, obtuvieron una función de densidad de probabilidad para calcular el diámetro medio de gota. Ellos encontraron que la función depende de la frecuencia a través de la longitud de las ondas capilares:

$$D = C^{-1}\lambda_c(f) \quad (1.24)$$

donde  $C$  es una constante encontrada experimentalmente con valor entre 3 y 4.

**L. Gaete-Garretón et al. [31]**, estudiaron dos parámetros críticos de la atomización ultrasónica, los cuales son: el diámetro de la gota y la amplitud de la onda, ambos en función de la frecuencia

y de la amplitud de desplazamiento de la superficie que es requerida para atomizar. El fluido de trabajo fue agua destilada y las frecuencias que se utilizaron están dentro del rango de 5 a 40 [kHz], también, utilizan 8 transductores de frecuencia resonante. Las condiciones de frontera se mantuvieron en 20 [°C] y 950 [mbar].

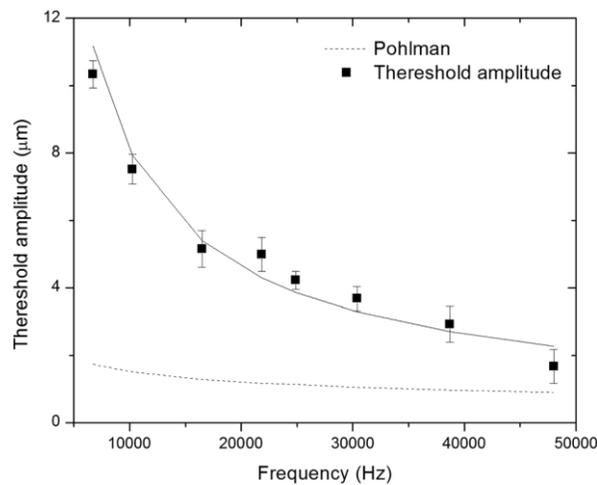
El tamaño de la gota que obtuvieron fue a través de un algoritmo que analiza las imágenes digitales de velocidad, provenientes de una cámara. Posteriormente, obtuvieron el valor promedio para el diámetro de toda la población. Además, el procesamiento de imágenes lo utilizaron para evaluar la cantidad mínima de atomización. Los intervalos pequeños de la frecuencia que usaron permitieron determinar una ecuación empírica para predecir el límite de atomización.

Al ajustar los mínimos cuadrados de los datos del límite de atomización obtuvieron una expresión de la forma siguiente:

$$A_{th} = KF^x \quad (1.25)$$

donde  $A_{th}$  es la amplitud límite de atomización,  $F$  = frecuencia [Hz], con  $K = 14\,338$  [ $\mu\text{m}$ ] y  $x = -0.8216$ .

Ellos encontraron que la expresión (1.25) tiene una mejor coincidencia de predicción con relación a la ecuación propuesta por R. Pohlman et al. [25], como se muestra en la figura 1.3.



**Figura 1.3.** Límite de atomización para agua a diferentes frecuencias [31].

Para cuantificar la distribución de diámetros de partícula a diferentes frecuencias, ellos utilizaron un criterio similar al utilizado para determinar el factor de calidad para las curvas de resonancia, es decir, en el histograma normalizado para el tamaño de partícula para cada frecuencia; se traza una línea a 3 dB por debajo del tamaño máximo, luego se determina el "ancho" de distribución y el "factor de calidad" para cada distribución. Los resultados revelaron una curva ligeramente más estrecha para frecuencias más altas. Por ejemplo, para 30 [kHz],  $Q = 3.1$  y para 6 [kHz]  $Q = 2.4$ .

**P. Deepu et al. [32]**, desarrollaron un modelo teórico basado en el mecanismo de ruptura de la onda capilar, mediante un estudio experimental.

Ellos utilizaron un nebulizador, que trabaja a una frecuencia de resonancia de  $f = 1.6$  [MHz]. Además, utilizaron los 3 fluidos siguientes: agua desionizada, mezcla acuosa de glicerol a una concentración del 30% en peso y mezclas acuosas de etanol al 5% y 10% en peso.

Ellos encontraron que la cantidad de lóbulos en las ondas capilares aumenta con el volumen de la gota, porque una gota con una longitud meridional más alta alojará una mayor cantidad de ondas superficiales. Además, para fluidos de baja tensión superficial se encuentra que la gota se va diseminando durante el proceso de atomización.

Al final de la atomización de la gota, esta alcanza una cantidad mínima de volumen, cuando se detiene la atomización. Esto se observa, cuando el radio de la base de la gota alcanza aproximadamente 0.4 [mm], independientemente del tamaño inicial de la gota. A partir de este punto, la evolución del tamaño de la gota se rige por evaporación pura.

Ellos detallaron que, en comparación con el agua, para las mezclas de etanol hay un mayor número de gotas residuales, en cambio para la mezcla de glicerol existen menos gotas residuales. Esto se debe, a que una gota de mezcla de etanol se propaga de mejor manera en la superficie vibrante, debido a que tiene menor tensión superficial en comparación con una gota de agua, y por lo tanto,

a medida que la atomización avanza, se conduce a un mayor número de gotas residuales. Sin embargo, en el caso de la mezcla de glicerol, la atomización es menos intensa debido al efecto de amortiguación por una mayor viscosidad, conduciendo a menos gotas residuales.

El tiempo de atomización medido en todos los casos varía de 33 a 700 [ms], en la cual, la velocidad de atomización promedio la definen como  $Q = \frac{V_d}{t}$ .

El tiempo necesario para que la gota de volumen,  $V_d \sim a^3$  se atomice en eventos consecutivos está dado por:

$$t_{atm} \sim \frac{V_d}{\Delta V} t_{vis} = C \frac{a \left(\frac{\sigma}{\rho}\right)^{\frac{1}{3}} e^{A\xi^2}}{\nu f^{\frac{2}{3}}} \quad (1.26)$$

El modelo muestra que la velocidad de atomización de la gota es  $Q \propto a^2$ , por lo que "Q" es independiente de la tensión superficial y fuertemente dependiente de la viscosidad.

Ellos observaron que a medida que aumenta el tamaño de la gota, también lo hace la velocidad de atomización (de manera logarítmica). También, observaron que una viscosidad más alta reduce la velocidad de atomización.

Además, ellos usaron una relación de dispersión para las ondas de gravedad capilar en un líquido de profundidad h, que se usa para predecir la longitud de onda en las ondas de superficie en el régimen no viscoso:

$$\omega^2 = \left(gk + \frac{\sigma}{\rho} k^3\right) \tanh(kh) \quad (1.27)$$

donde  $\omega$  es la frecuencia angular y  $k$  es su número de onda.

Ellos determinaron que la ruptura del ligamento ocurre cuando la fuerza de inercia supera las fuerzas viscosas, porque en escalas de longitud muy pequeña del orden de  $\lambda$ , las fuerzas viscosas son muy dominantes.

Finalmente, ellos concluyen que su modelo de primer orden propuesto explica adecuadamente la dinámica de atomización, con ésto demostraron la presencia de ondas en la superficie de la gota en respuesta a la excitación de Faraday, y que el modelo subraya que la ruptura de estas ondas de Faraday es responsable de la generación de gotas en la atomización ultrasónica.

#### 1.4.1 Estudios numéricos previos

Los trabajos anteriores sólo son una muestra, ya que investigaciones acerca de la atomización ultrasónica han aumentado considerablemente en estos últimos años. También, con el desarrollo computacional que se ha dado estos años, se han podido desarrollar algoritmos numéricos que modelan el movimiento del fluido, dando lugar al estudio de la atomización ultrasónica a través de la Dinámica de Fluidos Computacional (Computational Fluid Dynamics, CFD). Ejemplos de algunos de estos trabajos se mostrarán a continuación.

**R. Hou et al. [33]**, estudiaron la influencia de la frecuencia y la amplitud por medio de simulación numérica de una atomización de chorro de agua, en el cual, ellos hacen pasar agua a través de una boquilla que está sometida a una vibración de alta frecuencia. Para la simulación numérica, se resolvieron las ecuaciones de conservación de masa y conservación de momentum, y debido a que no existe transferencia de calor, se omitió la ecuación de conservación de la energía. El modelo de turbulencia utilizado fue el K- $\epsilon$ .

Ellos utilizaron una boquilla con un diámetro a la entrada de 4 [mm], longitud de 4 [mm], un ángulo interno de 45° y diámetro a la salida de 1 [mm]. La velocidad inicial del flujo a la entrada de la boquilla fue de 200 [m/s], la cual varía según la siguiente expresión:

$$V_t = V_0 + A \sin(\omega t + \varphi) \quad (1.28)$$

donde  $A$  es la amplitud [m/s],  $\omega$  es la frecuencia de la velocidad de entrada,  $\phi$  es el ángulo de fase en [rad], y  $V_0$  es una velocidad constante en [m/s].

Las frecuencias que utilizaron para los diferentes casos fueron: 1, 10, 100, 1000, 10000 y 100000 [Hz]; sus valores de amplitud son 40, 80, 120, 160 y 200 [m/s].

Los resultados muestran que hay un incremento en la velocidad cuándo la sección transversal de la boquilla disminuye. Además, ellos encontraron que el caudal de agua atomizada disminuyó considerablemente con el aumento de la frecuencia y la amplitud de vibración.

**R. Hou et al. [34]**, investigaron el campo de flujo, analizando un chorro de agua dentro y fuera de una boquilla excitada con vibración ultrasónica. Para realizar el estudio, ellos utilizaron el software comercial de CFD ANSYS FLUENT ®.

El chorro de agua se considera bidimensional, y el diámetro de la boquilla es de 2 [mm]. Las condiciones de frontera del problema son: presión de entrada igual a 20 [MPa] y presión de salida igual a 0.1 [MPa].

Con las vibraciones ultrasónicas operando en el extremo de la boquilla, la pared interior de la boquilla se deforma por la presión longitudinal ultrasónica. La forma de la pared interna de la boquilla cambia de una línea a una curva sinusoidal.

La ecuación que describe el movimiento del punto en la pared de la boquilla es:

$$y_w = a * \sin\left(\frac{2\pi x}{S}\right) * \sin\left(\frac{2\pi t}{T}\right) \quad (1.29)$$

donde  $y_w$  es el valor de la coordenada Y en [mm],  $a$  es la amplitud en [mm],  $x$  es el valor de la abscisa en [mm],  $t$  es cualquier tiempo en [s] y  $T$  es el período de vibración en [s].

Ellos encontraron que existe una zona de alta y baja presión, dentro y fuera de la boquilla. Además, encontraron que la velocidad del flujo aumenta y se agita con el tiempo dentro de la boquilla, y cuando el flujo es expulsado de la boquilla, la velocidad del flujo disminuye.

También, ellos manifiestan que la frecuencia más baja traerá el movimiento hacia la zona central, mientras que la frecuencia más alta tendrá la zona de velocidad más alta a la salida de la boquilla.

Ellos encontraron que el rango de ondulación de la velocidad del chorro, en la zona de alta y baja velocidad dentro de la boquilla, aumenta de 17 a 31 [m/s] cuando aumenta el valor de la amplitud.

También, mostraron que los diámetros más pequeños de los orificios internos de la boquilla tuvieron la distribución de velocidad mayoritariamente violenta dentro y fuera de la boquilla.

Los resultados de la simulación mostraron que las amplitudes más grandes producen la mayor velocidad del chorro de agua, así como la mayor diferencia de valor máximo de velocidad entre la zona de alta y baja presión.

**J. Ehrhorn and W. Semke [35]**, realizaron un análisis numérico en un dominio rectangular de agua con una profundidad de líquido de 2 [mm]. El dominio tiene un tamaño de 25 [mm] de ancho y la longitud del tamaño de la malla que se establece es de 125 [ $\mu\text{m}$ ]. La frecuencia de excitación es de 300 [Hz].

Las condiciones de frontera incluyen, la excitación de la base inferior por medio de una función sinusoidal variable en el tiempo, una condición de pared en los lados derecho e izquierdo del dominio, y una condición de superficie libre en la cara superior.

Este sistema permitió la verificación de un modelo numérico, y con esto, obtener una configuración óptima de amplitud de forzamiento y profundidad del líquido, las cuales, deben cumplirse para que ocurra la atomización.

Una vez ocurrido el fenómeno de la atomización, ellos encontraron lo siguiente:

- La película de líquido debe de ser lo suficientemente profunda para que la superficie pueda oscilar libremente. Las películas que tienen un orden de magnitud más pequeño que la longitud de onda simplemente no comenzarán a oscilar, y por encima de ella, se producirá un movimiento masivo del líquido.
- La amplitud de forzamiento debe ser lo suficientemente grande para excitar la superficie del líquido, hasta el punto donde los picos de las ondas tienen suficiente energía cinética para superar las fuerzas de resistencia.
- Una mayor tensión superficial conduce a una longitud de onda más larga, a la que el diámetro medio es proporcional.
- A medida que aumenta el tamaño de la gota, la energía cinética aumenta junto con la energía de resistencia, pero la energía cinética aumenta más rápidamente debido a la forma casi esférica de la gota expulsada.
- Gotas más grandes tenderán a iniciar el proceso de atomización mientras desestabilizan toda la superficie, posteriormente seguirán las más pequeñas.

**Y. Al-Suleimani and A. J. Yule [36]**, proporcionaron una representación gráfica del desarrollo de la onda y la producción de gotas. El código comercial ANSYS FLUENT ® se usó para modelar la vibración de una película delgada de soldadura líquida. El dominio computacional 2D se configuró para modelar 50 longitudes de onda teóricas, que se calcularon con la relación de onda capilar de Kelvin, a una frecuencia de 70 [KHz]. Los dos lados del dominio rectangular se establecieron como fronteras periódicas. El límite superior se estableció como superficie libre y la altura del dominio se ajustó para que fuera 5 veces el espesor de la película, que fue de 40 [ $\mu\text{m}$ ]. La pared inferior se estableció, como una condición por donde se le aplica el movimiento al fluido líquido mediante una excitación sinusoidal.

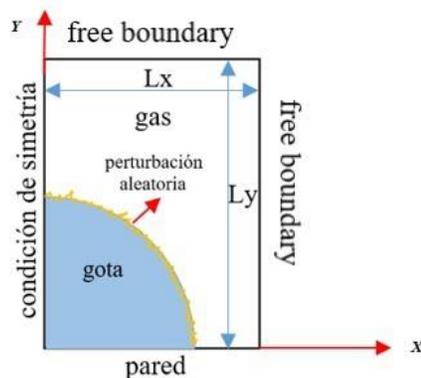
El modelo 3D tenía la forma de un cubo, donde los límites superior e inferior del cubo son similares a los prescritos en el caso 2D, las paredes laterales se configuraron como paredes sin fricción.

Los resultados mostraron que, las velocidades más altas existen en el centro del pico de la onda; el líquido cerca de su superficie se ve frenado por la tensión superficial, lo cual resulta en una acumulación de líquido en la parte superior del pico de la onda, que luego comienza a abultarse en una 'cabeza'. A medida que esto se desarrolla, el líquido en la parte superior del pico de la onda alcanza su altura máxima, mientras que el "cuello" del pico de la onda contiene líquido que continúa subiendo hacia la parte superior.

Además, ellos reportan que existe una gota principal que es de diámetro medio de, aproximadamente, 28 [μm] y una gota satélite con el diámetro medio de, 13 [μm]. Otro factor importante en la atomización de gotas es la tensión superficial, ya que actúa sobre los dos tipos de gotas dándoles mayor esfericidad a medida que avanza el tiempo.

**Y. Hua et al. [37]**, estudiaron las características de atomización de una sola gota de agua destilada bajo una fuerza de inercia dinámica. Ellos supusieron que las gotas experimentales son axisimétricas, por lo tanto, el problema se considera bidimensional.

El dominio computacional es un rectángulo que es presentado en la figura 1.4, que contiene ¼ de círculo,  $L_x = 0.75D$ ,  $L_y = D$ , donde  $D$  es el diámetro de la gota.



**Figura 1.4.** Dominio computacional.

Las ecuaciones de gobierno que se resuelven para el fluido son: ecuación de continuidad y ecuación de Navier-Stokes. Además, utilizaron un modelo para representar la tensión superficial en la interfase de los fluidos, así como el método de superficie libre para capturar la deformación superficial de las gotas.

En el estado inicial, la gota y el aire se ponen en reposo, después se aplicó una perturbación aleatoria de velocidad solo en la interfase.

Ellos encontraron que cuando la resolución de la malla es más grande que la longitud de onda de la superficie, no se pueden apreciar cambios en la deformación de la superficie, por lo que la forma de la gota es casi la misma en comparación al estado inicial.

Con el desarrollo del tiempo, las ondas estacionarias se formaron en la superficie de la gota. Luego, con la creciente amplitud de las ondas estacionarias en la superficie, se forman espigas, y finalmente, la parte superior de las espigas se rompe y las gotas se atomizan.

El diámetro de la gota atomizada, es el tamaño promedio de la gota en las direcciones horizontal y vertical. Además, ellos observaron que a medida que aumenta la frecuencia, el diámetro promedio de las subgotas primero disminuye rápidamente y luego tiende a ser estable.

**Y. Li and A. Umemura [9]**, consideraron una capa de agua destilada que descansa horizontalmente sobre una plataforma, sujeta a una vibración vertical de desplazamiento sinusoidal,  $A_0 \text{ seno } (\Omega t)$ , donde  $A_0$  es la amplitud del desplazamiento forzado,  $\Omega$  es la frecuencia de forzamiento, y  $t$  es el tiempo. El dominio de cálculo que utilizaron fue para una configuración bidimensional (2D).

Ellos observaron que cuando la fuerza desestabilizadora va hacia arriba existe una diferencia de presión; hay una presión menor en la cresta que en la película de líquido. Si la película de líquido es lo suficientemente gruesa, entonces la presión en la parte inferior debe ser uniforme para las

partes de cresta y valle. Si la diferencia de presión que existe entre la superficie de la cresta y la película del líquido es suficientemente grande como para superar la fuerza capilar restauradora, entonces se aumentará la deformación de la superficie. Este se considera el mecanismo de inestabilidad lineal, que domina en la etapa inicial cuando la deformación de la superficie es pequeña.

Ellos describieron cómo un ligamento líquido conectado a una capa líquida puede liberarse dinámicamente del movimiento de la plataforma. Cuando la deformación de la superficie es pequeña, su amplificación es causada por el flujo de líquido desde la porción de la película líquida hasta la porción de la cresta debido al flujo lineal del punto de estancamiento en la raíz de la cresta, formado durante la fase de desestabilización. La no linealidad domina gradualmente a medida que aumenta la deformación de la superficie.

**A. J. James et al. [10]**, desarrollaron un método numérico axisimétrico e incompresible para resolver las ecuaciones de Navier-Stokes, para simular la eyección de gota a través de un movimiento sinusoidal que tiene una amplitud de forzamiento, y que es sometido a una vibración de baja frecuencia. El método de volúmenes finitos fue utilizado para resolver las ecuaciones de gobierno del fluido, donde la tensión superficial es incorporada directamente en la ecuación de cantidad de movimiento. Además, ellos utilizan el modelo de volumen de fluido (VOF) para modelar el sistema multifásico.

Los grupos adimensionales se definen de la siguiente manera: el número de Reynolds  $Re = \frac{\sqrt{\rho_L \sigma V^3}}{\mu_L}$ ,

el número de Bond  $Bo = \frac{\rho_L g V^{\frac{2}{3}}}{\sigma}$ , la amplitud de forzamiento adimensional  $A = \frac{\rho_L a V^{\frac{2}{3}}}{\sigma}$ , la frecuencia

de forzamiento adimensional  $\Omega = \omega \sqrt{\rho_L V / \sigma}$ , la relación de densidad  $\alpha = \frac{\rho_G}{\rho_L}$  y la relación de

viscosidad  $\beta = \frac{\mu_G}{\mu_L}$ , donde A es la amplitud de aceleración de forzamiento dimensional,  $\omega$  es la frecuencia de forzado dimensional,  $\rho_G$  y  $\mu_G$  son la densidad y viscosidad del gas, respectivamente, y finalmente  $\rho_L$  y  $\mu_L$  son la densidad y viscosidad del líquido, respectivamente.

Ellos hicieron vibrar una sola gota de agua de 30 [ $\mu\text{l}$ ] a 61 [Hz] con una amplitud de aceleración de 66 [ $\frac{m}{s^2}$ ], donde, analizaron y compararon el fenómeno para altas y bajas amplitudes de forzamiento.

En resumen, lo que encontraron fue que: cuando la amplitud de forzamiento es alta, la inercia inicial de la gota conduce a la formación de una espiga líquida que expulsa una gota. Cuando la amplitud de forzamiento es menor, esta inercia es insuficiente y la espiga impacta la base para formar un cráter. El colapso del cráter conduce a la formación de una segunda espiga con suficiente inercia para que ocurra la expulsión de gotas. Cuando la amplitud es aún menor, la inercia de la espiga no es suficiente para conducir a la expulsión de fluido.

La formación de cráteres es un evento local y puede ocurrir en cualquier lugar de la superficie libre e incluso la eyección de gotas por este fenómeno puede ocurrir entre los regímenes de baja y alta frecuencia.

El efecto de los parámetros físicos en la eyección de gotas se cuantificó a través del volumen y velocidad de la gota expulsada, y el momento en que se produjo la expulsión. El aumento de la amplitud de forzamiento provocó que el volumen y la velocidad aumentaran, y que el tiempo de expulsión disminuyera débilmente. El aumento del número de Bond condujo a que el volumen y la velocidad de la gota eyectada disminuyeran, y que el tiempo de eyección aumentara. El incremento del número de Reynolds hizo que la velocidad aumentara considerablemente, pero afectó el volumen y el tiempo de expulsión de la gota solo débilmente. El aumento de la frecuencia de forzamiento, mientras se mantenía constante la amplitud, hizo que el volumen y la velocidad de

la gota expulsada disminuyeran y que aumentara el tiempo de expulsión. Si la amplitud de aceleración se mantenía constante, el aumento de la frecuencia de forzamiento causaba que la velocidad de la gota expulsada y el tiempo de expulsión aumentarían, pero no afectaba el volumen de la gota expulsada.

Como se pudo observar en la revisión bibliográfica, la producción de aerosoles a través de la atomización ultrasónica es un caso de estudio muy importante en aplicaciones para diferentes áreas. Sin embargo, la mayoría de las frecuencias de excitación en que se ha estudiado este fenómeno tanto experimental como numéricamente, están en el rango de los [Hz] y [kHz], pero para producir partículas más finas en los aerosoles, ya que en muchas aplicaciones se requiere que las partículas atomizadas sean demasiado pequeñas, se necesita utilizar frecuencias que estén en rangos más altos, del orden de [MHz]. Por este motivo, en este trabajo de tesis se utilizarán altas frecuencias de excitación para analizar el comportamiento del fenómeno y la repercusión que se tiene en las partículas producidas dentro de este rango de operación.

De esta manera, el objetivo de la tesis es anunciado a continuación.

## 1.5 Objetivo de la tesis

### ➤ **Objetivo general**

- Simular numéricamente el fenómeno de la atomización ultrasónica de líquidos para eyectar gotas de diámetro pequeño utilizando gasolina como fluido de trabajo.

### ➤ **Objetivos particulares**

- Realizar un modelo numérico en 2D que permita validar/verificar los resultados numéricos en términos del tamaño de longitud de onda capilar y del diámetro medio de gota, con resultados experimentales y teóricos que existen en la literatura. En este modelo se considerará la fuerza de gravedad y tensión superficial.
- Implementar un modelo numérico que opere a altas frecuencias de excitación, así como que el fluido de trabajo sea gasolina, lo que permitirá determinar el tamaño de la longitud de onda capilar y el diámetro medio de gota, los cuales, serán también verificados con resultados teóricos.

## 2 Ecuaciones de gobierno

A continuación, se presentan las ecuaciones que gobiernan el movimiento del fluido en el cual se producen ondas superficiales que permiten su atomización; es decir, conservación de masa y de cantidad de movimiento. Además, hay que considerar que el fenómeno en estudio se hace a escalas muy pequeñas, por lo que el régimen de flujo es laminar y se tiene una geometría multidimensional. Primeramente, se presentan las ecuaciones (instantáneas) que gobiernan el flujo y después, dada la naturaleza del fenómeno flujo multifásico, se presentan los modelos de superficie libre que son introducidos en la segunda parte. Las ecuaciones de conservación se presentan para un sistema de coordenadas cartesianas.

Los detalles del desarrollo de la ecuación de conservación de cantidad de movimiento se encuentran en el Apéndice A de esta tesis. En este capítulo únicamente se encuentra una pequeña descripción y conceptos necesarios de la ecuación mencionada.

### 2.1 Fluidos compresibles e incompresibles

Aquellos flujos donde las variaciones en densidad son insignificantes o bien si el fluido tiene una densidad aproximadamente constante se denominan *incompresibles*; cuando las variaciones en densidad dentro de un flujo no se pueden despreciar, se llaman *compresibles*.

### 2.2 Ecuación de conservación de masa

La ecuación de continuidad representa la ley de conservación de masa, la forma integral de la ecuación se puede expresar como:

$$\underbrace{\left(\frac{dm}{dt}\right)_{\text{Sistema}}}_{\text{Cambio de masa con respecto al tiempo}} = \underbrace{\frac{\partial}{\partial t} \iiint_{vc} \rho dV}_{\text{Cambio de masa en el volumen de control}} + \underbrace{\iint_{sc} \rho \vec{v} \cdot n dA}_{\text{Intercambio de masa en la superficie}} \quad (2.1)$$

Al aplicar la ecuación (2.1) en un volumen diferencial infinitesimal, se obtiene la ecuación diferencial de continuidad:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla(\rho \vec{V}) = 0 \quad (2.2)$$

donde  $\rho$ ,  $\vec{V}$ ,  $t$  son respectivamente, la densidad, el vector velocidad y el tiempo.

### 2.3 Ecuación de conservación cantidad de movimiento

Con la aplicación del teorema de transporte de Reynolds, se tiene la expresión general para conservar la cantidad de movimiento lineal como se aplica a un volumen de control:

$$\sum \vec{F} = \int_{VC} \rho \vec{g} dV + \int_{SC} \sigma_{ij} \cdot \vec{n} dA = \int_{VC} \frac{\partial}{\partial t} (\rho \vec{V}) dV + \int_{VC} (\rho \vec{V}) \vec{V} \cdot \vec{n} dA \quad (2.3)$$

Para generar una ecuación diferencial para la conservación de cantidad de movimiento lineal, se hace la suposición que el volumen de control alcanza un tamaño infinitesimal. En el límite, todo el volumen de control se encoge a un punto en el flujo.

Para finalizar, se combinan las tres componentes en una ecuación vectorial; el resultado es la ecuación de Navier-Stokes para flujo incompresible con viscosidad constante.

*Ecuación de Navier-Stokes:*

$$\rho \frac{D\vec{V}}{dt} = -\vec{\nabla}P + \rho \vec{g} + \mu \nabla^2 \vec{V} \quad (2.4)$$

## 2.4 Modelo numérico para flujos multifásicos

Existen 2 tipos de aproximaciones para el cálculo de flujos multifásicos.

### 2.4.1 Euleriano-Lagrangiano

La fase continua se resuelve con las ecuaciones de Navier Stokes y la fase dispersa se resuelve por un rastreo de muchas partículas, gotas, o burbujas a través del campo de flujo. La fase dispersa puede intercambiar momentum, masa y energía con la fase continua.

Este método se hace mucho más simple cuando las interacciones partícula-partícula pueden ser despreciadas, para estos casos es necesario que la fase dispersa ocupe una baja cantidad de fracción de volumen, de lo contrario, el método se vuelve inapropiado cuando la fracción de volumen de la segunda fase no puede ser despreciada.

### 2.4.2 Euleriano-Euleriano

Las distintas fases son tratadas matemáticamente como continuas; el volumen de una fase no puede ser ocupado por la otra fase. En este caso se derivan ecuaciones de continuidad para cada fase, obteniendo un sistema de ecuaciones de estructura similar para cada una de las fases, para esta aproximación existen 3 diferentes modelos disponibles: VOF, Mixture y Euleriano [3].

## 2.5 Modelo de Superficie Libre

En este caso, se utilizará el método de volumen de fluido (VOF), el cual, es una variante simplificada del modelo Euleriano-Euleriano, debido a que para el modelo VOF no se necesitan resolver las ecuaciones de conservación para cada fase, sino que solamente resuelve una ecuación para ambas fases adicional a las ecuaciones de conservación de masa y cantidad de movimiento,

teniendo como identificador un valor escalar “ $\alpha$ ”, el cual diferencia una fase respecto a otra. A continuación, se explica a detalle el modelo VOF.

### 2.5.1 Método de Volumen de Fluido (VOF)

En [38], definieron una función  $\alpha$  en la cual, su valor es 1 en cualquier punto ocupado por la fase líquida y 0 por la fase gaseosa; el valor promedio de  $\alpha$  en una celda representará la fracción de volumen de la celda ocupada por el líquido. En particular, un valor de 1 de  $\alpha$  corresponderá a una celda llena de líquido, mientras un valor de 0 indicará que la celda no contiene líquido.

Las celdas con valores de  $\alpha$  entre 0 y 1 deben contener a la interfase. El modelo de fracción de volumen (VOF) acorde al movimiento de la interfase, es una ecuación de transporte adicional a las ecuaciones de conservación.

Primero, se considera un dominio  $\Omega$  compuesto de regiones de fase líquida y fase gaseosa, la cuales se denotan como  $R_l$  y  $R_g$ , respectivamente, definiendo un indicador de la siguiente manera:

$$\alpha(x, t) = \begin{cases} 1 & \text{para } x \in R_l \\ 0 & \text{para } x \in R_g \end{cases} \quad (2.5)$$

Para discretizar la expresión (2.5), se integra sobre el volumen de la celda  $\Omega_i$ :

$$\gamma(x_i, t) = \frac{1}{|\Omega_i|} \int_{\Omega_i} \alpha(x, t) dV \quad (2.6)$$

Ahora, para describir el campo de densidad de la ecuación de conservación de masa (2.2) se usa la expresión:

$$\rho(x, t) = \rho_l \alpha(x, t) + \rho_g (1 - \alpha(x, t)) \quad (2.7)$$

donde  $\rho_l$  y  $\rho_g$  son valores constantes en cada fase.

De manera análoga a la ecuación (2.7), el campo de viscosidad se representa de la siguiente manera:

$$\mu(x, t) = \mu_l \alpha(x, t) + \mu_g (1 - \alpha(x, t)) \quad (2.8)$$

donde  $\mu_l$  y  $\mu_g$  son valores constantes en cada fase.

Introduciendo la ecuación (2.7) en la ecuación (2.6) queda:

$$\frac{\partial}{\partial t} [\rho_l \alpha(x, t) + \rho_g (1 - \alpha(x, t))] + \nabla \cdot [\vec{V} (\rho_l \alpha(x, t) + \rho_g (1 - \alpha(x, t)))] = 0 \quad (2.9)$$

Reacomodando:

$$(\rho_l - \rho_g) \frac{\partial}{\partial t} [\alpha(x, t)] + \nabla \cdot [\vec{V} (\rho_l - \rho_g) \alpha(x, t)] + \rho_g \nabla \cdot \vec{V} = 0 \quad (2.10)$$

Integrando la ecuación (2.10) sobre el volumen de la celda  $\Omega_i$ , se obtiene como resultado:

$$\int_{\Omega_i} (\rho_l - \rho_g) \frac{\partial}{\partial t} \alpha(x, t) dV + \int_{\Omega_i} \nabla \cdot [\vec{V} (\rho_l - \rho_g) \alpha(x, t)] = 0 \quad (2.11)$$

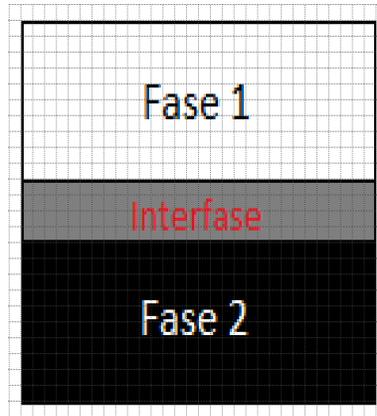
Siguiendo la definición de la fracción de volumen líquido de la ecuación (2.6) y usando la regla integral de Leibniz, la ecuación (2.11), se reescribe como:

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (U \alpha) = 0 \quad (2.12)$$

La expresión (2.12), es una ecuación de advección que representa el modelo de superficie libre y  $\alpha$  se define en todo el dominio computacional.

- ✓ Celda ocupada solo por la fase líquida,  $\alpha = 1$ .
- ✓ Celda ocupada solo por la fase gaseosa,  $\alpha = 0$ .

- ✓ Celda ocupada por las fases líquida y gaseosa, lo que significa que existe una interfase en esta celda,  $\alpha \in [0, 1]$ .



*Figura 2.1. Esquema del modelo VOF en un dominio discretizado.*

Sin embargo, cuando la ecuación (2.12) está siendo integrada sobre una celda computacional, la tasa de cambio de  $\alpha$  está equilibrada por los flujos que cruzan a través de las caras de la celda. El éxito del método VOF depende de preservar la definición nítida de la interfase y así poder disminuir la llamada difusión numérica, por lo que el método VOF utiliza un modelo con el fin de conservar la nitidez de la interfase.

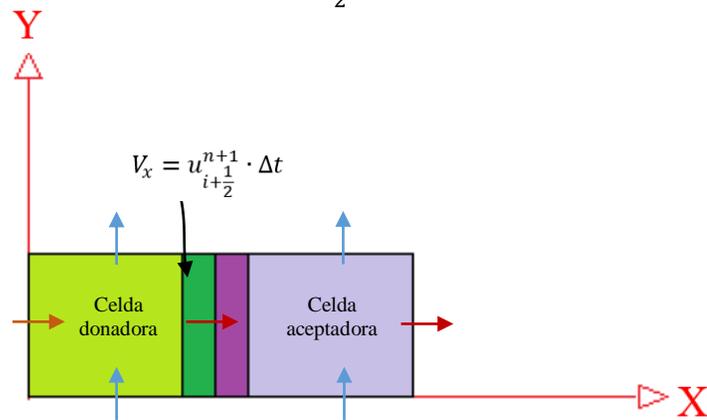
Existen diferentes modelos para la reconstrucción de la interfase y seguir preservando la nitidez de ésta. Los 2 modelos más utilizados en la revisión bibliográfica son: el modelo Donante-Aceptador y el modelo Piecewise Linear Interface Calculation, por sus siglas en inglés PLIC. Este último, es conocido con el nombre de Geo-Reconstruct.

#### ➤ **Modelo Donante-Aceptador**

Este esquema identifica dos celdas, en la cual, a una la identifica como celda donadora de una cantidad de fluido y a la otra celda (adjunta) la identifica como la celda aceptadora de la misma cantidad de fluido que proviene de la celda donadora.

El proceso se describe mejor considerando solo un flujo dirigido a lo largo del eje x, por lo que, la cantidad de fracción de volumen  $\alpha$  que fluye a través de la cara derecha de la celda donadora durante un incremento de tiempo  $t$ , se muestra en la figura 2.2. En este caso, el signo de  $u$  define las celdas donadoras y aceptadoras, por ejemplo, si  $u$  es positivo, la celda oeste es la donante y la celda este es la aceptadora. La cantidad de fracción de volumen por unidad de área, que cruza la cara de la celda durante un solo paso de tiempo se puede determinar como se muestra en la figura 2.2, si la celda donadora está llena, es decir,  $\alpha_d = 1$ , y la celda aceptadora está vacía, es decir,  $\alpha_a = 0$ , la cantidad de volumen por unidad de área fluida a través de la interfase viene dada por:

$$V_x = u_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} \cdot \Delta t \quad (2.13)$$



*Figura 2.2. Esquema donante-aceptador.*

El cálculo de la superficie libre se completa multiplicando el flujo por la cara de la celda para obtener la cantidad de líquido que debe sustraerse de la celda donadora y agregarse a la celda aceptadora.

➤ **Piecewise Linear Interface Calculation (PLIC)**

En el enfoque de reconstrucción geométrica, los esquemas de interpolación estándar se utilizan para obtener los flujos en la cara cada vez que una celda se llena completamente con una fase u otra. Cuando la celda está cerca de la interfase entre dos fases, se utiliza el esquema PLIC. Este

esquema representa la interfase entre fluidos utilizando un enfoque lineal a tramos. El esquema PLIC se generaliza para mallas no estructuradas a partir de [42]. Asume que la interfase entre dos fluidos tiene una pendiente lineal dentro de cada celda y utiliza esta forma lineal para el cálculo de la advección de fluido a través de las caras de las celdas.

El primer paso en este esquema de reconstrucción es el cálculo de la posición de la interfase lineal. Para esto, se utiliza un segmento de línea con una pendiente para aproximar la interfase en cada celda con  $0 < \alpha < 1$ . Cada segmento de línea se define mediante la siguiente ecuación:

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{X} + \rho = 0 \quad (2.14)$$

donde  $\mathbf{n}$  es la normal a la línea,  $\mathbf{X}$  es un punto en la línea y  $\rho$  es la constante de línea.

La dirección normal del segmento de línea  $\mathbf{n}$  en la ecuación (2.12) se puede determinar por el gradiente de la fracción de volumen:

$$\mathbf{n} = \frac{\nabla \alpha}{|\nabla \alpha|} \quad (2.15)$$

La constante de línea ( $\rho$ ) se deriva de la aplicación de la conservación de masa. Las celdas computacionales se definen (en 2D) como polígonos de  $n$  lados dados por un conjunto de  $n$  vértices  $\mathbf{X}_v = (x_v, y_v)$ .

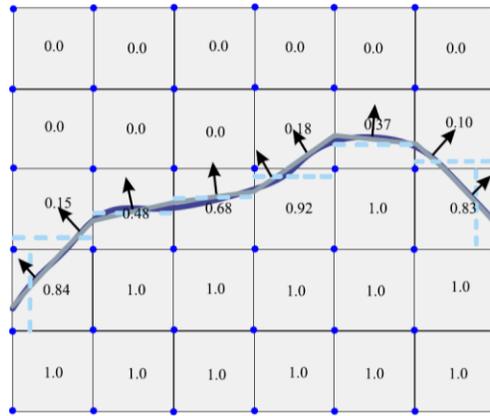
Cualquier celda que tenga fracciones de volumen  $0 < \alpha < 1$  tendrá una interfase definida por (2.14).

El segundo paso es el cálculo de la cantidad advección de fluido a través de cada cara, usando la representación computarizada de la interfase lineal de la ecuación (2.12) y la información de la velocidad en la cara.

El tercer paso es el cálculo de la fracción de volumen en cada celda utilizando el balance de los flujos calculados durante el paso anterior.

Un esquema representativo de la fracción de volumen de fluido junto con la interfase se muestra en la figura 2.3, donde, una vez que se integra la ecuación de advección (2.12) y se resuelve la

ecuación (2.14) del modelo PLIC, se va reconstruyendo la interfase por las celdas en donde no están ocupadas completamente de un fluido u otro.



**Figura 2.3.** Esquema de la fracción de volumen y la interfase [41].

Existen modelos de tensión superficial disponibles para el método VOF. Para este caso se utiliza el modelo de Fuerza de Superficie Continua (CSF).

## 2.6 Modelo de Fuerza de Superficie Continua (CSF)

Este modelo fue propuesto en [2], la fuerza de tensión superficial puede expresarse como una fuerza volumétrica por el teorema de la divergencia y ha sido implementado tal que la suma de la tensión superficial en los cálculos de VOF resultan en un término fuente en la ecuación de momento. De tal modo que la ecuación (2.4) queda de la siguiente manera:

$$\rho \frac{D\vec{V}}{dt} = -\vec{\nabla}P + \rho\vec{g} + \mu\nabla^2\vec{V} + \vec{F}_\sigma \quad (2.16)$$

donde el término  $\vec{F}_\sigma$  de la ecuación (2.16) representa el vector fuente que solamente es aplicado a las celdas que contienen una interfase líquido-gas y está dada por:

$$\vec{F}_\sigma = \sigma k \nabla \alpha \quad (2.17)$$

donde  $\sigma$  es la tensión superficial,  $k$  es la curvatura de la interfase, definida por:

$$k = \nabla \cdot \mathbf{n} \quad (2.18)$$

El vector normal a la curvatura de la interfase en la ecuación (2.18) se puede determinar por el gradiente de la fracción de volumen, que se presenta en la siguiente ecuación:

$$\mathbf{n} = \frac{\nabla \alpha}{|\nabla \alpha|} \quad (2.19)$$

### 3 Método de solución

En este capítulo se presenta el método de solución, el cual se utiliza para poder resolver las ecuaciones de Navier-Stokes presentadas en el capítulo 2, las cuales son necesarias para la resolución de problemas, como es el caso de esta tesis.

Para la resolución de problemas relacionados con el flujo de fluidos, se utilizan las ecuaciones de Navier-Stokes, que proporcionan un modelo que describe el comportamiento en tres dimensiones del fluido, lo que resulta en una ecuación para cada dirección de algún sistema coordinado. Sin embargo, este sistema de ecuaciones diferenciales carece de una solución analítica, por lo que se tiene que recurrir al uso de métodos numéricos para obtener una solución.

En este tipo de situaciones es conveniente utilizar la Dinámica de Fluidos Computacional (Computational Fluid Dynamic, CFD), que permite resolver y analizar problemas que involucran el flujo de fluidos mediante la solución numérica de las ecuaciones de Navier-Stokes lo que significa utilizar un dominio discreto, es decir, poner una malla sobre el sistema, con lo cual se obtendrá una ecuación algebraica en cada punto de interés del sistema (celda), para posteriormente darle una solución.

El proceso que se tiene en la Dinámica de Fluidos Computacional es:

1. Selección y discretización del dominio de cálculo.
2. Integración de las ecuaciones en los subdominios de cálculo, que tiene como resultado ecuaciones algebraicas.
3. Selección de las condiciones iniciales y condiciones de frontera en el dominio de cálculo.
4. Solución de las ecuaciones algebraicas mediante métodos numéricos.
5. Análisis de resultados.

### 3.1 Método de Volúmenes Finitos

Mediante una ecuación general de transporte en términos del promediado de Favre, se pueden representar las ecuaciones medias de continuidad y cantidad de movimiento, donde la variable dependiente está representada por  $\tilde{\phi}$ :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{\phi}) + \nabla \cdot (\bar{\rho}\tilde{u}_i\tilde{\phi}) - \nabla \cdot (\Gamma_\phi \nabla \phi) = \bar{S}_\phi \quad (3.1)$$

donde  $\Gamma_\phi$  es el coeficiente de difusión y  $\bar{S}_\phi$  es el término fuente. Los términos del lado izquierdo de la ecuación (3.1) son el término transitorio, convectivo y difusivo, respectivamente. Los términos  $\Gamma_\phi$  y  $\bar{S}_\phi$  están especificados para cada variable  $\tilde{\phi}$ , la cual, representa a la propiedad media analizada, por ejemplo, si el valor de ésta es la unidad entonces la ecuación resultante es la de conservación de masa, si ésta es la entalpía, como resultado se tiene la ecuación de la energía.

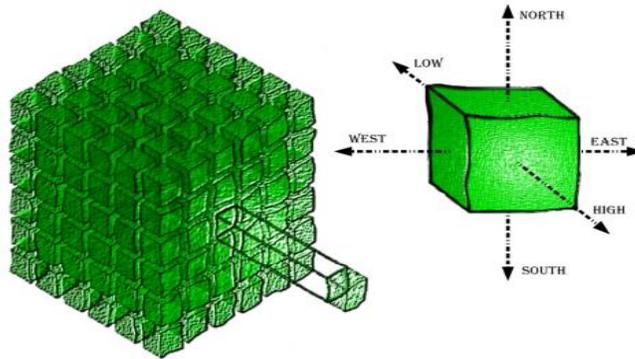
El Método de Volúmenes Finitos se deriva de realizar la integración temporal y espacial de la ecuación general de transporte.

$$\underbrace{\int_{\Delta t} \frac{\partial}{\partial t} \iiint_{vc} \phi \rho dV dt}_{\text{Término Temporal}} + \underbrace{\int_{\Delta t} \iiint_{vc} \nabla \cdot (\phi \rho \vec{v}) dV dt}_{\text{Término Convectivo}} = \underbrace{\int_{\Delta t} \iiint_{vc} \nabla \cdot (\Gamma_\phi \nabla \phi) dV dt}_{\text{Término Difusivo}} + \underbrace{\int_{\Delta t} \iiint_{vc} S_\phi dV dt}_{\text{Término Fuente}} \quad (3.2)$$

La ecuación general (3.1), se puede discretizar con el método de volúmenes finitos. Con este método, el dominio se divide en pequeños volúmenes de control (figura 3.1), asociando a cada uno de ellos un punto nodal. De manera similar, se discretiza el tiempo en intervalos temporales. La ecuación diferencial resultante, se integra en cada volumen de control y en cada intervalo temporal, y el resultado es una ecuación discretizada que relaciona los valores de  $\tilde{\phi}$  para un determinado grupo de puntos nodales. Esta ecuación algebraica expresa el principio de conservación de  $\tilde{\phi}$  en el volumen finito, de la misma manera que la ecuación diferencial lo expresa para un volumen infinitesimal. La ecuación algebraica para un nodo P puede expresarse en forma general como:

$$a_P \tilde{\phi}_P = \sum_{i,I=E,W,N,S,H,L} a_i \tilde{\phi}_I + a_T \tilde{\phi}_T + B \quad (3.3)$$

donde el subíndice  $I$  representa las celdas vecinas,  $i$  la cara entre las celdas  $P$  e  $I$ ,  $T$  el valor correspondiente en el intervalo temporal anterior, y  $B$  el término fuente. La deducción detallada de la ecuación (3.3) puede consultarse en [16] y [17], así como en un gran número de textos de dinámica de fluidos computacional [44].



**Figura 3.1.** Representación del sistema discretizado en volúmenes finitos.

En el caso de una malla cartesiana, escalonada (“staggered”) y uniforme (celdas de iguales dimensiones espaciales), se puede emplear por sencillez un volumen de control bidimensional, como el que se muestra en la figura 3.2 (el espesor de la celda en dirección  $z$  puede considerarse

la unidad.) En una malla escalonada, las variaciones se encuentran definidas en el centro de la celda, mientras que las componentes de velocidad en cada dirección, correspondientes a la celda, se encuentran desplazadas a las caras de la celda.

En la figura 3.2, se muestra la notación de la celda y de sus vecinas. Dada una celda P, sus vecinas se nombrarán según las iniciales de los puntos cardinales (en inglés) en las direcciones “x” e “y” y como “Low” y “High” en la dirección z. Las caras de la celda se nombran con la misma nomenclatura, pero con letras minúsculas. A su vez, el tiempo también se discretiza. Las celdas en la dirección temporal se llaman intervalos temporales. La celda P en el paso temporal se nota como T.

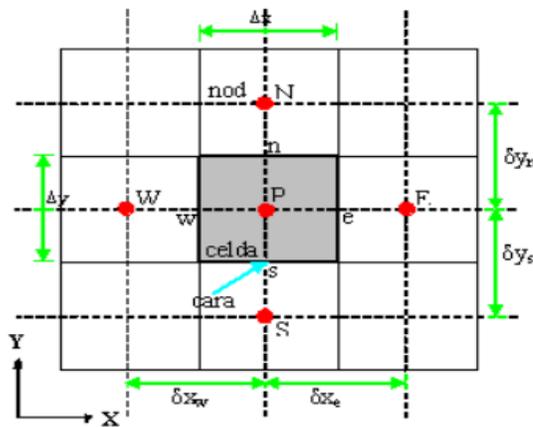


Figura 3.2. Diagrama esquemático de un volumen de control bidimensional.

Los métodos que se utilizan son los llamados esquemas de discretización, que plantean la utilización de dos parámetros para definir el valor de los coeficientes “a” de la ecuación (3.3). Definiendo los símbolos como, la fuerza de convección o flujo (F), la conductancia de difusión (D), y el número de Peclet (Pe), que es una relación entre la convección y la difusión, quedando definidos de la siguiente forma:

$$F = \bar{\rho} \tilde{v}_i, \quad D = \frac{\Gamma}{\delta_i}, \quad Pe = \frac{F}{D} \quad (3.4)$$

donde  $\tilde{v}_i$  es la velocidad en la cara  $i$ ,  $\delta_i$  es la distancia entre los nodos que incluyen la cara  $i$ . Las expresiones para  $F$  y  $D$  representan el efecto de los términos convectivo y difusivo, respectivamente, de la ecuación de transporte (3.2).

Los coeficientes  $a_i$  de la ecuación (3.3) son:

$$a_i = D_i f(|Pe|_i) + \max(-F_i, 0) \quad (3.5)$$

Los valores  $F$  y  $D$  en la cara de la celda de la ecuación (3.5) son:

$$F_i = (\bar{\rho} \tilde{v})_i \Delta_i \quad D_i = \frac{\Gamma_i \Delta_i}{(\delta i)}, i = n, s, e \quad (3.6)$$

donde  $\Delta_i$  es la longitud de la cara  $i$ .

Para determinar  $F_i$  se necesita conocer  $\bar{\rho}$  y  $\tilde{u}_i$  en la cara de la celda. El cálculo del término convectivo de la ecuación de transporte (3.2) requiere también el conocimiento de la variable escalar,  $\tilde{\phi}$ , en la cara de la celda. La velocidad  $\tilde{v}_i$  está calculada en la cara de la malla escalonada; pero  $\tilde{\rho}$  y  $\tilde{\phi}$  están calculados en el nodo y necesitan ser interpolados en la cara para calcular los coeficientes  $a_i$  de la ecuación discretizada (3.3).

La obtención de estas variables en la cara de la celda es importante para la precisión y convergencia de la solución. El cálculo de  $\tilde{\rho}$  y  $\tilde{\phi}_i$  da lugar a los llamados esquemas de discretización. La función  $f(|Pe|)$  de la ecuación (3.5) depende del esquema de interpolación; por ejemplo, en el esquema de diferencias desplazadas,  $f(|Pe|) = 1$ . Para el sistema híbrido [18]:

$$f(|Pe|) = \max(0.1 - 0.5|Pe|) \quad (3.7)$$

El coeficiente para el término transitorio es:

$$a_T = \frac{\bar{\rho}_T \Delta x \Delta y}{\Delta t} \quad (3.8)$$

Para el cálculo del término  $D_i$  de la ecuación (3.6) se necesita obtener el coeficiente de difusión,  $\Gamma$ , en la cara de la celda. El coeficiente  $\Gamma$  no es necesariamente una constante, probablemente puede ser función de valores variables que se conocen en los nodos (por ejemplo, la temperatura) y por tanto es necesario interpolarlo en la cara.

El término fuente de la ecuación general (3.1),  $\tilde{S}_\phi$ , se linealiza como:

$$\bar{S}_\phi = \bar{S}_{\phi,c} + \bar{S}_{\phi,v} \tilde{\phi}_P \quad (3.9)$$

donde el término  $\bar{S}_{\phi,v}$  se elige de acuerdo con la relación existente entre  $\bar{S}_\phi$  y  $\tilde{\phi}$ , en caso de depender el primero del segundo. El objetivo de la linealización del término fuente es mejorar la convergencia de la solución.

Con esta suposición, los términos  $B$  y  $a_p$  de la ecuación (3.3) son:

$$B = \bar{S}_{\phi,c} \Delta x \Delta y + a_T \tilde{\phi}_T \quad (3.10)$$

$$a_p = a_e + a_w + a_n + a_s + a_T - \bar{S}_{\phi,v} \Delta x \Delta y \quad (3.11)$$

La ecuación (3.3) se aplica en cada celda del dominio, para cada  $\tilde{\phi}$  y para cada paso temporal  $\Delta t$ , por lo que se tiene un sistema de ecuaciones lineales (los coeficientes "a" pueden depender, directa o indirectamente de  $\tilde{\phi}$ , por lo que el sistema es realmente pseudo-lineal).

Para resolver este sistema de ecuaciones se puede utilizar cualquier método de resolución de ecuaciones lineales.

### 3.2 Método SIMPLE

En el cálculo de las velocidades a partir de las ecuaciones de cantidad de movimiento, se tiene el inconveniente de que la presión, cuyo gradiente aparece como término fuente en las ecuaciones de cantidad de movimiento, no tiene una ecuación propia para calcularla. Una solución ampliamente utilizada, es transformar la ecuación de continuidad en una ecuación para la presión.

Entre los algoritmos iterativos que se basan en este procedimiento, están los de la familia SIMPLE (Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations) [43]. El algoritmo utilizado en esta tesis para resolver el problema de acoplamiento velocidad-presión pertenece a esta familia.

A continuación, se realizará el análisis bidimensional para la presión, siendo  $\Delta z=1$ :

$$-\frac{\partial P}{\partial x} = -\frac{P_E - P_W}{\Delta x} \rightarrow -\frac{\partial P}{\partial x} = -\frac{P_W - P_E}{\Delta x} \Delta x \Delta y \Delta z \rightarrow (P_W - P_E) \Delta y \quad (3.12)$$

$$-\frac{\partial P}{\partial y} = -\frac{P_N - P_S}{\Delta y} \rightarrow -\frac{\partial P}{\partial y} = -\frac{P_S - P_N}{\Delta y} \Delta x \Delta y \Delta z \rightarrow (P_S - P_N) \Delta x \quad (3.13)$$

Considerando en la expresión (2.2) a la densidad=cte, y discretizándola se obtiene:

$$(\rho u)_e A_e - (\rho u)_w A_w + (\rho v)_n A_n - (\rho v)_s A_s = 0 \quad (3.14)$$

$$F_e - F_w + F_n - F_s = 0 \quad (3.15)$$

Las ecuaciones discretizadas para la cantidad de movimiento en ambas direcciones son:

$$a_p u_p^* = \sum_{CV} a_{CV} u_{CV}^* + (P_W^* - P_E^*) \Delta y + b \quad (3.16)$$

$$a_p v_p^* = \sum_{CV} a_{CV} v_{CV}^* + (P_S^* - P_N^*) \Delta x + b$$

Siendo los valores propuestos para las velocidades y presiones al inicio de las iteraciones denotados con (\*), la corrección para cada término con (') y se representa a las celdas vecinas como CV. De este modo se define a la presión y a las velocidades en función de un valor propuesto y una corrección.

$$\begin{aligned}
 P &= P^* + P' \\
 u &= u^* + u' \\
 v &= v^* + v'
 \end{aligned}
 \tag{3.17}$$

Para los valores de las correcciones se tiene:

$$a_P u'_P = \sum_{CV} a_{CV} u'_{CV} + (P'_W - P'_E) \Delta y \rightarrow u'_P = (P'_W - P'_E) \frac{\Delta y}{a_P} \quad ; \quad \frac{\Delta y}{a_P} = dp$$

(3.18)

$$a_P v'_P = \sum_{CV} a_{CV} v'_{CV} + (P'_S - P'_N) \Delta x \rightarrow v'_P = (P'_S - P'_N) \frac{\Delta x}{a_P} \quad ; \quad \frac{\Delta x}{a_P} = dp$$

Sustituyendo los valores de las velocidades corregidas en el nodo P y cada una de las caras en las expresiones para la velocidad en (3.17), el resultado es:

$$\begin{aligned}
 u_P &= u_P^* + dp(P'_W - P'_E) \quad , \quad v_P = v_P^* + dp(P'_S - P'_N) \\
 u_w &= u_w^* + dw(P'_W - P'_P) \quad , \quad v_s = v_s^* + ds(P'_S - P'_P) \\
 u_e &= u_e^* + de(P'_P - P'_E) \quad , \quad v_n = v_n^* + dn(P'_P - P'_N)
 \end{aligned}
 \tag{3.19}$$

Valores que son usados en la ecuación (3.14) y al desarrollarse genera:

$$\underbrace{(\rho_e de \Delta y) P'_E}_{a_E} - \underbrace{(\rho_w dw \Delta y) P'_W}_{a_W} + \underbrace{(\rho_n dn \Delta x) P'_N}_{a_N} - \underbrace{(\rho_s ds \Delta x) P'_S}_{a_S} +$$

$$\underbrace{\rho_e u_e^* \Delta y - \rho_w u_w^* \Delta y + \rho_n u_n^* \Delta x - \rho_s u_s^* \Delta x}_{b} = 0$$

(3.20)

De tal forma, la ecuación para la presión es:

$$a_P P'_P = \sum_{CV} a_{CV} P'_{CV} + b \quad (3.21)$$

La ecuación (3.21) es resuelta hasta que  $P=P^*$  lo que quiere decir, que la solución ha convergido.

Otros métodos que existen son:

- **SIMPLER (SIMPLE-Revised)**

Es un algoritmo propuesto por Patankar, plantea la resolución de una ecuación discreta para la presión, en lugar de usar una para la corrección de la presión como se plantea en el SIMPLE. Esto significa que el campo de presiones intermedio se obtiene directamente sin la necesidad de emplear ninguna corrección; sin embargo, las velocidades se siguen obteniendo mediante correcciones similares a las planteadas en (3.19).

- **SIMPLEST (SIMPLE-ShortTened)**

Es un algoritmo propuesto por [45], el cual consiste básicamente en el método SIMPLER, pero considerando que en los coeficientes adyacentes se toman los efectos difusivos en las caras del volumen de control, mientras que los efectos de los términos convectivos se incluyen en el término fuente. Con esto, se intenta solucionar la dificultad de convergencia que provocan los términos convectivos de la ecuación de conservación de la cantidad de movimiento.

- **PISO (Pressure Implicit with Splitting of Operators)**

Es un algoritmo implementado en [20] para el cálculo de la presión-velocidad, desarrollado originalmente para cálculos no iterativos de flujos compresibles transitorios. PISO implica un paso predictor y dos pasos correctores, el método puede ser visto como una extensión del SIMPLE,

con un paso corrector adicional para mejorarlo. El algoritmo resuelve la ecuación de corrección 2 veces, así que, el método requiere un almacenamiento adicional para calcular el término fuente de la segunda corrección de la ecuación de presión. Para mejorar la eficiencia de este cálculo, el algoritmo PISO tiene dos correcciones adicionales, “Neighbor Correction” y “Skewness Correction”.

- ✓ **Neighbor Correction:** La idea es repetir cálculos requeridos por el algoritmo Simple dentro de la etapa de solución de la ecuación de corrección de presión, la velocidad satisface las ecuaciones de continuidad y cantidad de movimiento de mejor forma, el resultado es que el algoritmo tarda un poco más por iteración, sin embargo, puede reducir notablemente la cantidad de iteraciones para la convergencia.
- ✓ **Skewness Correction:** Esta corrección permite obtener una solución en mallas altamente oblicuas o no simétricas en el mismo número de iteraciones que una malla más uniforme [44]. Después de esto se hace el procedimiento del método SIMPLE.
  1. Suponer el campo de velocidades
  2. Encontrar  $p'$
  3. Calcular  $p, u, v$
  4. Tomar la nueva  $p$  como  $p^*$ , y volver a empezar el método
  5. Repetir hasta que la solución converja

### 3.3 Métodos de Relajación

El proceso de solución de este sistema de ecuaciones es iterativo y durante éste, las ecuaciones del sistema, en general, no se cumplen; el balance entre la parte izquierda y derecha de la ecuación se denomina residuo. La convergencia del proceso iterativo se da cuando los residuos disminuyen.

Para procurar acelerar esta convergencia, se utiliza un método de relajación de algunas de las variables dependientes y propiedades. Para esto, se utilizan dos tipos de relajación: la inercial y la lineal. La relajación inercial se emplea para las velocidades y los parámetros de turbulencia, y aumenta la diagonal de la matriz de coeficientes el agregar a la ecuación de cualquier variable  $\tilde{\phi}$ , el término fuente. Este tipo de relajación es aplicada a las velocidades y a los parámetros de turbulencia ( $k$  y  $\varepsilon$ ).

$$\bar{S}_{\phi,r} = \frac{\rho V_P}{\Delta t_f} (\tilde{\phi}_P^{(n-1)} - \tilde{\phi}_P^{(n)}) \quad (3.22)$$

donde  $V_P$  es el volumen de la celda P,  $\Delta t_f$  es el intervalo de tiempo falso y n es el número de iteración.

Para la presión y la densidad se emplea la relajación lineal dada por:

$$\tilde{\phi}_P^{(n)} = \alpha \tilde{\phi}_P^{sol} + (1 - \alpha) \tilde{\phi}_P^{(n-1)} \quad (3.23)$$

donde  $\alpha$  es el factor de relajación, el superíndice “sol” se refiere al valor de la propiedad proporcionado por el “solver” en la iteración actual. El factor de relajación  $\alpha$ , normalmente toma valores entre 0 y 1.

El criterio de convergencia utilizado para detener el proceso iterativo para un paso temporal dado y pasar al siguiente es tal que, para cada variable, la suma de los valores absolutos de los residuos en todo el dominio sea menor que un determinado porcentaje de un valor de referencia.

### 3.4 Discretización espacial

Existen una variedad de esquemas de discretización que son empleados para la resolución numérica de las ecuaciones que modelan los fluidos. Un par de esquemas utilizados debido a su simplicidad son los denominados “upwind”, los cuales son de primer y segundo orden, ya que obtienen el valor del flujo en las caras a partir de los valores en los centros de las celdas adyacentes localizadas aguas arriba en la dirección del vector normal a cada cara.

➤ **Esquema de discretización espacial upwind de primer orden**

El esquema upwind de primer orden transporta la información estableciendo el valor nominal entre dos nodos igual al valor del nodo ascendente más cercano:

$$\Phi_w = \Phi_W \quad \text{y} \quad \Phi_e = \Phi_P \quad (3.24)$$

Los gradientes son calculados como:

$$\left(\frac{d\Phi}{dx}\right)_w = \frac{\Phi_P - \Phi_W}{x_P - x_W}$$

Y (3.25)

$$\left(\frac{d\Phi}{dx}\right)_e = \frac{\Phi_E - \Phi_P}{x_E - x_P}$$

A partir de las ecuaciones (3.24) y (3.25), se puede ver que el esquema upwind de primer orden está limitado. La desventaja de este esquema es que sobreestima el transporte en la dirección del flujo, por lo tanto, da lugar a la difusión numérica. Sin embargo, si el flujo está alineado con la malla, la difusión numérica disminuye y el esquema upwind de primer orden es una buena opción. Además, el esquema proporciona resultados precisos para flujos donde la convección es dominante. La amplitud y las propiedades robustas hacen que el esquema upwind de primer orden sea un buen esquema de arranque. Sin embargo, para las simulaciones finales, debe reemplazarse con esquemas de orden superior [8].

➤ **Esquema de discretización espacial upwind de segundo orden**

Para mejorar la precisión, se puede utilizar el esquema upwind de segundo orden. La mejora se basa en el hecho de que dos nodos *upwind* se tienen en cuenta al estimar el valor de la cara (ESTE). El gradiente entre el nodo actual y la cara (ESTE) es el mismo que entre el nodo (OESTE) y el nodo actual.

$$\frac{\Phi_e - \Phi_P}{x_e - x_P} = \frac{\Phi_P - \Phi_W}{x_P - x_W} \Rightarrow \Phi_e = \frac{(\Phi_e - \Phi_P)(x_e - x_P)}{x_P - x_W} + \Phi_P \quad (3.26)$$

➤ **Esquema de discretización QUICK**

El esquema QUICK, permite realizar un cálculo con precisión de orden elevado del valor de “ $\phi$ ” en las caras de la celda. El esquema QUICK está basado en una media ponderada sobre un esquema *upwind* de segundo orden e interpolaciones sobre los valores centrales de las celdas. Para la cara “e” de la figura 3.3 si el flujo va de izquierda a derecha, el valor de  $\phi$  se obtiene según:

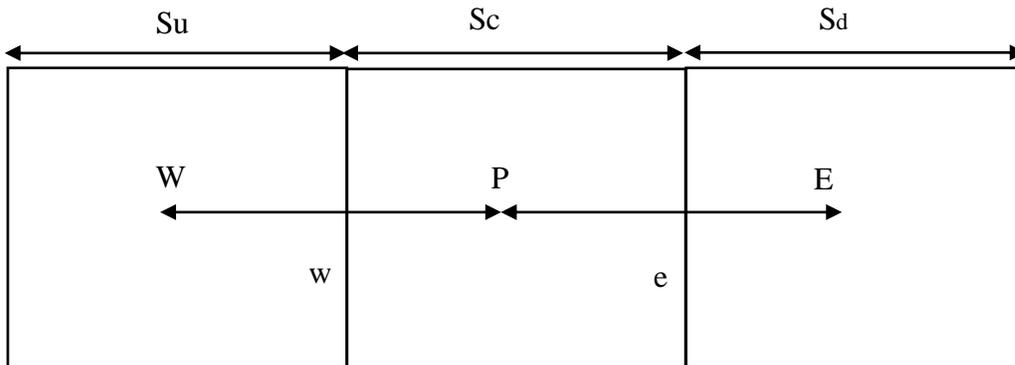


Figura 3.3. Volumen de control bidimensional.

$$\Phi_e = \theta \left[ \frac{S_d}{S_c + S_d} \Phi_P + \frac{S_d}{S_c + S_d} \Phi_E \right] + (1 - \theta) \left[ \frac{S_u + 2S_d}{S_u + S_d} \Phi_P + \frac{S_c}{S_u + S_c} \Phi_W \right] \quad (3.27)$$

Haciendo  $\theta=1$ , la ecuación (3.27) se transforma en una interpolación centrada de segundo orden, mientras que si se hace  $\theta=0$ , se obtiene una interpolación *upwind* de segundo orden. EL QUICK

más comúnmente empleado es aquel que adopta el valor de  $\theta=1/8$ . El esquema QUICK, generalmente, es aquel que proporciona resultados más precisos si se tienen mallas estructuradas alineadas con la dirección del flujo [46].

### 3.5 Condición Courant Friedrich Lewy (CFL)

Para simulaciones transitorias existe una relación entre el tamaño de la celda computacional, el tamaño del paso de tiempo transitorio y la velocidad del fluido dentro de la celda. La relación es calculada por la condición Courant-Friedrich-Lewy por sus siglas en inglés (CFL) o mejor conocido como número de Courant:

$$CFL = \frac{\Delta t}{\Delta x_{celda}/v_{celda}} \quad (3.28)$$

donde  $\Delta t$  es el paso de tiempo utilizado durante la simulación,  $\Delta x_{celda}$  es el tamaño del lado de la celda y  $v_{celda}$  es la velocidad en la celda.

## 4 Sistema para simular

En este capítulo, se van a presentar las configuraciones que se utilizan para atomizar mediante ultrasonido distintos fluidos en fase líquida, partiendo de un caso base y posteriormente, son modificados tanto el fluido como algunos otros parámetros. Los fluidos de trabajo que se utilizan con el fin de cumplir los objetivos que se plantearon en el capítulo 1 son tres: agua, agua destilada y gasolina, cada uno con propiedades diferentes. Como ya se mencionó, aparte de modificar los fluidos, también se modificarán algunos parámetros en la configuración del sistema, tales como: amplitud y frecuencia de forzamiento. Finalmente, los casos que son simulados se presentan de manera ordenada dentro de tablas con su respectiva configuración.

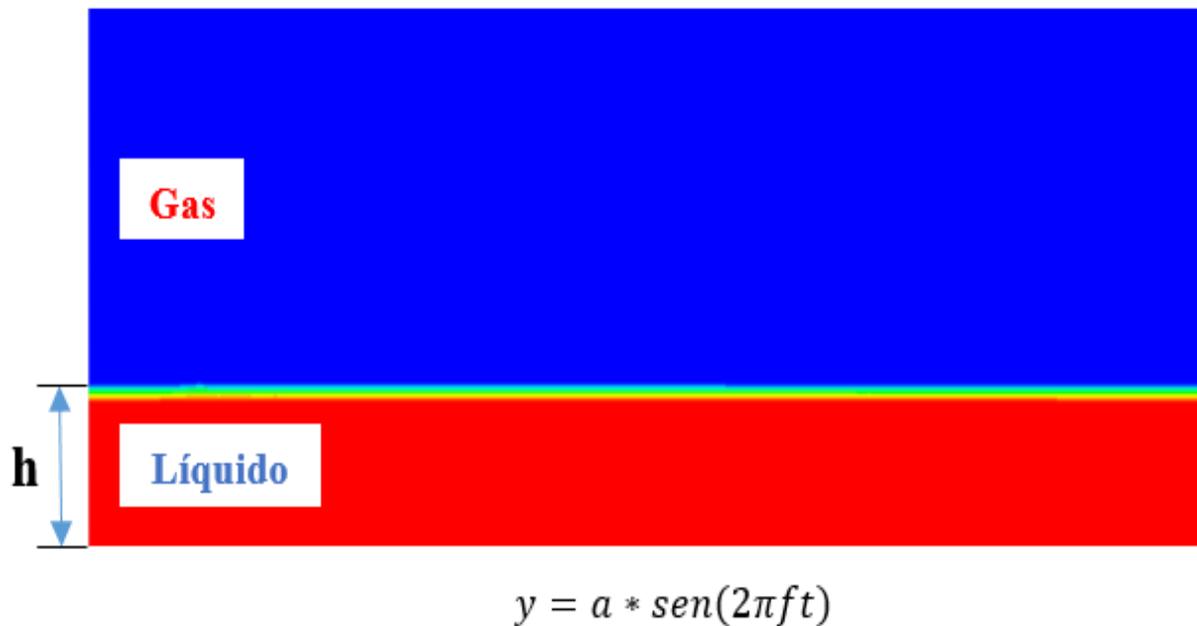
### 4.1 Configuración a simular

El estudio con el cual este trabajo se validará, también llamado “caso base”, tiene una configuración en 2D, el cual consta de una geometría rectangular de longitud  $L_x = 455$  [ $\mu\text{m}$ ], altura  $L_y = 250$  [ $\mu\text{m}$ ] y de una película de agua destilada  $h = 80$  [ $\mu\text{m}$ ]. Adicionalmente, para propiciar el movimiento periódico utiliza una frecuencia  $f = 90$  [kHz] y una amplitud  $a = 1.9$  [ $\mu\text{m}$ ].

#### ➤ Descripción del funcionamiento del sistema

Para estudiar a detalle la física involucrada en el fenómeno de la atomización ultrasónica, se realiza una simulación numérica, en la cual se incluye un modelo bifásico (figura 4.1) en un dominio bidimensional cartesiano. En la parte superior, dentro del dominio computacional, se definió el aire mediante una fracción de gas y en la parte inferior, dentro del mismo dominio, se definió la película de altura “h” como una fracción de líquido. La pared inferior es la encargada de producir la excitación al fluido líquido, a través de un movimiento vertical que es representado mediante una

función sinusoidal que es variable en el tiempo. Esta función involucra a una frecuencia de excitación ( $f$ ) y a una amplitud de forzamiento ( $a$ ), provocando en el fluido una desestabilización, lo que ocasiona que en las zonas de la interfase aparezcan pequeñas perturbaciones, mismas que dan origen a la formación de las ondas capilares, las cuales, se irán incrementando con el paso del tiempo, y cuando la perturbación sea lo suficientemente grande, comenzará la eyección de partículas (gotas); fenómeno de la atomización ultrasónica.



*Figura 4.1 Fracción de volumen.*

## 4.2 Análisis numérico

Para la realización numérica del sistema, se utilizó el software computacional ANSYS FLUENT 19.0<sup>®</sup>. El código numérico resuelve las ecuaciones que modelan el comportamiento del fenómeno, las cuales, fueron presentadas en el capítulo 2. Además, el código resuelve las ecuaciones por el Método de Volúmenes Finitos (MVF), presentado en el capítulo 3.

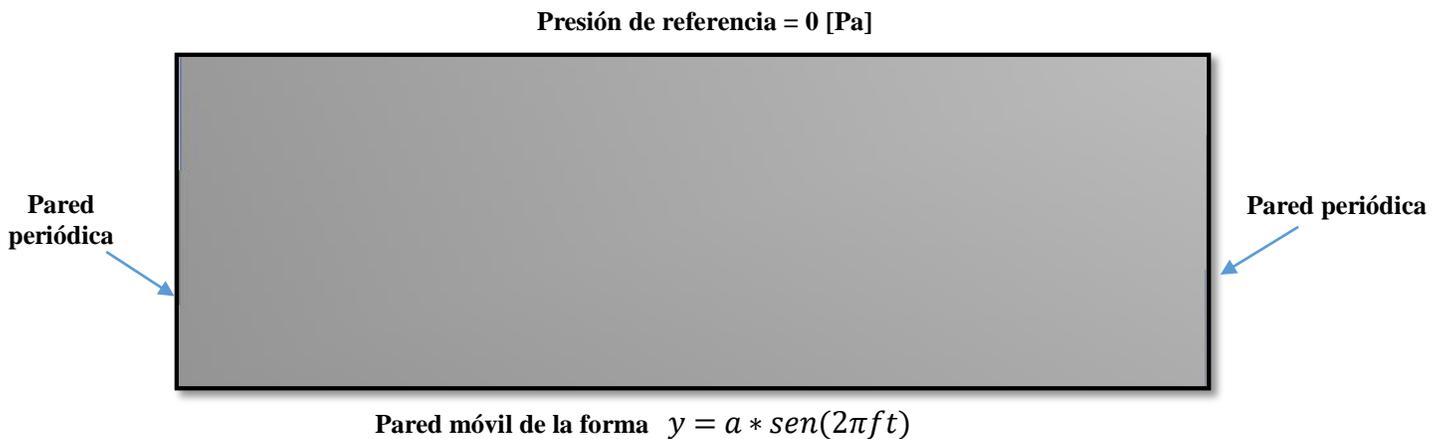
### 4.3 Detalles numéricos

Para realizar las simulaciones se tomaron las siguientes consideraciones para las condiciones de frontera, cabe mencionar que estas condiciones siempre son las mismas en todos los casos que se simulan.

#### ➤ Condiciones de frontera

Un esquema de las condiciones de frontera que se aplican en el sistema se puede observar en la figura 4.2:

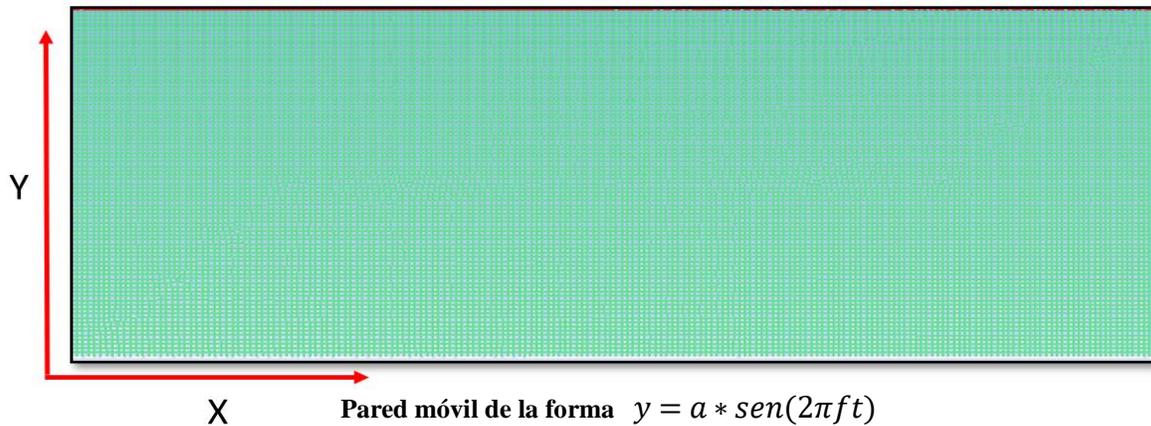
- ✓ Para proporcionar el movimiento que da origen a las ondas capilares en la interfase, la pared inferior del dominio se mueve verticalmente a través de una función sinusoidal variable en el tiempo.
- ✓ La pared superior tiene una presión de referencia igualada a 0 [Pa].
- ✓ Las paredes izquierda y derecha tienen condiciones periódicas, ésto se hace con el fin de que las paredes del dominio no interfieran en la dinámica que tiene el flujo, a causa de la excitación sinusoidal que se le está induciendo al sistema.



*Figura 4.2 Condiciones de frontera.*

### ➤ Discretización del dominio

La discretización del dominio para el “caso base” se realizó con una malla tetraédrica del tamaño siguiente: en la dirección X = 228, en la dirección Y = 125; dando un total de 28500 celdas de tamaño  $T_{celda} = 2[\mu m]$ , como se muestra en la figura 4.3.



*Figura 4.3. Discretización del dominio computacional.*

### 4.4 Casos para simular

En general el estudio consta de 33 casos, de los cuales, los primeros 31 casos fueron tomados de la literatura donde algunos los realizaron de manera experimental y otros de forma teórica. Los 2 restantes, son casos que propuse y que forman parte del objetivo principal de este trabajo de tesis. Estos casos se simularán para 3 fluidos diferentes, tales como: agua, agua destilada y gasolina. Para algunos casos de los 2 primeros fluidos, se hace la simulación con el fin de validar o verificar, según sea el caso, el tamaño de longitud de onda capilar, y otros casos son realizados con el fin de validar/verificar tanto la longitud de onda capilar como el diámetro medio de gota. Para los casos que son simulados con gasolina, se verifican para ambos resultados (longitud de onda capilar y diámetro medio de gota).

Cada caso tiene su propia configuración geométrica en términos de: dimensiones del dominio computacional, tamaño de celda, parámetros de amplitud de forzamiento y frecuencia de excitación para la función que propicia el movimiento, además de, propiedades del fluido; en todos los casos, se tiene independencia de resultados con el número de celdas, basado en que se realizó un análisis de sensibilidad de malla, hasta encontrar el tamaño de celda en donde ya no existiera variación en los resultados.

A continuación, se presentan los casos que fueron analizados, detallando las especificaciones en cada uno de estos.

#### 4.4.1 Casos que utilizan agua y agua destilada

En la tabla 2, se muestran las propiedades de los fluidos y parámetros que son utilizados en cada caso numérico, que serán verificados con una correlación teórica o validados con algunos trabajos experimentales que se han realizado en la literatura. Los casos que se presentan en la tabla 2 serán validados o verificados, según sea el caso, solamente en términos del tamaño de longitud de onda capilar. La misma tabla es presentada de manera ordenada en base a la frecuencia de excitación de cada caso, es decir, de menor a mayor, en la que se incluyen los fluidos de trabajo agua y agua destilada sin importar el orden en que aparezcan.

*Tabla 2. Casos numéricos en 2D, validados en términos de longitud de onda capilar*

<b>Caso</b>	<b>Fluido de trabajo</b>	<b>Frecuencia [Hz]</b>	<b>Densidad [kg/m<sup>3</sup>]</b>	<b>Viscosidad [Pa·s]</b>	<b>T. Superficial [N/m]</b>
1	Agua	250	1000	1E-03	74E-03
2	Agua	500	1000	1E-03	74E-03
3	Agua	15E+03	1000	1.002E-03	72.75E-03

4	Agua	17E+03	1000	1.002E-03	72.75E-03
5	Agua	32.8E+03	1000	1E-03	72.75E-03
6	Agua	39.5E+03	1000	1.002E-03	72.75E-03
7	Agua destilada	40E+03	997	0.89E-03	72.8E-03
8	Agua	41.1E+03	1000	1E-03	72.75E-03
9	Agua	50E+03	1000	1.002E-03	72.75E-03
10	Agua	54E+03	1000	1.002E-03	72.75E-03
11	Agua	57.5E+03	1000	1E-03	72.75E-03
12	Agua	60E+03	1000	1E-03	72E-03
13	Agua	70E+03	1000	1E-03	72E-03
14 (caso base)	Agua destilada	90E+03	997	0.89E-03	75E-03
15	Agua destilada	130E+03	997	0.89E-03	72.8E-03
16	Agua destilada	198.85E+03	997	0.89E-03	72.8E-03
17	Agua	1E+06	1000	1.002E-03	72.75E-03
18	Agua destilada	1.58E+06	997	0.89E-03	72.8E-03
19	Agua destilada	2.25E+06	997	0.89E-03	72.8E-03
20	Agua destilada	3E+06	997	0.89E-03	83E-03

En la tabla 3, se establecen los casos numéricos que son verificados con una correlación teórica y validados con algunos trabajos experimentales, no solamente en términos de longitud de onda capilar como los casos que se presentan en la tabla 2, sino que también, se hace la verificación en términos del diámetro medio de gota. De igual manera, la tabla 3 está ordenada por casos, los cuales

fueron ordenados en base a la frecuencia de excitación, y los fluidos que se presentan son: agua y agua destilada.

**Tabla 3.** Casos numéricos en 2D, validados en términos de longitud de onda capilar y diámetro medio de gota

<b>Caso</b>	<b>Fluido de trabajo</b>	<b>Frecuencia [Hz]</b>	<b>Densidad [kg/m<sup>3</sup>]</b>	<b>Viscosidad [Pa·s]</b>	<b>T. Superficial [N/m]</b>
21	Agua	155E+03	998	0.9E-03	72.8E-03
22	Agua destilada	174E+03	997	0.89E-03	75E-03
23	Agua	390E+03	1000	1.002E-03	72.75E-03
24	Agua destilada	404.5E+03	997	0.89E-03	72.8E-03
25	Agua destilada	500E+03	997	0.89E-03	78E-03
26	Agua	800E+03	998	1E-03	73E-03
27	Agua	1E+06	1000	1.002E-03	72.75E-03
28	Agua	1.35E+06	1000	1.002E-03	73.05E-03
29	Agua	1.65E+06	1000	1.002E-03	72.75E-03
30	Agua	1.7E+06	1000	1.002E-03	72.75E-03
31	Agua	2.4E+06	1000	1.002E-03	72.75E-03

#### 4.4.2 Casos para atomización de gasolina en 2D

Como se mencionó en el capítulo 1, el interés de atomizar gasolina a través del ultrasonido se hace con el fin de obtener tamaños de gota pequeños, y así producir una combustión más completa, debido a que, cuando se atomizan gotas más pequeñas ocurre un mejor mezclado entre aire y gasolina propiciando a que se queme la mayor parte del combustible. Por lo que, para obtener gotas más pequeñas se ha reportado en [9], que es necesario aplicar una frecuencia de excitación demasiado alta en el movimiento que es inducido en la pared inferior del dominio computacional,

es por ello que se han seleccionado 2 valores de frecuencia en el orden de los [MHz]. Cabe señalar, que estos valores son seleccionados en base a que: un piezoeléctrico (dispositivo físico que proporciona un movimiento a través de una función sinusoidal), es común y comercial al operar con estas frecuencias de excitación.

Por lo anteriormente dicho, solamente se hacen 2 casos utilizando gasolina, como se muestra en la tabla 4.

**Tabla 4.** Casos simulados con gasolina en 2D

<b>Caso</b>	<b>Fluido de trabajo</b>	<b>Frecuencia [Hz]</b>	<b>Densidad [kg/m<sup>3</sup>]</b>	<b>Viscosidad [Pa·s]</b>	<b>T. Superficial [N/m]</b>
32	Gasolina	1.7E+06	720	1E-03	0.00054
33	Gasolina	2.4E+06	720	1E-03	0.00054

## 5 Resultados

En este capítulo, se muestran los resultados de los casos que fueron simulados y presentados en el capítulo 4. Como primera parte se presentan los contornos de algunas variables características del flujo. Los contornos o campos de las variables del flujo para un caso base, que se presentan para conocer la física del fenómeno de eyección de gotas, son los siguientes:

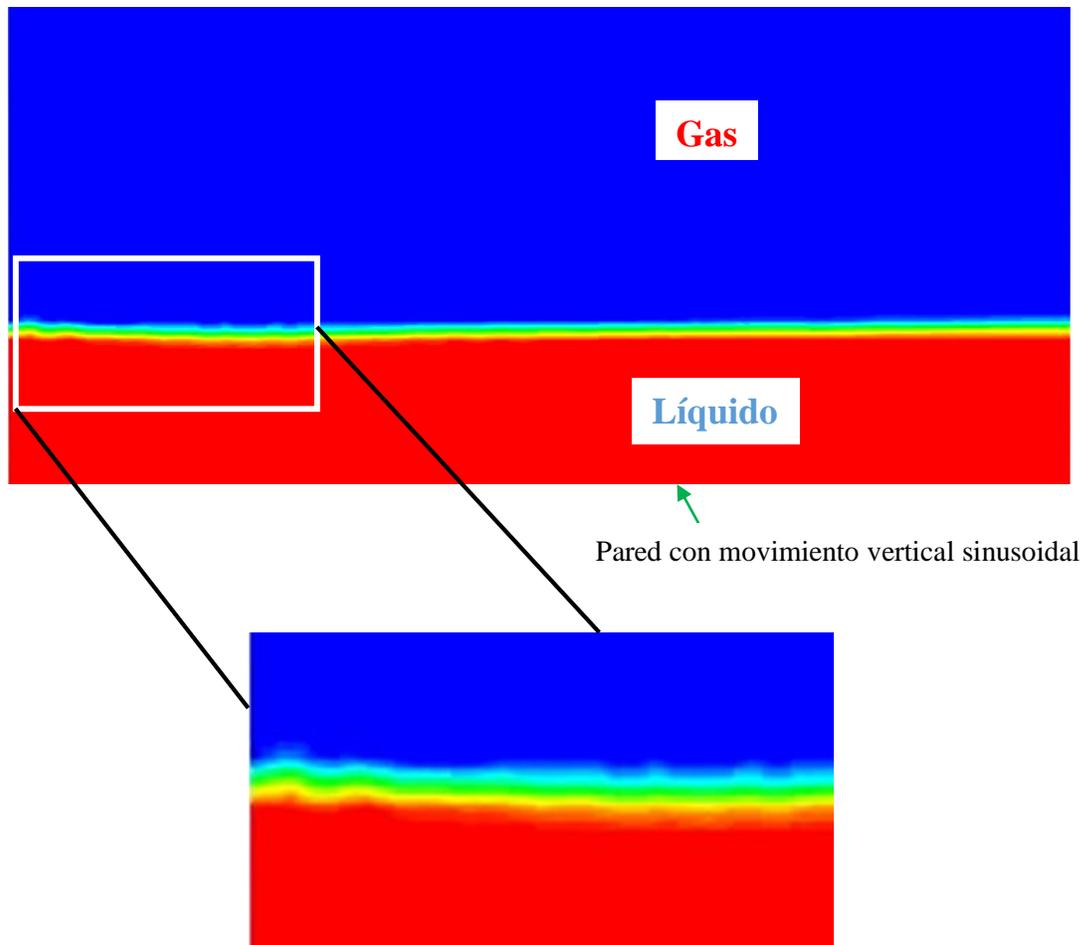
- Fracción de volumen
- Velocidad

Posteriormente, se presentan los resultados de configuraciones que tienen variación en alguno de sus parámetros, tales como: amplitud de forzamiento y frecuencia de excitación. Además de validar resultados numéricos con trabajos experimentales y verificar predicciones numéricas con resultados teóricos.

### 5.1 Análisis de flujo

#### ➤ **Inestabilidad de Faraday. Simulación numérica del caso base.**

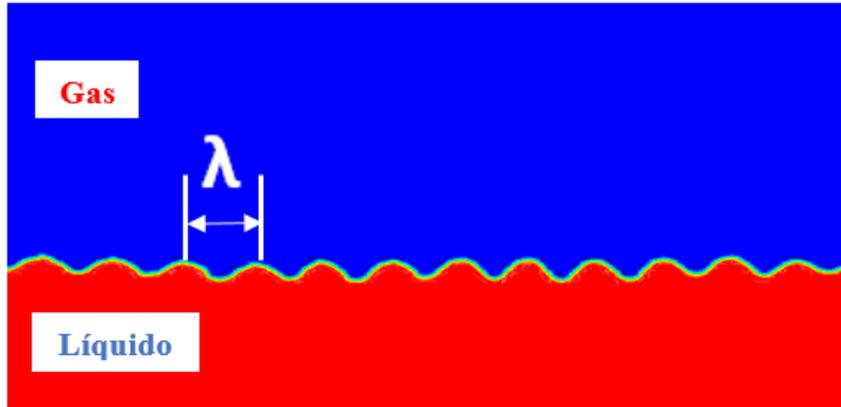
El primer fenómeno que se manifiesta durante el proceso de atomización ultrasónica es la llamada “inestabilidad de Faraday”, que se refiere a las pequeñas perturbaciones que ocurren justamente en la zona de la interfase líquido-gas. Una representación esquemática de este fenómeno se muestra en la figura 5.1, donde se observa cómo se generan pequeñas ondas estacionarias como respuesta de la excitación periódica, inducida en la pared inferior del dominio computacional; estas ondas comienzan a desestabilizar la zona de la interfase y provocan perturbaciones en la misma.



*Figura 5.1. Inestabilidad de Faraday. Predicción del caso base.*

➤ **Longitud de ondas Capilares. Simulación numérica del caso base.**

El segundo fenómeno dentro del proceso de la atomización ultrasónica que se simula numéricamente para el caso base, se presenta en un determinado paso de tiempo posterior al inicial, donde comienzan a formarse ondas capilares de longitud de onda “ $\lambda$ ” justo en la zona de la interfase, que son debidas a las pequeñas perturbaciones que iniciaron la desestabilización en la interfase también llamadas, inestabilidad de Faraday. En la figura 5.2, se observan las formaciones de estas ondas capilares.



*Figura 5.2. Ondas capilares de longitud  $\lambda$ . Predicciones para el caso base.*

Para calcular el valor teórico de la longitud de ondas capilares, se utiliza la ecuación de Kelvin [6]:

$$\lambda^3 = \frac{2\pi\sigma}{\rho f^2} \quad (5.1)$$

donde  $\sigma$  es la tensión superficial,  $\rho$  es la densidad de la fase secundaria (fase dispersa) y  $f$  es la frecuencia de las ondas en la interfase.

Otra forma de calcular el valor de la longitud de onda capilar es presentada en [7], ellos encontraron que para las ondas capilares generadas de manera sónica, la frecuencia en las ondas de la interfase es igual a la mitad de la frecuencia de forzamiento que se induce en el movimiento sinusoidal, es decir, la frecuencia que produce la excitación en el fluido líquido. De esta manera, la longitud de onda capilar se expresa como:

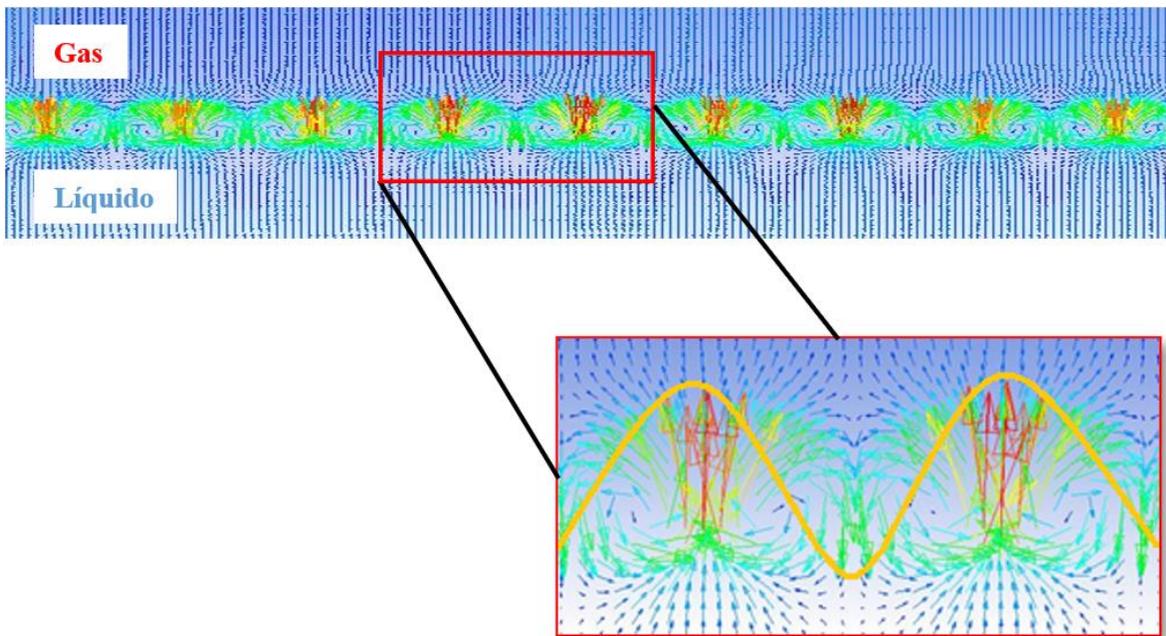
$$\lambda = \left( \frac{8\pi\sigma}{\rho F^2} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (5.2)$$

donde  $F$  es igual a la Frecuencia de forzamiento.

➤ **Vectores de Velocidad. Simulación numérica del caso base.**

Las ondas capilares se pueden representar por medio de vectores de velocidad, como se presenta en la figura 5.3. En ésta, se aprecia como el fluido líquido sube y va tomando la forma de las ondas

capilares; estas formas que toman los vectores en la interfase son llamadas “crestas”. Además, se observa que en la parte central de cada cresta existe una mayor velocidad, lo que es debido, a la energía cinética de la cresta que es transferida de parte de las perturbaciones en la interfase al inicio del fenómeno, producto de la inestabilidad de Faraday, y aunado a éstas, la amplitud de forzamiento que está dentro del movimiento periódico, el cual, fue inducido en la pared inferior del dominio computacional. Como se mencionó, la cresta va subiendo hasta llegar a la altura máxima donde su velocidad es cero, posteriormente el líquido comienza a descender de cada lado de la cresta en forma de fuente; la cantidad de movimiento que tiene el fluido en esta zona no es suficiente para ganarle a la fuerza debida a la tensión superficial del fluido en la interfase.

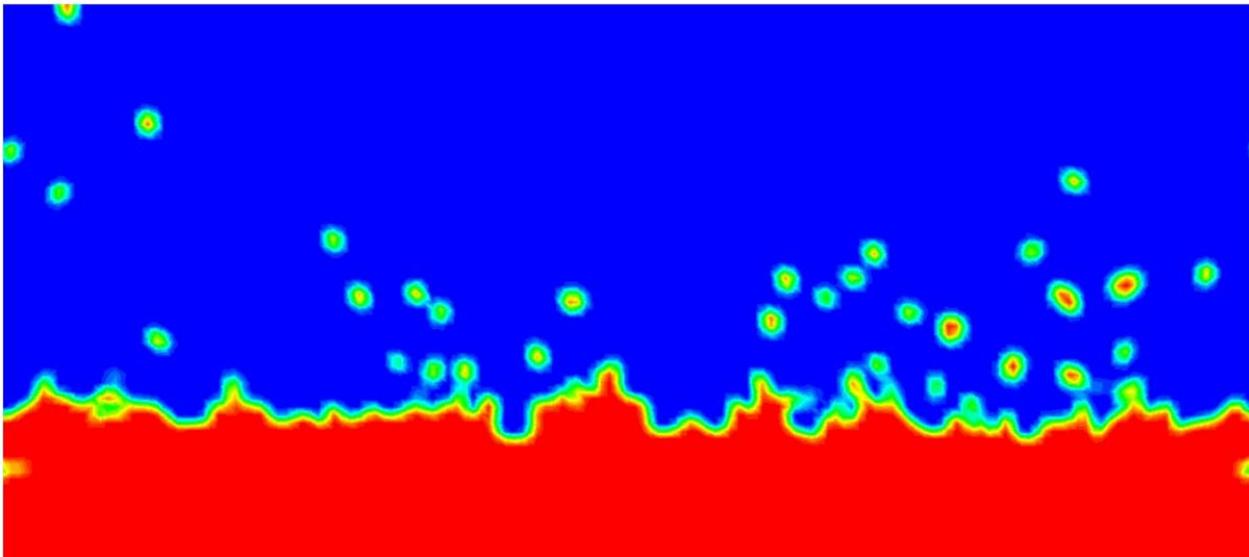


*Figura 5.3. Vectores de velocidad. Predicciones para el caso base.*

### ➤ Atomización de gotas

Para un tiempo final, la energía cinética de la cresta que se analizó en la sección anterior es la encargada de expulsar el fluido líquido en forma de gotas (fase dispersa) hacía la fase primaria (fase continua), como se muestra en la figura 5.4.

De manera que, si la energía cinética de la cresta es mayor que la energía restitutiva (tensión superficial), en la parte superior de la cresta (cabeza) comienza a abultarse el líquido y debajo de la cabeza se adelgaza la cresta líquida formando un “cuello”, el cual, permite el desprendimiento de la parte superior y las gotas se atomizan. Por el contrario, si la energía cinética de la cresta NO supera a la tensión superficial; la cresta desciende e impacta en la base de ésta para formar un cráter. Al momento del impacto se forman otras crestas, que si tienen la amplitud suficiente ocurre la eyección de gotas, pero si la amplitud de las crestas sigue siendo baja, no habrá eyección. Cabe señalar, que la fuerza de gravedad no tiene un dominio significativo como lo es la tensión superficial, que es debido, a que la escala en donde ocurre el fenómeno de la atomización ultrasónica es demasiado pequeña, lo cual resulta, en que la gravedad no participa en la disputa que existe entre las fuerzas dominantes que se necesita para que ocurra el fenómeno de eyección de gotas.



*Figura 5.4. Contorno de fracción de volumen cuando ocurre la eyección de gotas.*

## 5.2 Comparación de longitud de onda capilar. Configuración en 2D.

Para validar los resultados numéricos se hizo una comparación con los resultados experimentales y de otros trabajos de la literatura abierta, en términos del tamaño de la longitud de onda que se forma en la superficie del líquido. Cabe mencionar, que no todas las comparaciones se realizaron con resultados experimentales, puesto que en la bibliografía de donde fueron tomados los datos, éstos no siempre reportaban dichos resultados, sino correlaciones.

La selección de los casos que se comparan entre sí, se hace en base a que utilizan el mismo fluido de trabajo, además de que el fluido tiene las mismas propiedades en esos casos; cabe mencionar que hay casos donde las propiedades del fluido no son iguales. Adicionalmente, el orden en que están presentados los casos es de manera muy dispersa, lo que es debido, a que en el capítulo 4 los casos fueron ordenados por el valor de la frecuencia de excitación, sin importar el fluido que se utilice.

### ➤ **Casos 3, 4, 6, 9, 10, 17, 23, 29, 30 y 31. Casos con agua, mismas propiedades del fluido.**

En la figura 5.5 se muestran los resultados experimentales [21], teóricos y numéricos de los casos que se simularon para agua y diferentes frecuencias de excitación, que van entre 15 [kHz] y 2.4 [MHz], donde se observa que los resultados numéricos tienen una tendencia muy parecida con la ecuación de Kelvin (ecuación 5.2, usada para verificar los resultados numéricos); entre estas 2 comparaciones, el caso 23 tiene el mínimo valor de error relativo del 0.1 % y va subiendo gradualmente, hasta llegar al caso 6 que tiene el máximo valor de error relativo igual a 6 %.

Para la comparación entre los resultados experimentales con los numéricos, existe un valor mínimo de error relativo de 4.7 % y un máximo valor de error relativo del 16.3 %. Cabe mencionar, que el

mínimo error corresponde a los casos que utilizan frecuencias de excitación altas, y que el error más grande se presenta en frecuencias de excitación menores.

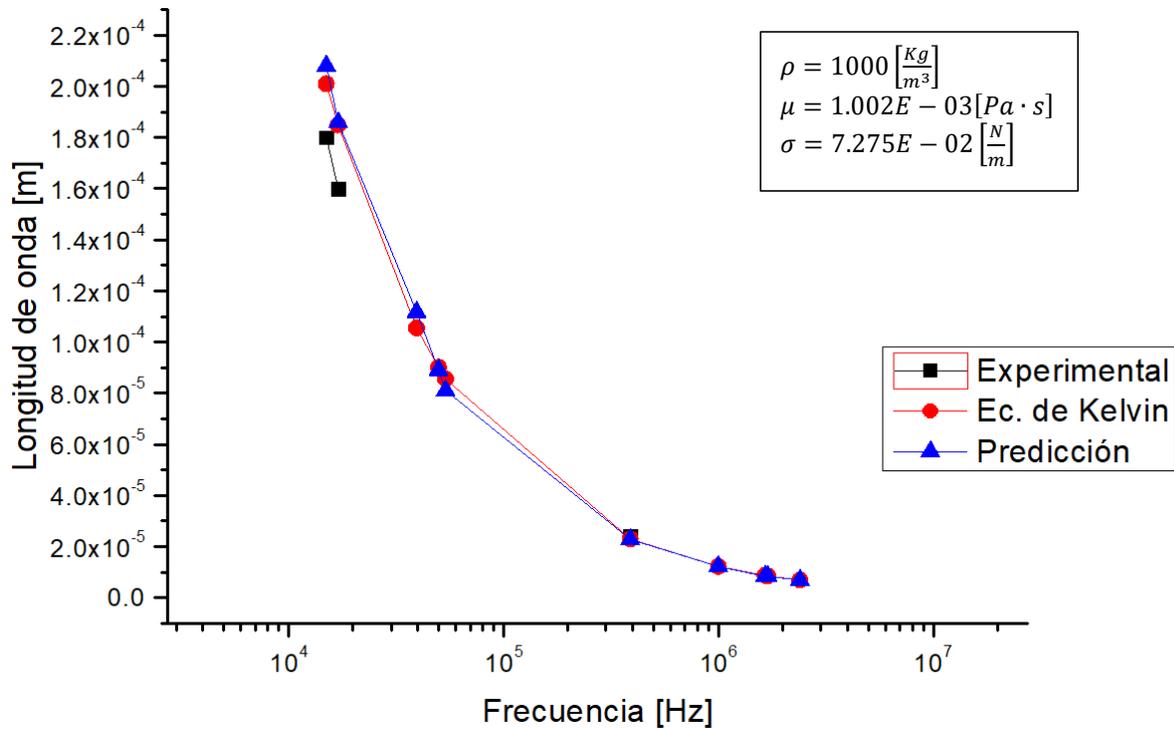


Figura 5.5. Comparación de tamaño de longitud de onda para los casos 3, 4, 6, 9, 10, 23, 27, 29, 30 y 31.

➤ **Casos 1 y 2. Casos con agua, frecuencias de excitación bajas.**

En la figura 5.6 se presenta el análisis que se realizó en los casos 1 y 2, los cuales utilizan agua como fluido de trabajo, que corresponden a frecuencias de excitación bajas (orden de magnitud igual a  $1E+02$ ). Los resultados numéricos sólo fueron verificados con la ecuación de Kelvin (resultados teóricos), debido a que no existen resultados experimentales para estos casos. Los errores relativos para el caso 1 y 2, fueron de 2.2 % y 2.5 %, respectivamente.

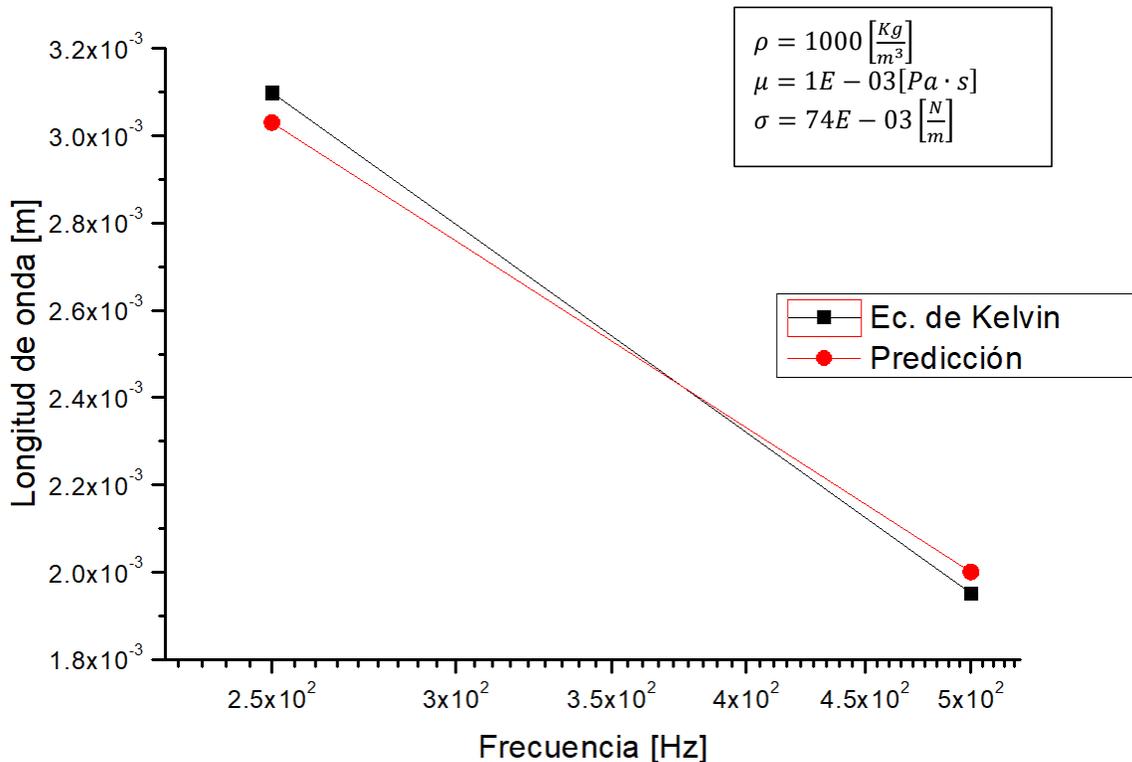


Figura 5.6. Comparación de tamaño de longitud de onda para el caso 1 y el caso 2.

- **Casos 5, 8, 11, 12 y 13. Casos con agua, con frecuencias de excitación de mediano orden de magnitud ( $1E+03$ ) y diferentes propiedades del fluido.**

Para este análisis, los primeros 3 casos (5, 8, 11) tienen las mismas propiedades del fluido, cuyos valores son distintos a los que tienen los 2 últimos casos (12 y 13), los cuales son presentados en la figura 5.7.

Para los casos 5, 8 y 11 se realizó la comparación, donde el mínimo error que se presenta fue del 2.5 % y el máximo error fue del 6.5 %, este último, correspondiente a una frecuencia de excitación menor, dado que, para el caso donde se obtuvo el menor error relativo, utiliza una frecuencia de excitación mayor. Al comparar los casos 12 y 13 con frecuencias de excitación de 60 y 70 [kHz],

los errores fueron del 3.3 % y 1.2 %, respectivamente, por lo que nuevamente coincide que, a mayor frecuencia de excitación, menor es el error relativo.

$f = 32.8 \text{ [kHz]}, f = 41.1 \text{ [kHz]}, f = 57.5 \text{ [kHz]}$ $\rho = 1000 \left[ \frac{\text{Kg}}{\text{m}^3} \right]$ $\mu = 1E - 03 [\text{Pa} \cdot \text{s}]$ $\sigma = 72.75E - 03 \left[ \frac{\text{N}}{\text{m}} \right]$	$f = 60 \text{ [kHz]}, f = 70 \text{ [kHz]}$ $\rho = 1000 \left[ \frac{\text{Kg}}{\text{m}^3} \right]$ $\mu = 1E - 03 [\text{Pa} \cdot \text{s}]$ $\sigma = 74E - 03 \left[ \frac{\text{N}}{\text{m}} \right]$
--	---

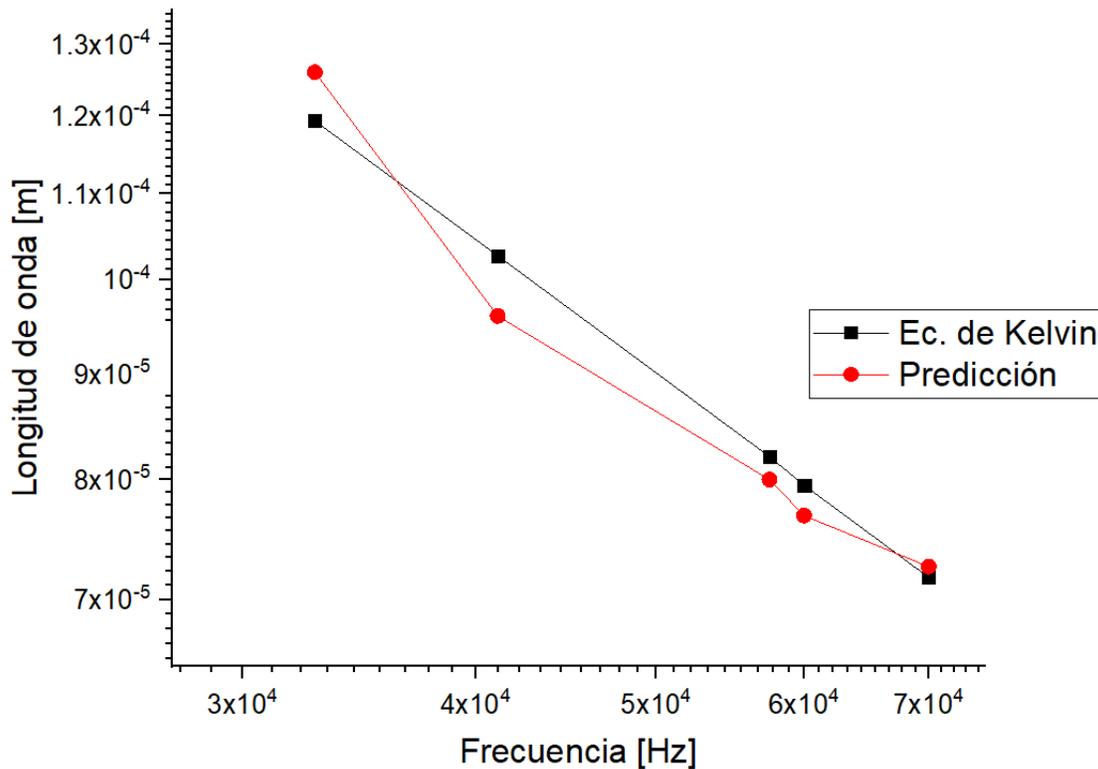


Figura 5.7. Comparación de tamaño de longitud de onda para los casos 5, 8, 11, 12 y 13.

- **Casos 7, 15, 16, 18, 19 y 24. Casos con agua destilada, frecuencias de excitación con orden de magnitud entre (1E+03) a (1E+06), mismas propiedades del fluido.**

En la figura 5.8 se muestran 6 diferentes casos, los cuales, utilizan frecuencias que van desde mediano orden de magnitud (1E+03) hasta frecuencias de alto orden (1E+06). El caso 7 [48], es el que utiliza la frecuencia de excitación menor y presenta un error relativo grande, comparado tanto con resultados experimentales y con resultados teóricos, siendo los errores del 11.8 % y 9.2 %

respectivamente, para una frecuencia de 40 [kHz]. Ahora bien, si el caso 7 se compara con los casos 12 y 13 analizados anteriormente con frecuencias de excitación de 60 y 70 [kHz], se encuentra que a pesar de que las frecuencias son del mismo orden de magnitud y sobre todo muy similares a la frecuencia que se utiliza para este caso que es de 40 [kHz], el error que existe entre esos casos es pequeño en comparación con este caso 7. Lo anterior da motivo, a que las propiedades que tiene el fluido para este caso, hacen que exista una variación en los errores relativos experimental y teórico.

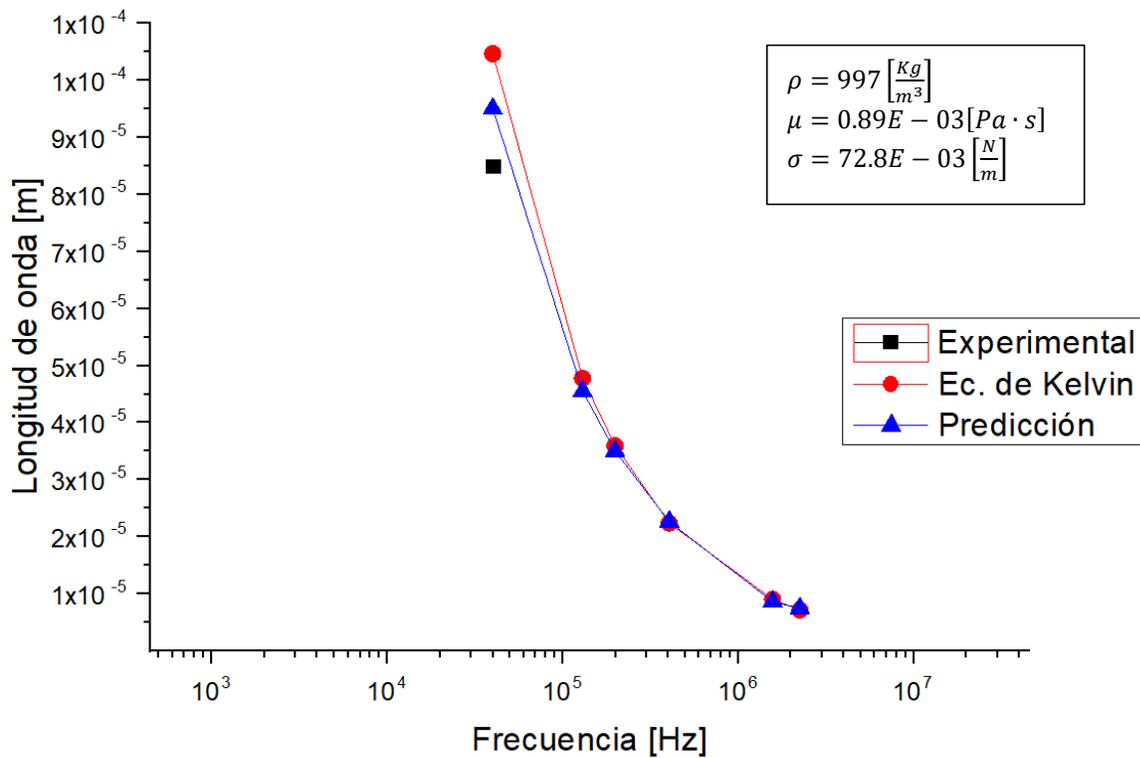
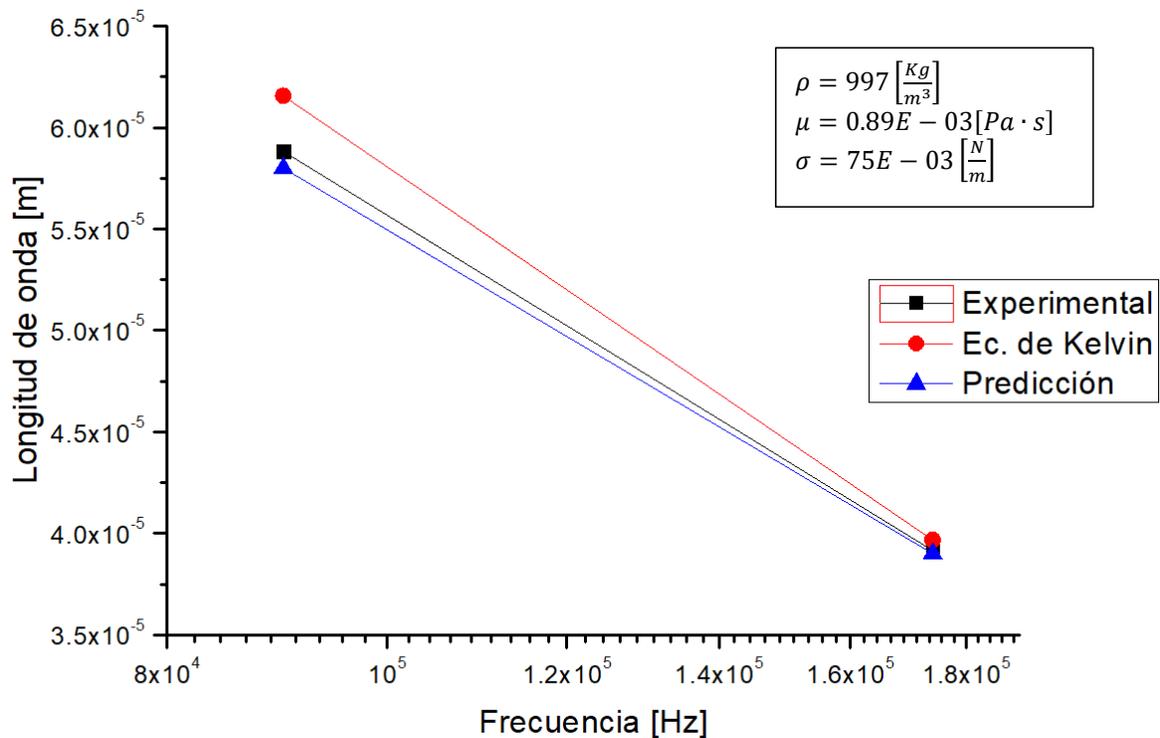


Figura 5.8. Comparación de tamaño de longitud de onda para los casos 7, 15, 16, 18, 19 y 24.

- **Casos 14 y 22. Casos con agua destilada, frecuencias de excitación con orden de magnitud entre (1E+03) a (1E+06), mismas propiedades del fluido.**

La literatura si reporta resultados experimentales de longitud de onda capilar para los casos 14 y 22 [7], que se muestran en la figura 5.9, donde el promedio de error relativo es alrededor de 1.5 % para los resultados experimentales, y comparando con los resultados teóricos el error promedio es de 3.7 %, por lo que para estos casos si existe una buena coincidencia entre los resultados del tamaño de longitud de onda.



**Figura 5.9.** Comparación de tamaño de longitud de onda para los casos 14 y 22.

- **Casos 20, 21, 25, 26 y 28**

Para los casos 20, 25 [7], 21, 26 y 28 se hizo una comparación diferente a la que se hizo en los casos anteriores, debido a que, para estos casos, las propiedades de los fluidos son diferentes entre sí, por lo que en la figura 5.10 se detallan los grupos de parámetros para cada caso, en términos de

frecuencia de excitación y propiedades del fluido. Estas comparaciones, se hicieron como consecuencia de que solamente existe un resultado de tamaño de longitud de onda, por cada grupo de parámetros y de propiedades del fluido (densidad, viscosidad, tensión superficial), siendo este motivo por el que se tomó la decisión de juntar todos estos casos en una misma figura.

Al analizar estos casos, se encuentra que, si la viscosidad del líquido va disminuyendo, esto hace que el error se incremente. Sin embargo, a una mayor frecuencia de forzamiento o excitación, el error va disminuyendo. También, si la tensión superficial se aumenta, el error disminuye, por lo que utilizando frecuencias de excitación de orden mayor ( $1E+06$ ), se obtienen resultados más precisos al comparar con los resultados teóricos (ecuación de Kelvin).

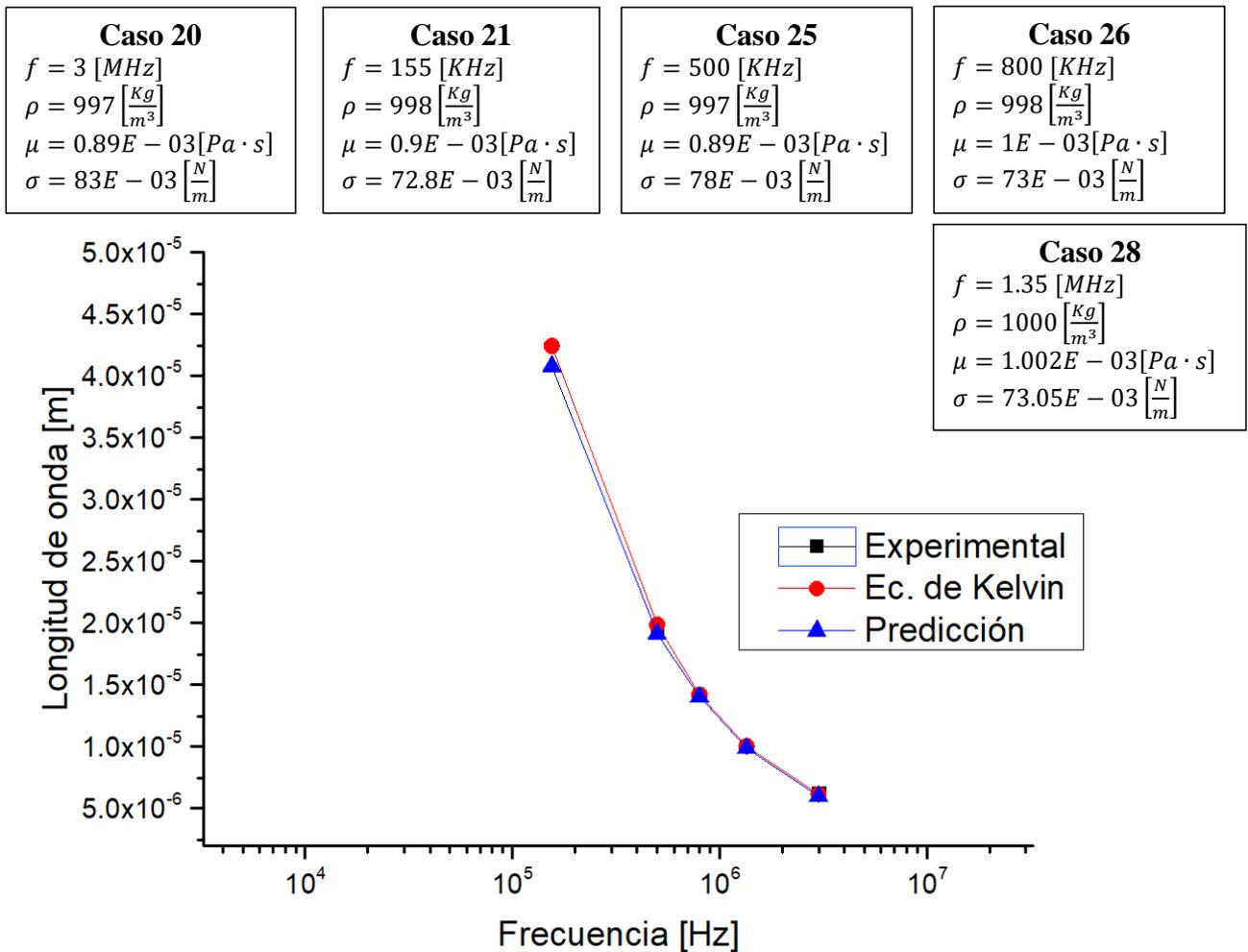


Figura 5.10. Comparación de tamaño de longitud de onda para los casos 20, 21, 25, 26 y 28.

Como se observó en el contorno de la figura 5.4, existe una distribución en el tamaño de partículas (gotas), teniendo una variedad de tamaños, por lo que, para verificar los tamaños de gota de este trabajo numérico, se utilizará la correlación teórica que fue obtenida en [21], donde Lang encontró que el tamaño de partícula es aproximadamente a un tercio del tamaño de la longitud de onda capilar. Así que, a partir de la ecuación (5.2), él obtuvo la siguiente expresión:

$$D = 0.34 * \left( \frac{8\pi\sigma}{\rho F^2} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (5.3)$$

donde D es el diámetro medio de partícula.

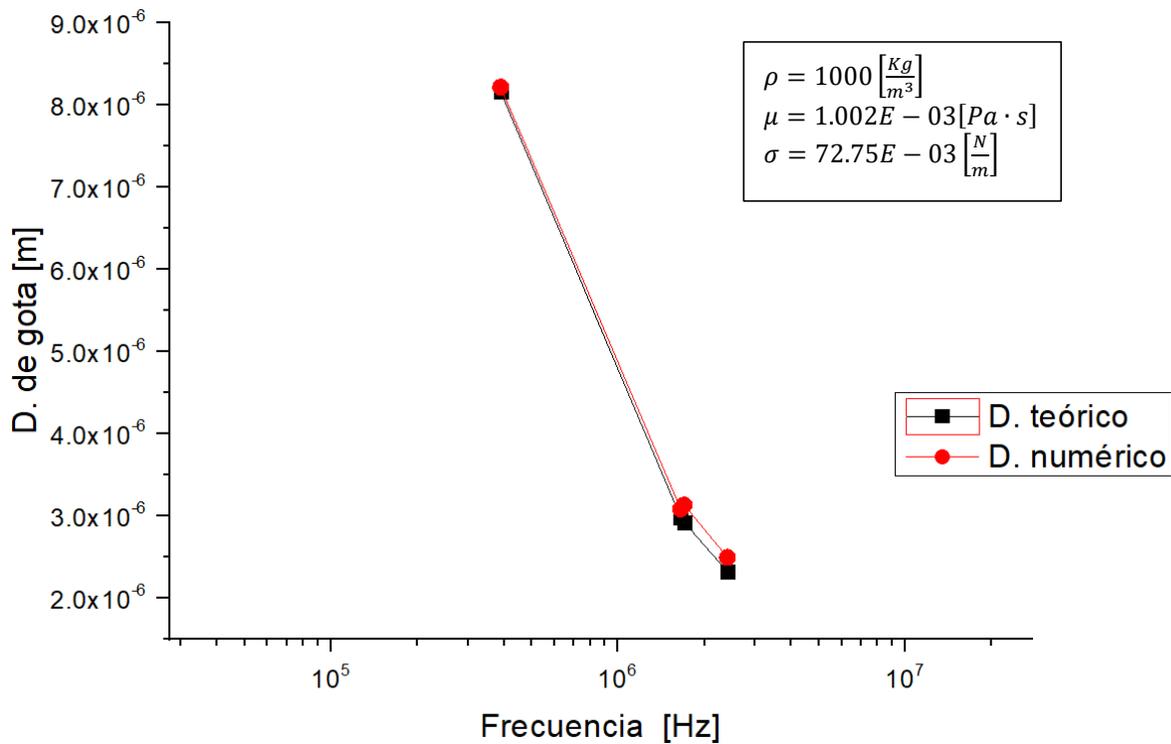
### 5.3 Comparación de diámetros medios de partículas (gota) en configuraciones 2D

Para verificar los resultados numéricos; también, se hizo una comparación con los resultados teóricos, utilizando la correlación determinada por Lang en [21], que determina el diámetro medio de gota. Para conocer el tamaño de gota en las simulaciones numéricas de este trabajo, se hizo de manera similar que en [37], en el cual, el diámetro de la gota atomizada es el tamaño promedio de la gota en las direcciones horizontal y vertical.

- **Casos 23, 29, 30 y 31. Casos con agua, frecuencias de excitación que van desde mediano hasta alto orden de magnitud, mismas propiedades del fluido.**

Los resultados del diámetro medio de gota para algunos casos en los cuales se tienen las mismas propiedades del fluido, pero diferente frecuencia son presentados en la figura 5.11, los cuales tienen un error máximo relativo del 6.8 % y un mínimo del 0.7 %. De esta manera, los resultados muestran que las aproximaciones numéricas siguen la tendencia de los resultados en la literatura, prediciendo muy cercanamente con la expresión determinada en [21]. Además de que proporcionan un

acercamiento al cometido de la atomización ultrasónica, puesto que el valor del tamaño medio de gota es inversamente proporcional a la frecuencia de forzamiento con la que es excitada la película del líquido. Es decir, al ser incrementado el valor de la frecuencia de forzamiento, el diámetro medio de gota va haciéndose más pequeño.



*Figura 5.11. Comparación de tamaño de diámetro medio de gota para los casos 23, 29, 30 y 31.*

➤ **Casos 21, 22, 24, 25, 26 y 28. Casos con agua y agua destilada, frecuencias de excitación de mediano orden de magnitud, diferentes propiedades del fluido.**

En los casos mostrados en la figura 5.12 se hace la comparación de éstos teniendo en cuenta que cada uno de ellos tiene diferentes propiedades del fluido, con las cuales se encontraron errores mínimos inherentes al cálculo del tamaño del diámetro, ya que a medida en que la tensión superficial se incrementa, el error relativo disminuye, debido a que esta propiedad del fluido hace

que la gota eyectada tenga una mayor esfericidad, y también, participa en que sea más simétrica la gota; sino fuera así, la gota eyectada tendría mayores irregularidades en su geometría y con ésto, un mayor error en el cálculo del tamaño del diámetro. Por otro lado, la viscosidad también tiene su efecto, ya que con una viscosidad menor se tiene un error mayor. Por esta razón, una combinación que haría que los errores disminuyeran es aquella en la cual tanto la tensión superficial como la viscosidad sean de valores altos, ya que, si alguna de las dos es opuesta en términos de valores, variarían los errores al grado de aumentarlos.

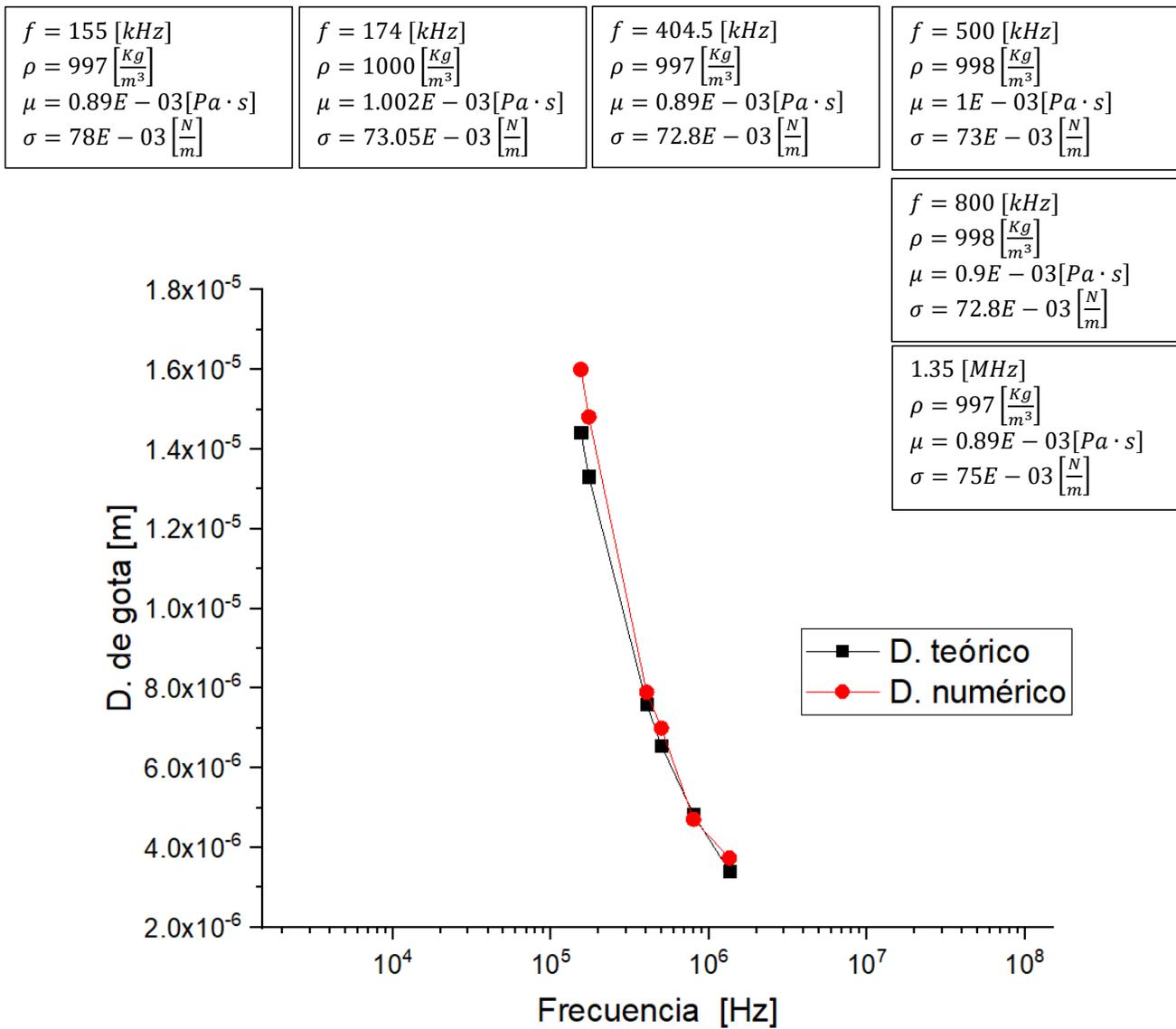
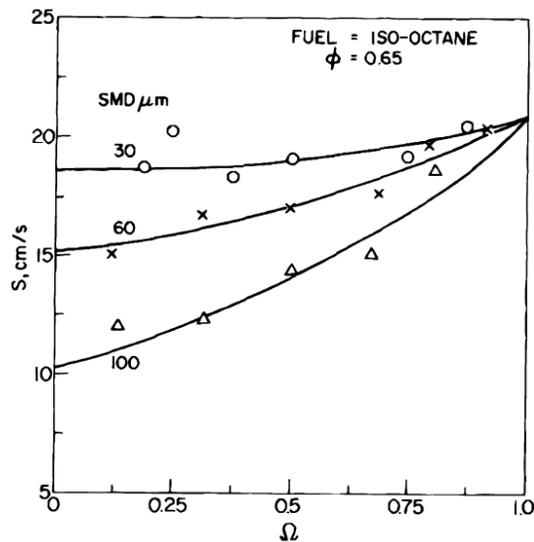


Figura 5.12. Comparación de tamaño de diámetro medio de gota para los casos 21, 22, 24, 25, 26 y 28.

Ahora bien, como se mencionó en el capítulo 1 de esta tesis, el objetivo general es aplicar el fenómeno de la atomización ultrasónica a un combustible, y dado que el interés nació porque a partir de este fenómeno se pueden llegar a obtener tamaños de partículas atomizadas pequeñas, y con esto alcanzar una combustión más eficiente. Por ese motivo, ahora el fluido de trabajo que se utilizará es gasolina.

En [46] encontraron que la velocidad de combustión en la mezcla tiende a la máxima posible conforme el tamaño de las partículas disminuye.

Una mezcla con combustible evaporado es favorable, pues la combustión más rápida y completa sucede cuando el combustible se encuentra en fase gaseosa. El comportamiento de la velocidad de propagación del frente de flama en aire-octano se muestra en la figura 5.13; se observa que conforme va disminuyendo el tamaño de aerosol, la velocidad de propagación de flama tiende a la máxima posible [47].



**Figura 5.13.** Influencia del porcentaje de combustible evaporado  $[\Omega]$  y del SMD en la velocidad de propagación de flama  $[S]$  para combustible iso-octano [47].

## 5.4 Comparación de longitud de onda capilar en configuraciones 2D, aplicado a gasolina

Para estos casos, se analiza el fenómeno de la atomización ultrasónica aplicado a un combustible, que para fines de este trabajo se utiliza gasolina. Para ésto, se tomaron dos valores de frecuencia de excitación, estos valores fueron seleccionados en cuestión a que, para alcanzar tamaños de gota demasiado pequeños se tienen que utilizar frecuencias de excitación altas (del orden de  $1E+06$ ), y para este trabajo las frecuencias seleccionadas son de 1.7 y 2.4 ambas con unidades en [MHz]; la explicación del porque se hizo esta selección de frecuencias, se detalló en el capítulo 4.

### ➤ Casos 32 y 33 aplicado a gasolina

Los resultados numéricos para los casos 32 y 33 se verifican con la correlación teórica (5.2), misma que fue utilizada para comparar los casos que utilizaron agua y agua destilada, analizados anteriormente. Los resultados de la comparación de la longitud de onda capilar para los casos que utilizan como fluido de trabajo gasolina, se presentan en la figura 5.14. Los errores relativos presentan una pequeña diferencia entre el mínimo y el máximo error relativo, teniendo valores del 0.8 % y 1.9 %, respectivamente. Con esto se vuelve a reafirmar lo anteriormente dicho que conforme se aumenta la frecuencia de excitación los errores relativos disminuyen.

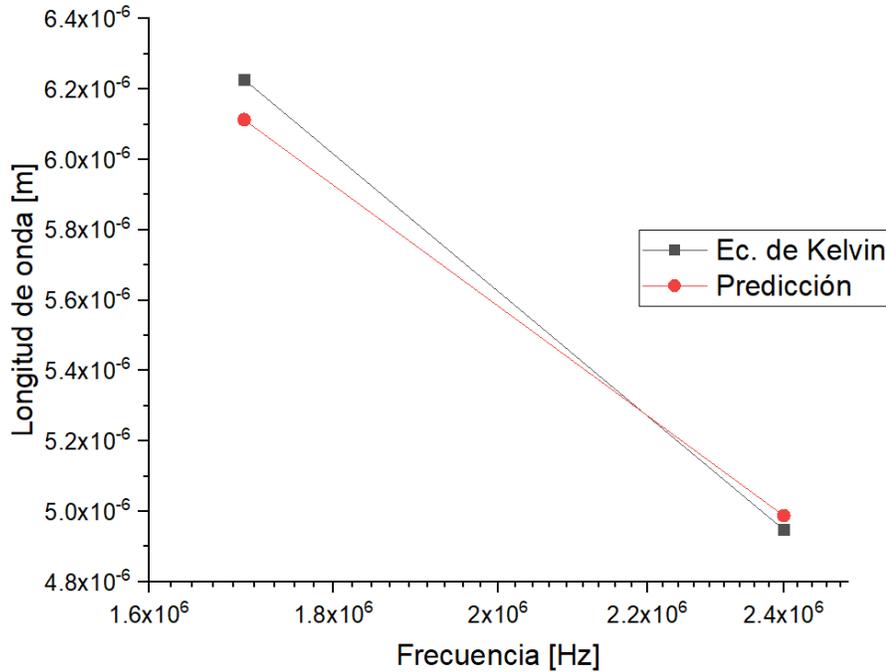
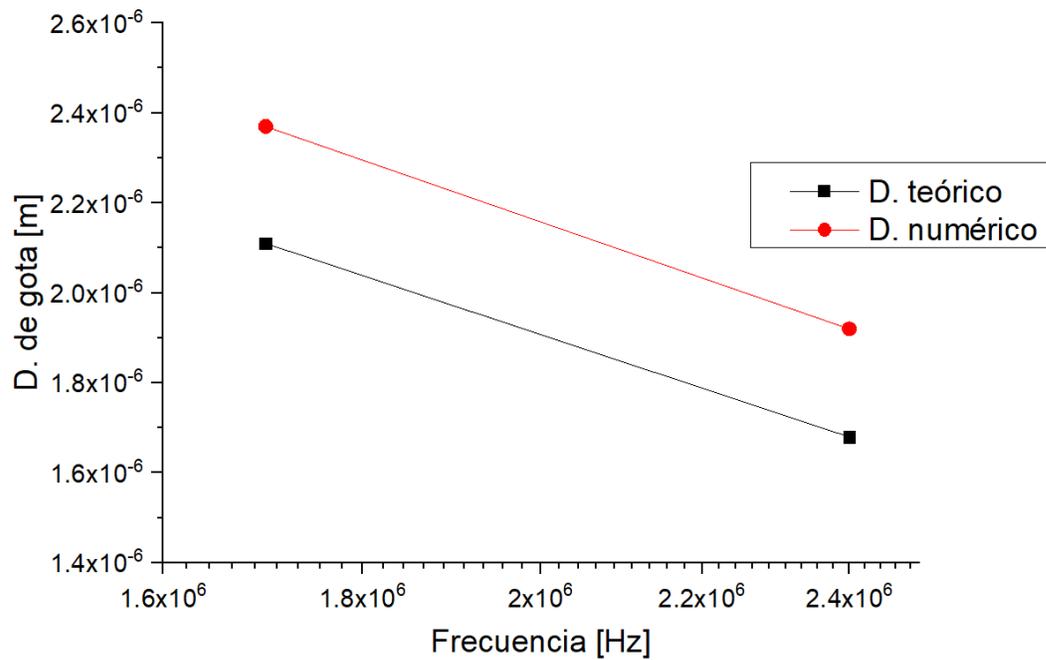


Figura 5.14. Comparación de tamaño de longitud de onda para los casos 32 y 33.

## 5.5 Comparación de diámetros medios de partículas (gota) en configuraciones 2D, aplicado a gasolina

Para obtener mejores beneficios en la combustión, es importante estudiar la física del fenómeno aplicado a un combustible y conocer si la eyección de gotas a través del ultrasonido es eficiente para este fluido. Así que, analizando los resultados de los casos presentados en la figura 5.15, se observa la tendencia que tienen los resultados numéricos hacia los resultados teóricos, teniendo un error relativo promedio igual a 11.7 %. De igual manera, a medida que se incrementa la frecuencia de  $(1.7E+6)$  a  $(2.4E+6)$  ambas con unidades de [Hz], el tamaño medio de gota va haciéndose más pequeño, teniendo unidades de longitud en la escala de los  $[\mu\text{m}]$ . Además, una cosa importante a notar es que: si se comparan los resultados obtenidos anteriormente a las mismas frecuencias pero utilizando agua y ahora gasolina, se encuentra que el diámetro medio de la gota es menor utilizando la gasolina que cuando se utiliza agua, lo que es debido a las propiedades de cada fluido, puesto

que en la gasolina sus propiedades son de menor valor en comparación con las del agua, sobre todo la tensión superficial y la densidad, las cuales, son propiedades que el autor Lang utiliza dentro de su expresión publicada en [21].



*Figura 5.14. Comparación de tamaño de diámetro medio de gota para los casos 32 y 33 aplicado a gasolina.*

## 6 Conclusiones y recomendaciones para trabajos futuros

En este trabajo de tesis se simuló numéricamente el fenómeno de la atomización ultrasónica para distintos fluidos líquidos, tales como, agua, agua destilada y gasolina.

Para representar el modelo para flujos multifásicos, el sistema se simuló con el método de volumen de fluido (VOF), este modelo es una variante simplificada del modelo Euleriano-Euleriano, debido a que para el modelo VOF no se necesitan resolver las ecuaciones de conservación para cada fase, sino que solamente resuelve una ecuación para ambas fases, teniendo como identificador un valor escalar " $\alpha$ ", el cual diferencia una fase respecto a otra. Para hacer la simulación utilicé las ecuaciones de conservación de masa, cantidad de movimiento y la ecuación adicional del modelo VOF, las cuales fueron resueltas mediante el método de volúmenes finitos.

Los efectos de la tensión superficial se representaron a través del modelo de fuerza de superficie continua (CSF), el cual se expresó como una fuerza volumétrica por el teorema de la divergencia y fue implementado, tal que la suma de la tensión superficial en los cálculos de VOF resultan en un término fuente en la ecuación de conservación de cantidad de movimiento.

El sistema constó de un caso base y de otros 33 casos con diferente configuración cada uno. Adicionalmente, se emplearon parámetros para propiciar el movimiento vertical periódico a la fracción líquida, tales como: amplitud y frecuencia de forzamiento.

El trabajo de tesis, se centró en el análisis enfocado en las variaciones que tienen la longitud de onda capilar y el diámetro medio de gota.

Al analizar el movimiento del flujo, se encontró que primeramente comienza a presentarse en la superficie líquida el fenómeno de la inestabilidad de Faraday, que son básicamente perturbaciones pequeñas y desordenadas en la superficie o también llamada zona de interfase. Estas pequeñas

perturbaciones son debidas al movimiento vertical periódico que se indujo en la parte inferior de la película líquida.

La formación de ondas capilares en la superficie líquida es una respuesta de la inestabilidad de Faraday, para un determinado tiempo posterior al inicial. A diferencia del primer fenómeno que ocurrió (inestabilidad de Faraday), las ondas capilares si presentan una formación simétrica y periódica, las cuales a partir de éstas se comenzaron a desarrollar las gotas que posteriormente fueron eyectadas. También, se encontró que la mayor velocidad se presenta en la parte central de cada onda capilar o también llamada cresta, lo que provoca que ésta comience a crecer de forma ascendente. De manera que, en la parte superior se va concentrando líquido (cabeza) y debido a que el líquido que compone la cresta se abultó en la parte superior, debajo se formó un cuello que se adelgaza conforme crece la energía cinética, hasta el punto donde el cuello es demasiado delgado ocasionando que esta porción se separe del resto de la película líquida.

Para que ocurriera la atomización o eyección de gotas es necesario que la energía cinética de la cresta, fuera mayor que la energía restitutiva, que para este caso se trata de la tensión superficial, debido a que en este fenómeno existe una ponderación de fuerzas y a partir de esto se define cual fuerza es más dominante sobre la otra, ya que si la energía restitutiva es mayor que la energía cinética de la cresta, no permitirá que haya atomización de fluido líquido, por el contrario, si la energía restitutiva es menor que la cinética de la cresta, entonces comenzará la atomización del fluido. Aunado a lo anterior, entre más grande es la tensión superficial de la fracción líquida, permite que se forme una gota atomizada con mayor esfericidad y simetría.

Para verificar los resultados numéricos con resultados teóricos, se utilizó la ecuación de Kelvin para calcular el tamaño de la longitud de onda capilar teórica, y la correlación de Lang para calcular el diámetro medio de gota atomizada teórico. Además, se compararon algunos resultados experimentales para validar las predicciones numéricas.

Al realizar las comparaciones de la longitud de onda capilar se encontró que los errores relativos son menores cuando se utilizó una frecuencia de excitación mayor que cuando operaron con frecuencias de menor orden de magnitud, porque a medida en que se incremente la frecuencia, la longitud de onda será de menor tamaño, obligando a que el tamaño de malla del dominio computacional sea más pequeño, y con ésto, mayor precisión en el cálculo.

Los casos 7, 12 y 13 fueron analizados y comparados, de los cuales, los 2 últimos casos utilizaron agua como fluido de trabajo, a diferencia del primero que utilizó agua destilada; la diferencia entre los fluidos que se utilizaron se encuentra en las propiedades de cada uno. No obstante, todos operaron con frecuencias de excitación similares, sobretodo de igual orden de magnitud ( $1E+03$ ). El resultado mostró que el error relativo promedio que existe entre los casos 12 y 13 fue del 2.25 %, lo cual se considera pequeño en comparación con el caso 7, que tuvo un error relativo del 9.2 %. Estas variaciones en los errores pueden ser debido a que las propiedades de cada fluido (densidad, viscosidad y tensión superficial), son diferentes para estos casos, lo que hace que exista una variación apreciable entre los errores relativos.

Los casos 14, 20, 22 y 25 fueron comparados tanto con resultados experimentales como con la correlación teórica de Kelvin en términos del tamaño de la longitud de onda, donde el mínimo error relativo para los resultados experimentales fue del 1.4 % y el máximo error fue del 3.7 %, por lo que si existe una buena predicción de los resultados numéricos hacia los resultados experimentales en el tamaño de la longitud de onda capilar.

Para comparar el diámetro medio de gota atomizada y verificar los resultados numéricos, se utilizó la correlación teórica propuesta por Lang.

En los casos 23, 29, 30 y 31 se presentó un máximo error relativo del 6.8 % y un mínimo del 0.7 % en términos del diámetro medio de gota. De este modo, se muestra que las aproximaciones numéricas siguieron la tendencia de los resultados teóricos. Además de que, se verificó que el

diámetro medio de gota cuando se atomiza de manera ultrasónica, es inversamente proporcional a la frecuencia de excitación con la que fue producido el movimiento vertical periódico en la fracción líquida. Puesto que, al incrementar el valor de la frecuencia, el diámetro medio de gota tendió a disminuir.

Al analizar los casos 21, 22, 24, 25, 26 y 28, se tuvo en cuenta que cada uno de ellos tiene diferentes propiedades del fluido, las cuales causaron variaciones al cálculo del diámetro de gota, ya que se encontró que a medida en que la tensión superficial es más grande, el error relativo disminuyó. También, la viscosidad tuvo su efecto en errores mínimos inherentes al cálculo del diámetro, ya que con una viscosidad menor se tuvo un error mayor. Por esta razón, una combinación que haría que los errores disminuyeran es aquella en la cual tanto la tensión superficial como la viscosidad sean de valores altos, ya que, si alguna de las dos es opuesta en términos de valores, variarían los errores al grado de aumentarlos.

Por último, de manera análoga a los casos que fueron estudiados con agua y agua destilada, se hizo el análisis y la comparación utilizando gasolina como fluido de trabajo, para verificar con resultados teóricos el tamaño de la longitud de onda y el diámetro medio de gota. Para esto, se utilizaron frecuencias de excitación que operan con valores de 1.7 y 2.4 ambas en [MHz].

Al analizar estos casos que utilizan gasolina, los errores relativos del tamaño de longitud de onda presentaron una pequeña diferencia entre el mínimo y el máximo error relativo, cuyos valores fueron del 0.8 % y 1.9 %, respectivamente.

En lo que corresponde a la comparación del diámetro medio de gota de gasolina, se encontró la tendencia que tuvieron los resultados numéricos hacia los resultados teóricos, teniendo un error relativo promedio igual al 11.7 %. Con estos resultados, se logró el cometido del fenómeno de la atomización ultrasónica, ya que en la medida en que se incrementó la frecuencia de 1.7 [MHz] a

2.4 [MHz], el tamaño medio de gota se hizo más pequeño, teniendo unidades de longitud en la escala de los [ $\mu\text{m}$ ].

Adicionalmente, al comparar los resultados obtenidos a las mismas frecuencias, pero utilizando agua y ahora gasolina, se encontró que el diámetro medio de gota es menor utilizando la gasolina que cuando se utiliza agua, lo que es debido a las propiedades de cada fluido, puesto que en la gasolina sus propiedades son de menor valor en comparación con las del agua, sobre todo la tensión superficial y la densidad, las cuales, son propiedades que el autor Lang utilizó dentro de su correlación.

Finalmente, el interés de atomizar gasolina a través del ultrasonido operado a altas frecuencias se realizó con el fin de obtener tamaños de gota pequeños, y así producir una combustión más completa.

Como seguimiento al párrafo anterior, en los trabajos futuros se sugiere simular y analizar el transporte de las gotas atomizadas, tomando en cuenta las fuerzas que interactúan con las gotas. Posteriormente, introducir las partículas atomizadas por un conducto de admisión donde ocurra el mezclado de aire-combustible, para finalizar con la admisión a la cámara de un motor de combustión interna.

## Apéndice A

### Ecuación de cantidad de movimiento

Con la aplicación del teorema de transporte de Reynolds, se tiene la expresión general para conservar la cantidad de movimiento lineal como se aplica a un volumen de control:

$$\sum \vec{F} = \int_{VC} \rho \vec{g} dV + \int_{SC} \sigma_{ij} \cdot \vec{n} dA = \int_{VC} \frac{\partial}{\partial t} (\vec{V}) dV + \int_{VC} (\rho \vec{V}) \vec{V} \cdot \vec{n} dA \quad (\text{A.1})$$

donde  $\sigma_{ij}$  es el tensor de esfuerzo,  $\vec{g}$  es la fuerza de gravedad,  $A$  es el área y  $V$  es el volumen. La ecuación (A.1) se aplica a volúmenes de control fijos y en movimiento, siempre que  $\vec{V}$  sea la velocidad absoluta (vista desde un observador fijo).

Una forma más general del teorema de divergencia se aplica no sólo a vectores, sino también a otras cantidades, como los tensores:

*Teorema de divergencia extendido:*

$$\int_{Vol} \vec{\nabla} \cdot G_{ij} dV = \oint_A G_{ij} \cdot \vec{n} dA \quad (\text{A.2})$$

Específicamente, si en el teorema de divergencia extendido en la ecuación (A.7)  $G_{ij}$  se sustituye con la cantidad  $(\rho \vec{V}) \vec{V}$ , un tensor de segundo orden, el último término en la ecuación (A.1) se convierte en:

$$\int_{SC} (\rho \vec{V}) \vec{V} \cdot \vec{n} dA = \int_{VC} \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{V} \vec{V}) dV \quad (\text{A.3})$$

donde  $\vec{V}\vec{V}$  es un producto vectorial llamado producto exterior (producto tensorial de dos vectores) del vector de velocidad consigo mismo. De manera similar, si en la ecuación (A.2) se sustituye con el tensor de esfuerzo  $\sigma_{ij}$ , el segundo término en el lado izquierdo de la ecuación (A.1) se convierte en:

$$\int_{SC} \sigma_{ij} \cdot \vec{n} dA = \int_{VC} \vec{\nabla} \cdot \sigma_{ij} dV \quad (\text{A.4})$$

Por lo tanto, las dos integrales de superficie de la ecuación (A.1) se convierten en integrales de volumen, cuando se aplican las ecuaciones (A.3) y (A.4). Si se combinan y reordenan términos de las ecuaciones anteriores, la ecuación (A.1) se reescribe como:

$$\int_{VC} \left[ \frac{\partial}{\partial t} (\rho \vec{V}) + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{V}\vec{V}) - \rho \vec{g} - \vec{\nabla} \cdot \sigma_{ij} \right] dV = 0 \quad (\text{A.5})$$

Para finalizar, se afirma que la ecuación (A.5) es válida para cualquier volumen de control sin importar su tamaño o forma. Esto es posible sólo si el integrando es idénticamente cero. En consecuencia, se tiene una ecuación diferencial general para la conservación de cantidad de movimiento lineal, conocida como ecuación de Cauchy:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \vec{V}) + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{V}\vec{V}) = \rho \vec{g} + \vec{\nabla} \cdot \sigma_{ij} \quad (\text{A.6})$$

Cuando se aplica la regla de la derivada del producto al primer término del lado izquierdo de la ecuación (A.6) se obtiene:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \vec{V}) = \rho \frac{\partial \vec{V}}{\partial t} + \vec{V} \frac{\partial \rho}{\partial t} \quad (\text{A.7})$$

El segundo término de la ecuación (A.6) se puede escribir como:

$$\vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{V} \vec{V}) = \vec{V} \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{V}) + \rho (\vec{V} \cdot \vec{\nabla}) \vec{V} \quad (\text{A.8})$$

Por lo tanto, se eliminó el tensor de segundo orden representado por  $\vec{V} \vec{V}$ . Después de cierto reordenamiento, la sustitución de las ecuaciones (A.7) y (A.8) en la ecuación (A.6) produce:

$$\rho \frac{\partial \vec{V}}{\partial t} + \vec{V} \left[ \frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{V}) \right] + \rho (\vec{V} \cdot \vec{\nabla}) \vec{V} = \rho \vec{g} + \vec{\nabla} \cdot \sigma_{ij} \quad (\text{A.9})$$

En la ecuación (A.9), la expresión en corchetes en esta ecuación es idénticamente cero por la ecuación de continuidad, ecuación (2.2). Cuando se combinan los dos términos restantes del lado izquierdo, la ecuación (A.9) se escribe:

*Forma alternativa de la ecuación de Cauchy:*

$$\rho \left[ \frac{\partial \vec{V}}{\partial t} + (\vec{V} \cdot \vec{\nabla}) \vec{V} \right] = \rho \frac{D\vec{V}}{Dt} = \rho \vec{g} + \vec{\nabla} \cdot \sigma_{ij} \quad (\text{A.10})$$

En coordenadas cartesianas, las tres componentes de la ecuación de Cauchy son:

$$\text{Componente } x: \rho \frac{Du}{Dt} = \rho g_x + \frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{zx}}{\partial z} \quad (\text{A.11a})$$

$$\text{Componente } y: \rho \frac{Dv}{Dt} = \rho g_y + \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{zy}}{\partial z} \quad (\text{A.11b})$$

$$\text{Componente } z: \rho \frac{Dw}{Dt} = \rho g_z + \frac{\partial \sigma_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{yz}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{zz}}{\partial z} \quad (\text{A.11c})$$

Para obtener las ecuaciones de Navier-Stokes, se debe expresar el tensor de esfuerzos  $\sigma_{ij}$  en términos de las incógnitas primarias, es decir, densidad, presión y velocidad.

Esto se puede realizar mediante las ecuaciones constitutivas que nos permiten escribir las componentes del tensor de esfuerzo en términos del campo de velocidad y del campo de presión.

La primera acción que se hace es separar los esfuerzos de presión y los esfuerzos viscosos; cuando un fluido se mueve, la presión actúa hacia dentro normal, pero también pueden existir esfuerzos viscosos. La ecuación (A.10) se generaliza para fluidos en movimiento como:

$$\sigma_{ij} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -P & 0 & 0 \\ 0 & -P & 0 \\ 0 & 0 & -P \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \tau_{xx} & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{yx} & \tau_{yy} & \tau_{yz} \\ \tau_{zx} & \tau_{zy} & \tau_{zz} \end{pmatrix} \quad (\text{A. 12})$$

donde  $\tau_{ij}$  es un nuevo tensor, llamado tensor de esfuerzo viscoso.

Este estudio se concentra para fluidos newtonianos, que se definen como los fluidos para los que el esfuerzo de corte es linealmente proporcional a la razón de deformación por corte; donde por definición, el tensor de esfuerzo es linealmente proporcional al tensor de razón de deformación:

$$\tau_{ij} = 2\mu\varepsilon_{ij}\delta_{ij} \quad (\text{A. 13})$$

donde  $\varepsilon_{ij}$  es el tensor de razón de deformación. La ecuación (A.14) muestra que el esfuerzo es linealmente proporcional a la deformación. En coordenadas cartesianas, se mencionan las nueve componentes del tensor de esfuerzo viscoso, seis de las cuales son independientes debido a simetría:

$$\tau_{ij} = \begin{pmatrix} \tau_{xx} & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{yx} & \tau_{yy} & \tau_{yz} \\ \tau_{zx} & \tau_{zy} & \tau_{zz} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2\mu\frac{\partial u}{\partial x} & \mu\left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x}\right) & \mu\left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x}\right) \\ \mu\left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y}\right) & 2\mu\frac{\partial v}{\partial y} & \mu\left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y}\right) \\ \mu\left(\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z}\right) & \mu\left(\frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z}\right) & 2\mu\frac{\partial w}{\partial z} \end{pmatrix} \quad (\text{A. 14})$$

En coordenadas cartesianas, el tensor de esfuerzo de la ecuación (A.12) se convierte por lo tanto en:

$$\sigma_{ij} = \begin{pmatrix} -P & 0 & 0 \\ 0 & -P & 0 \\ 0 & 0 & -P \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 2\mu \frac{\partial u}{\partial x} & \mu \left( \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) & \mu \left( \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \\ \mu \left( \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) & 2\mu \frac{\partial v}{\partial y} & \mu \left( \frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) \\ \mu \left( \frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z} \right) & \mu \left( \frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z} \right) & 2\mu \frac{\partial w}{\partial z} \end{pmatrix} \quad (\text{A. 15})$$

Ahora, se sustituye la ecuación (A.15) en las tres componentes cartesianas de la ecuación de Cauchy. Primero se considera la componente  $x$ . La ecuación (A.11a) se convierte en:

$$\rho \frac{Du}{dt} = -\frac{\partial P}{\partial x} + \rho g_x + 2\mu \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu \left( \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \mu \left( \frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z} \right) \right) \quad (\text{A. 16})$$

Después de cierto reordenamiento de los términos viscosos en la ecuación (A.16) (se supone viscosidad constante), queda de la siguiente manera:

$$\rho \frac{Du}{dt} = -\frac{\partial P}{\partial x} + \rho g_x + \mu \left[ \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial w}{\partial z} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right] \quad (\text{A. 17})$$

$$\rho \frac{Du}{dt} = -\frac{\partial P}{\partial x} + \rho g_x + \mu \left[ \underbrace{\frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right)}_{\rho = cte} + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right]$$

$\rho = cte$

El término entre paréntesis es cero debido a la ecuación de continuidad para un flujo incompresible. También, se identifican los últimos tres términos como el laplaciano de la componente de velocidad  $u$  en coordenadas cartesianas. Por lo tanto, la componente  $x$  de la ecuación de cantidad de movimiento se escribe como:

$$\rho \frac{Du}{Dt} = -\frac{\partial P}{\partial x} + \rho g_x + \mu \nabla^2 u \quad (\text{A. 17a})$$

De manera similar se escriben las componentes “y” y “z” de la ecuación de cantidad de movimiento como:

$$\rho \frac{Dv}{Dt} = -\frac{\partial P}{\partial y} + \rho g_y + \mu \nabla^2 v \quad (\text{A. 17b})$$

Y

$$\rho \frac{Dw}{Dt} = -\frac{\partial P}{\partial z} + \rho g_z + \mu \nabla^2 w \quad (\text{A. 17c})$$

Para finalizar, se combinan las tres componentes en una ecuación vectorial; el resultado es la ecuación de Navier-Stokes para flujo incompresible con viscosidad constante.

*Ecuación de Navier-Stokes:*

$$\rho \frac{D\vec{V}}{dt} = -\vec{\nabla}P + \rho \vec{g} + \mu \nabla^2 \vec{V} \quad (\text{A. 18})$$

Aunque las componentes de la ecuación (A.17) se dedujeron en coordenadas cartesianas, la forma vectorial de la ecuación (A.18) es válida en cualquier sistema coordenado ortogonal.

## 7 Referencias

- [1] John B. Heywood, *Internal combustion engine fundamentals*, McGraw-Hill International editions, 1988.
- [2] Brackbill, J., Kothe, D.B., Zemach, C., “A continuum method for modeling surface tensión,” *J. Comput. Phys.* 100(2), 335–354 (1992).
- [3] Matías Ignacio Inaipil Leal, “Análisis Fluido Dinámico de un Flujo de Burbujas Mediante CFD,” Universidad de Chile, Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas, Santiago de Chile, 2015.
- [4] Bakker, *Computational Fluid Dynamics Conferencias: Conferencia 14. flujo multifásico*, 2008.
- [5] María Zamora Pina, “Simulación numérica de la inyección de gas en columnas de flujo oscilatorio,” Universidad Politécnica de Cartagena, Cartagena, 25 de abril de 2016.
- [6] J. W. S. Rayleigh, “The Theory of Sound,” (Dover Publications, New York, 1945), Vol. II, Chap. 20, p. 344.
- [7] W. Eisenmenger, “Dynamic properties of the surface tension of water and aqueous solutions of surface active agents with standing capillary waves in the frequency range from 10 kc/s to 1.5 Mc/s,” *Acustica* 9, 327–340 (1959).
- [8] Kristoffer Johansson, “Numerical Simulation of Fuel Filling with Volume of Fluid,” Department of Chemistry and Bioscience, *Division of Chemical Reaction Engineering*, Chalmers University of Technology, Gothenburg, Sweden, 2011.
- [9] Yikai Li and Akira Umemura, “Two-dimensional numerical investigation on the dynamics of ligament formation by Faraday instability,” *International Journal of Multiphase Flow* 60 (2014) 64–75.
- [10] Ashley J. James, Marc K. Smith and Ari Glezer, “Vibration-induced drop atomization and the numerical simulation of low-frequency single-droplet ejection,” *J. Fluid Mech.* (2003), vol. 476, pp. 29-62.
- [11] Weierman, C. “Correlations Ease The Selection of Finned Tubes”. *Oil and Gas Journal* 74:36 (1976) 94-100.
- [12] Weierman C. and Taborek J. Comparison of the performance of in-line and staggered banks of tubes with segmented fins, *Chem. Engineers* 74:174 (1978) 39-46.
- [13] ESCOA, Weierman C. and Taborek J. Comparison of the performance of in-line and staggered banks of tubes with segmented fins, *Chem. Engineers* 74:174 (1978) 39-46.
- [14] Nir A. Nir. Heat Transfer and Friction Factor Correlations for Crossflow over Staggered Finned Tube Banks. *Heat Transfer Engineering* 12-1 (1991) 43-58.

- [15] Kiyoshi Kawaguchi, Kenichi Okui, Takaharu Kashi. Heat transfer and pressure drop characteristics of finned tube banks in forced convection. *Journal of Enhanced Heat Transfer* 12-1 (2005) 1-20.
- [16] A. Nir. Heat Transfer and Friction Factor Correlations for Crossflow over Staggered Finned Tube Banks. *Heat Transfer Engineering* 12-1 (1991) 43-58.
- [17] Hailing Wu, Diana Ma, Massoud Kaviany. Peripheral fins for blockage robustness. *International Journal of Heat and Mass Transfer* 50 (2007) 2514–2520.
- [18] F. A. Williams. *Combustion Theory*. Benjamin/Cummings Publishing Co. Second edition, 1985.
- [19] J. W. S. Rayleigh, *The Theory of Sound* (Dover Publications, New York, 1955), Vol. II, Chap. 20, p. 344.
- [20] R.I. Issa, A.D. Gosman and A.P. Watkins, “The Computation of Compressible and Incompressible Recirculating Flows by a Non-iterative Implicit Scheme,” *Journal of computational physics* 62, 66-82 (1986).
- [21] R. J. Lang, “Ultrasonic atomization of liquids,” *J. Acoust. Soc. Am.* 34, 6–8 (1962).
- [22] D. Briceño-Gutierrez, V.Salinas-Barrera, Y. Vargas-Hernández, L. Gaete-Garretón and C. Zanelli-Iglesias, “On the ultrasonic atomization of liquids,”. *Physics Procedia* 63 (2015).
- [23] Yu. Ya. Boguslavskii and O. K. Éknadiosyants “Physical mechanism of the acoustic atomization of a liquid,” *Soviet Physics – Acoustics*, vol 15, N° 1, pp 14-21 (1969).
- [24] V.I. Sorokin, “The effect of fountain formation at the surface of a vertically oscillating liquid,”. *Soviet Physics, Acoustic* 3 281-291 (1957).
- [25] R. Pohlman, K. Heisler, and M. Cichos, “Powdering aluminium and aluminium alloys by ultrasound,” *Ultrasonics* 12, 11–15 (1974).
- [26] C.L. Goodridge, W. Tao Shi, H.G.E. Hentschel, D.P. Lathrop, “Viscous effects in droplet-ejecting capillary waves,” *Phys. Rev. E.* 56 (1) (1997) 472–475.
- [27] C.L. Goodridge, H.G.E. Hentschel, D.P. Lathrop, “Breaking Faraday waves, Critical slowing of droplet ejection rates,” *Phys. Rev. Lett.* 82 (15) (1999) 3062–3065.
- [28] R. Rajan and A. B. Pandit, “Correlations to predict droplet size in ultrasonics atomization,” *Ultrasonics* 39, 235–255 (2001).
- [29] M. Dobre, L. Bolle, “Practical design of ultrasonic spray devices: experimental testing of several atomizer geometries,”. *Experimental Thermal and Fluid Science* 26 (2002).
- [30] D. Sarkovic and V. Babovic, “On the statistics of ultrasonically produced water droplets,” *Z. Naturforsch.* 60, 489–493 (2005).
- [31] L. Gaete-Garretón, D. Briceño-Gutiérrez, Y. Vargas-Hernández, and C. I. Zanelli, “Ultrasonic atomization of distilled water,”. *The Journal of the Acoustical Society of America* 144, 222 (2018).

- [32] P. Deepu, Chang Peng, Saeed Moghaddam, “Dynamics of ultrasonic atomization of droplets,” *Experimental Thermal and Fluid Science* 92 (2018).
- [33] Rongguo Hou, Chuanzhen Huang & Hongtao Zhu, “Numerical simulation ultrahigh waterjet (WJ) flow field with the high-frequency velocity vibration at the nozzle inlet,” *Int J Adv Manuf Technol* (2014).
- [34] Rongguo Hou, Tao Wang, Zhe Lv, Yebing Tian, “Investigation of the pulsed waterjet flow field inside and outside of the nozzle excited by ultrasonic vibration,” *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology* (2018).
- [35] Jesi Ehrhorn and William Semke, “Numerical Modeling of Vibration Induced Atomization of Liquids,” *Proceedings of the 31st IMAC, A Conference on Structural Dynamics*, 2013.
- [36] Yusuf Al-Suleimani and Andrew J Yule, “A CFD prediction of wave development and droplet production on surface under ultrasonic excitation,” *ILASS-Europe 2002*.
- [37] Yang Hua, Fushui Liu, Yikai Li, Ning Kang, Han Wu, “Experimental and numerical study on the effect of dimensionless parameters on the characteristics of droplet atomization caused by periodic inertial force,” *Fuel* 253 (2019) 941–949.
- [38] C. W. Hirt and B. D. Nichols. “Volume of Fluid (VOF) Method for the Dynamics of Free Boundaries,” *Journal of Computational Physics* 39, 201-225 (1981).
- [39] Franz Grieser, “Sonochemistry and the Acoustic Bubble,” Elsevier Radarweg 29, PO Box 211, 1000 AE Amsterdam, Netherlands The Boulevard, Langford Lane, Kidlington, Oxford OX5 1GB, UK 225 Wyman Street, Waltham, MA 02451, USA.
- [40] Juan A. Gallego-Juárez and Karl F. Graff, “Power Ultrasonics Applications of High-intensity Ultrasound,” Woodhead Publishing is an imprint of Elsevier 80 High Street, Sawston, Cambridge, CB22 3HJ, UK 225 Wyman Street, Waltham, MA 02451, USA Langford Lane, Kidlington, OX5 1GB, UK.
- [41] Nikolaos D. Katopodes, “Chapter 12 – Volume of Fluid Method,” *Free-Surface Flow, Computational Methods 2019*, Pages 766-802.
- [42] D.L. Youngs, “Numerical Methods for Fluid Dynamics,” (Atomic Weapons Research Establishment, Aldermaston), 1982.
- [43] S.V. Patankar and D.B. Spalding, “A Calculation Procedure for Heat, Mass and Momentum Transfer in Three-Dimensional Parabolic Flows,” *Int. J. of Heat and Mass Transfer*, 15, 1972.
- [44] S.V. Patankar, “Numerical Heat Transfer and Fluid Flow,” *Series in computational methods in mechanics and thermal sciences*, 1980.
- [45] S.V. Patankar, “A Calculation Procedure for Two-Dimensional Elliptic Situations,” *Num. Heat Transfer*, vol. 2.
- [46] G. Richards and A. Lefebvre, “Turbulent Flame Speeds of Hydrocarbon Fuel Droplets in Air,” *Combustion and Flame - COMBUST FLAME*. 78. 299-307. 1989.

[47] D.R. Ballal and A.H. Lefebvre, "Flame propagation in heterogeneous mixtures of fuel droplets, fuel vapor and air," Symposium (International) on Combustion, Volume 18, Issue 1, 1981, Pages 321-328.

[48] K.A. Ramisetty, A.B. Pandit and P.R. Gogate, "Investigations into ultrasound induced atomization," Ultrasonics Sonochemistry, Volume 20, Issue 1, January 2013, Pages 254-264.