

REAL ACADEMIA DE CIENCIAS  
EXACTAS, FISICAS Y NATURALES

---

**El papel de la mecánica  
de fluidos  
en los procesos de combustión**

DISCURSO

LEIDO EN EL ACTO DE SU RECEPCION

POR EL

EXCMO. SR. D. AMABLE LIÑAN MARTINEZ

Y

CONTESTACION

DEL

EXCMO. SR. D. GREGORIO MILLAN BARBANY

EL DIA 23 DE ENERO DE 1991



MADRID  
DOMICILIO DE LA ACADEMIA:  
VALVERDE, 22 — TELEFONO 521 25 29  
1991

DISCURSO

del

EXCMO. SR. D. AMABLE LIÑAN MARTINEZ

tema:

EL PAPEL DE LA MECANICA DE FLUIDOS  
EN LOS PROCESOS DE COMBUSTION

Excelentísimo Sr. Presidente  
Excelentísimos Sres. Académicos  
Señoras y Señores:

En este momento tan solemne de mi vida debo empezar expresando mi agradecimiento por la benevolencia con que han tenido ustedes que mirar mis méritos limitados al tomar la decisión de acogerme en esta Casa. Debo decir que me siento abrumado por la responsabilidad de sustituir a D. Felipe Lafita, cuya asombrosa actividad dió lugar a muchas aportaciones, de carácter muy diverso, que fueron de gran importancia para el desarrollo de la Ingeniería Aeronáutica Española. Su afán por la adquisición de conocimientos, que mantuvo a lo largo de su vida, le lleva a obtener la triple titulación en Ingeniería Naval, Aeronáutica e Industrial; su inquietud por la diseminación de estos conocimientos le llevó a ser Profesor de una gran variedad de materias de la Ingeniería y a dejarnos unos textos excelentes sobre Aerodinámica Aplicada, Técnicas del Hidroavión, Elasticidad, Resistencia de Materiales y Vibraciones Mecánicas. D. Felipe Lafita brilló, también excepcionalmente, como hombre de acción, desplegando energías inagotables en la creación y organización de instituciones dedicadas a la Investigación y Desarrollo de la Ingeniería y, en especial, de la Ingeniería Aeronáutica.

Sólo puedo justificar el honor que me habéis conferido por el interés de la Academia en mantener en la misma el nivel de presencia de la Ingeniería Aeronáutica. Y debo suponer, que entre los Ingenieros Aeronáuticos, he sido elegido por aparecer con frecuencia como uno de los portavoces de una comunidad española, pequeña pero muy activa, dedicada a la Mecánica de Fluidos. Esta comunidad tiene su origen en el periodo en que D. Felipe Lafita, cuyo puesto me llamáis a ocupar, fué Director del Instituto Nacional de Técnica Aeronáutica y también Director y Profesor

de la Escuela Superior Aerotécnica, y más adelante profesor de la Academia Militar de Ingenieros Aeronáuticos.

Me atrevo a adivinar que fué vuestra preocupación por el desarrollo de la Mecánica de Fluidos en España, aún insuficiente dada su importancia en los procesos industriales, lo que os llevó a utilizar mi elección como un medio más de incentivar este desarrollo. Aún consciente de mis limitaciones, no han de faltarme ánimos para esforzarme en ayudaros en vuestros esfuerzos en contribuir a crear el clima propicio para el desarrollo científico y tecnológico de nuestro país.

Los escasos méritos que habéis podido encontrar en mi actividad docente e investigadora no se derivan tanto de mi capacidad como de la fortuna de haber recibido, en primer lugar, el apoyo y el aliento de mi familia para poder dedicarme, en circunstancias económicas difíciles, a mi vocación por el estudio. En segundo lugar, fué también la fortuna la que me llevó a elegir la Escuela de Ingenieros Aeronáuticos para mi formación docente y al INTA para mi formación investigadora. Esta elección, como me esforzaré en mostrar a continuación, ha sido determinante de mis escasos méritos.

Tanto en la Escuela como en el INTA perdura la influencia beneficiosa de algunos de los miembros actuales de esta Academia y de muchos otros miembros que por desgracia hemos perdido. Estos dejaron en la Escuela, como herencia, la preocupación por la profundidad, actualidad, rigor y elegancia en la modelización y tratamiento matemático de los problemas de la Ingeniería. De esta herencia me beneficié en mis años de formación tanto en la Escuela como en el INTA. La Escuela actual tiene su origen en la Escuela Superior Aerotécnica, cuyo primer Director fué el ilustre Académico D. Emilio Herrera. D. Felipe Lafita Babío, el eminente Académico cuyo puesto me parece imposible sustituir, se incorporó a la Escuela, siendo ya Ingeniero Naval, para seguir los estudios de Ingeniería Aeronáutica que completó con el número uno de la segunda promoción. Allí tuvo como profesores a otros insignes académicos

como Terradas, Plans Freire, Rey Pastor, Navarro Borrás, Puig Adam, San Juan y Palacios, quienes aportaron el nivel científico necesario para abordar los difíciles problemas de la Ingeniería Aeronáutica y también el prestigio necesario para atraer a estudiantes brillantes.

D. Felipe Lafita fué nombrado Director y Profesor de Aerodinámica Aplicada cuando, después de nuestra guerra civil se reanudaron las enseñanzas de la Ingeniería Aeronáutica en la Escuela Superior Aerotécnica. Esta se convertiría más adelante en la Academia Militar de Ingenieros Aeronáuticos. Como Director no dudó en mantener el carácter científico y el nivel excepcional del profesorado del periodo de D. Emilio Herrera, incentivando así la incorporación posterior de otros ilustres profesores, entre los que se encuentran los académicos Sixto Ríos y Gregorio Millán.

Como nos recordaba Gregorio Millán en su nota necrológica de homenaje a D. Felipe Lafita, sus contribuciones a nuestra Ingeniería no sólo se encuentran en el conjunto de textos sobre Vibraciones Mecánicas, Elasticidad y Resistencia de Materiales, Aerodinámica Aplicada y Técnica del Hidroavión, donde resalta su preocupación por el rigor y el nivel científico, sin dejar de lado el carácter práctico de la enseñanza, sino también en su contribución a la estructura y carácter de las instituciones en las que jugó un papel importante. Pues, en palabras de Gregorio Millán, *"la Ciencia no es en sí misma el objeto de la preocupación de Felipe Lafita, salvo en la medida en que fundamenta el inteligente ejercicio y desarrollo de la Ingeniería, pero tiene plena conciencia de su importancia esencial para este propósito y, como siempre, se esfuerza en buscar acciones que permitan potenciar la mutua relación entre ambas... El ejemplo más notable y trascendente de este empeño fué el que condujo a la creación del INTA, cuya dirección desempeñó con gran acierto, desde su origen en 1942 hasta que se trasladó a Barcelona 10 años más tarde. De la savia de esa década prodigiosa se ha nutrido lo mejor de nuestra tecnología aeroespacial"*.

Felipe Lafita consiguió el apoyo del Ministro del Aire, D. Juan Vigón, para su iniciativa de creación del INTA y el nombramiento providencial de D. Esteban Terradas como primer Presidente, cuyo prestigio, inspiración científica y capacidad de convocatoria fueron esenciales para romper la barrera de nuestro aislamiento en aquellos años. El triunvirato formado por D. Esteban Terradas como Presidente, D. Felipe Lafita como Director y D. Antonio Pérez Marín como Secretario General y Técnico del Instituto actuó muy eficazmente para dotar al INTA de los programas de trabajo e instalaciones que permitieran abordar adecuadamente los problemas planteados por una tecnología que entonces se encontraba en un momento de rápida transformación. Consideraron de la mayor importancia que nuestros ingenieros conocieran los medios y los programas de trabajo de instituciones similares de otros países. Convirtieron el INTA, en palabras de Gregorio Millán, en una Cátedra Internacional por donde desfilaron las figuras más prestigiosas de la Ciencia y Tecnología Aeronáutica de Europa y América. El INTA organizó una gran variedad de cursos y conferencias con el objetivo de presentar el estado actual de las Ciencias Aeronáuticas. Si bien yo no tuve la fortuna de asistir a estas conferencias, sí pude conocer estas contribuciones gracias a que fueron oportunamente recogidas en publicaciones del INTA. Todavía recuerdo el impacto que, siendo estudiante, me produjo la monografía de D. Julio Rey Pastor: *Los problemas Lineales de la Física*, que recogía un ciclo de sus conferencias en el INTA. La dotación de revistas científicas de la biblioteca del INTA, excepcional en su época, era buen exponente de las inquietudes del equipo que dirigía el Instituto. Otra de las preocupaciones del equipo directivo del INTA en aquella época, que tuvo un gran impacto posterior, es recogida con orgullo por D. Felipe Lafita, en su Discurso de Ingreso, cuando habla de *"los que hemos tenido la suerte de haber enviado a jóvenes de distintas especialidades técnicas o universitarias a Universidades extranjeras, con objeto de ampliar estudios"*.

Quiero aprovechar esta ocasión solemne para dar testimonio público de mi agradecimiento a D. Felipe Lafita Babío por el papel esencial que jugó, junto con D. Esteban Terradas y D. Antonio Pérez Marín, en elevar el nivel científico de la actividad aeronáutica de nuestro país. D. Felipe Lafita no sólo trabajó infatigablemente para resolver los problemas diarios de nuestra Tecnología Aeronáutica, sino que dedicó un gran esfuerzo para asegurar que las instituciones que dirigía estuviesen preparadas para resolver los problemas del futuro. Esta tarea, dedicada a crear un entorno que facilitase e hiciese eficaz el trabajo de los que se incorporasen posteriormente a la Ingeniería Aeronáutica, podía no tener frutos inmediatos. Un buen exponente de la preocupación por el futuro del triunvirato que dirigió el INTA es el casi millón de árboles que mandaron plantar en sus terrenos.

\* \* \*

Yo que no pude ser, como lo fué Gregorio Millán, testigo directo de la década prodigiosa de Terradas y Lafita en el INTA y en la Escuela, sí me beneficié de sus frutos. Si yo he tenido méritos, éstos han sido añadir a mi interés y vocación temprana por el estudio un optimismo que me ha llevado a valorar positivamente las instituciones y personas con las que me he encontrado. Yo llegué con optimismo a la Escuela de Ingenieros Aeronáuticos y posteriormente al INTA donde me encontré con profesores para mí excepcionales, entre otras cosas, por la fé y el cariño con que acogían a los jóvenes ilusionados. Cuando seguí el curso de Mecánica de Fluidos ofrecido por Gregorio Millán, quedé pronto deslumbrado ante la variedad de problemas no lineales que se presentaban en la descripción de los flujos y la belleza y originalidad de las técnicas empleadas para resolverlos. Tuve la fortuna de ser atraído pronto a la investigación; primero de la mano de Manuel Sendagorta, y después, a partir de mi tercer año de carrera, trabajando como becario en el Grupo de Combustión del INTA bajo la dirección de Gregorio Millán.

El Grupo de Combustión del INTA tiene su origen en el fructífero

período de colaboración entre Gregorio Millán y el Profesor Teodoro Von Karman del Instituto Tecnológico de California. Esta colaboración se inició cuando Von Karman vino al INTA en 1946, invitado por D. Esteban Terradas, a desarrollar un ciclo de conferencias sobre los problemas avanzados de la Aerodinámica. En aquella época Von Karman que, junto con Prandtl y Taylor había hecho las contribuciones más importantes de este siglo a la Mecánica de Fluidos, estaba preocupado por los problemas de combustión que se presentaban en el diseño de los motores cohete y de reacción; éstos debían ser abordados entonces mediante técnicas de tipo empírico. Comprendiendo el papel que jugaba la Dinámica de Fluidos en los procesos de combustión inició, con la colaboración de Gregorio Millán y del Profesor Penner del Caltech, un programa para crear la base teórica que, reuniendo leyes de la Termodinámica, Cinética Química y Mecánica de Fluidos, permitiese fundamentar la Teoría de la Combustión. El fruto de este programa fué expuesto en un Curso sobre Combustión desarrollado por Von Karman, con la colaboración de Millán, en la Sorbona en 1951, y tuvo un impacto catalizador de la actividad teórica posterior en Combustión. Esta nueva disciplina fué bautizada con el nombre de Aerotermodinámica por el papel que la Dinámica de Gases jugaba en esta teoría.

Por sugerencia de Von Karman, la Oficina de Investigación Científica de las Fuerzas Aéreas Americanas (AFOSR) creó una rama en Europa para apoyar estudios básicos llevados a cabo por investigadores europeos distinguidos. Ofrecieron a Gregorio Millán el segundo de los contratos para completar y actualizar las conferencias de la Sorbona. Esta tarea, llevada a cabo en un periodo de fuerte expansión de la investigación en Combustión, no terminó hasta 1956. Gregorio Millán, al recabar para esta labor la ayuda de un grupo de colaboradores (Carlos Sánchez Tarifa, J. Manuel Sendagorta, Ignacio Da Riva, Pedro Pérez del Notario y F. García Moreno, entre otros), formó el Grupo de Combustión del INTA, que hizo también importantes contribuciones durante este periodo. Cuando en 1956 se publicó en el INTA, como Informe AFOSR, la *Aerothermochemistry*, ésta

la primera monografía en la que la Combustión aparecía enmarcada de un modo coherente en la Mecánica de Fluidos. La *Aerothermochemistry* tuvo una gran difusión e impacto en las Universidades y Laboratorios de Combustión; siendo en su tiempo la exposición más general de la Dinámica de Fluidos Reactivos.

El trabajo fructífero de colaboración de Gregorio Millán con el Profesor Von Karman, unido a las aportaciones que él y su equipo hicieron al análisis experimental y teórico de los procesos de Combustión, sirvió para hacer sentir por primera vez la presencia activa española en los foros internacionales de la Mecánica de Fluidos. El nuevo clima así creado se tradujo en que, por ejemplo, el 1<sup>er</sup> Congreso Internacional de Ciencias Aeronáuticas, que presidió Teodoro Von Karman, se celebró en Madrid, en 1958. A este congreso acudieron, con contribuciones de carácter seminal, las personalidades más relevantes dedicadas a las Ciencias Aeronáuticas. Yo tuve la oportunidad de asistir a muchas de las sesiones, aunque debo confesar que como un oyente poco preparado, pero sí entusiasta. También sentí la emoción de hablar personalmente, siendo sólo un estudiante de Mecánica de Fluidos, con el Profesor Von Karman, a quien fué presentado por Gregorio Millán.

La presencia de la Ingeniería Aeronáutica Española en los foros internacionales sirvió también para que los graduados de nuestra Escuela tuviesen una acogida muy favorable para su trabajo y formación en las mejores Universidades extranjeras. Este fué mi caso cuando, en 1962, pasé un año en el Departamento Aeronáutico del Instituto Tecnológico de California (CALTECH). Este es un centro de excelencia, donde fuí acogido cariñosamente por algunos de los que han hecho las contribuciones más importantes a la Mecánica de Fluidos y, también, al desarrollo de las técnicas, de tipo asintótico, de la Matemática Aplicada, que han resultado ser tan útiles para el tratamiento de problemas no lineales. El apoyo que recibí por parte de estos profesores en esta etapa de mi formación ha sido inestimable para mí, como también lo ha sido para los

alumnos nuestros acogidos en el CALTECH para completar su formación como investigadores.

En el mismo año de 1958 tuve la ocasión de seguir un ciclo de conferencias sobre Fluidodinámica de la Combustión, a cargo de los miembros del Grupo de Combustión y algunos conferenciantes invitados, donde se hizo una exposición de los temas recogidos en la monografía *Aerothermochemistry*. Estas actividades tuvieron una gran influencia en mi vocación y futuro profesional, marcados de un modo especial por mi incorporación como Becario en 1958 al Grupo de Combustión del INTA, lo que me brindó la oportunidad de iniciar mi formación investigadora en Combustión, bajo la dirección de Gregorio Millán. Dado que mi actividad ha estado dedicada, desde entonces, a la enseñanza e investigación en Mecánica de Fluidos y en especial al análisis de los procesos de combustión, he elegido como tema de mi Discurso: *El Papel de la Mecánica de Fluidos en los Procesos de Combustión*.

\* \* \*

La combustión es una reacción exotérmica, que tiene lugar generalmente en fase gaseosa, entre un combustible y un oxidante, a menudo el oxígeno del aire. Las reacciones químicas son resultado de las colisiones "inelásticas" entre las moléculas de los reactantes, por lo que han de mezclarse íntimamente antes de la reacción.

El combustible suele estar inicialmente en fase sólida o líquida, por lo que la reacción con el oxígeno debe ir precedida por la gasificación o vaporización del combustible. La vaporización de los combustibles ocurre después de que la atomización de los chorros líquidos inyectados genere chorros multifásicos de gotas de combustible en aire<sup>1</sup>.

<sup>1</sup>Véase, por ejemplo, M.M. Elkotb *Fuel atomization for spray modelling*. Progr. Energy and Combust. Sci. Vol 8, 61-91 (1982). Quiero citar aquí el excelente trabajo experimental llevado a cabo por J.C. Lasheras para analizar el mecanismo de vaporización explosiva de gotas multicomponentes o de emulsiones formadas añadiendo pequeñas cantidades de agua a

Este proceso de atomización es consecuencia de las inestabilidades hidrodinámicas, en las que son determinantes las fuerzas de tensión superficial y las fuerzas aerodinámicas sobre el chorro. (Para valores altos de la presión de inyección se produce cavitación en el interior del inyector y ésta afecta de modo esencial la atomización posterior).

Después de la gasificación el combustible ha de mezclarse íntimamente (ésto es, a escala molecular) con el oxígeno, mediante el mecanismo de la difusión intensificado por la convección. La energía térmica generada por la reacción es transportada por convección, conducción y radiación desde la zona de reacción al resto del fluido.

El análisis de los procesos de combustión es pues de carácter multidisciplinar, no pudiendo hacerse sin el auxilio de la Cinética Química, la Termoquímica y la teoría que describe los fenómenos de transporte de calor y masa en el marco de la Mecánica de Fluidos<sup>2</sup>. Puesto que la Teoría de los Fenómenos de Transporte de Calor y Masa y, especialmente, la Cinética Química sólo han tenido un desarrollo adecuado en este siglo, la Teoría de la Combustión tampoco ha podido desarrollarse antes, como disciplina científica de carácter aplicado.

A pesar de ello, los conocimientos empíricos que tiene el hombre sobre la combustión se remontan a medio millón de años en la Historia; el

combustibles líquidos pesados. Este trabajo está recogido en su Tesis doctoral en la Universidad de Princeton y en diversas publicaciones; ver, por ejemplo, J.C. Lasheras, C. Fernández-Pello y F.L. Dryer, *On the disruptive burning of free droplets of alcohol/n-paraffin solutions and emulsions* 18th Symp. (Int) on Combustion 293-305, The Combustion Institute (1981). La estabilidad del proceso de gasificación de gotas monoccomponentes fué estudiada por F. Higuera en su Tesis doctoral en nuestra Escuela; el estudio mostró cómo los efectos de Marangoni son los agentes estabilizadores del proceso.

<sup>2</sup>Véase el *Discurso de Ingreso* de Gregorio Millán en esta Academia (1.975) y F.A. Williams *Combustion Theory* 2nd. edition. Benjamin Cummings 1985. Más adelante en el texto de este Discurso el lector encontrará un resumen de las ecuaciones de la Dinámica de Fluidos Reactivos y más información bibliográfica.

uso por el hombre de la combustión para calentarse y cocinar los alimentos precede a la historia escrita. El desarrollo de hornos y hogares es más reciente, pero de origen oscuro, como lo es el de las armas de fuego y cohetes pirotécnicos. Las aplicaciones de la combustión jugaron un papel determinante en la revolución industrial. Cuando Otto construyó su motor de combustión interna en 1876 no se conocían los principios de la propagación de llamas. Los conocimientos teóricos no fueron imprescindibles tampoco para el desarrollo inicial del motor Diesel en 1892. Los desarrollos iniciales de las turbinas de gas, motores de reacción y motores cohete se hicieron también de un modo semi-empírico.

Sin embargo, el conocimiento de los procesos de combustión es esencial para un diseño adecuado de todos estos sistemas; y éste es ineludible dado el enorme impacto económico y ambiental de los mismos. Aunque nuestro conocimiento de los procesos de combustión estuvo limitado hasta 1950 por la falta de una formulación general de los mismos, esto no impidió el desarrollo de muchos de los conceptos e ideas imprescindibles para describir estos procesos. Nuestro conocimiento de los mismos se encuentra en un periodo de crecimiento espectacular por varios motivos:

En primer lugar, los progresos recientes en técnicas de diagnosis de tipo Láser han venido a revolucionar tanto los procedimientos de visualización como los de velocimetría y medición de concentraciones y temperaturas<sup>3</sup>. En segundo lugar, es difícil comprender cómo podría analizarse la ingente masa de datos experimentales que proporcionan estos

<sup>3</sup>Véase: W. Merzkirch *Techniques of flow visualization* AGARDograph No. 302 (1987). A. Eckbreth, P.A. Bonczyk y J.F. Verdieck. *Combustion diagnostics for Laser and Raman fluorescence*. Prog. Energy Combust. Sci. Vol.5, 253-322 (1979); S.S. Penner, C.P. Wang y M.Y. Bahadori *Laser diagnostics applied to combustion systems* 20th Symp. (Int) on Combustion pg 1149-1176, The Combustion Institute (1984); R.K. Hanson *Combustion diagnostics: Planar imaging techniques* 21st. Symp. (Int) on Combustion pg. 1677-1691, The Combustion Institute (1986).

sistemas, si no se dispusiese de los potentes ordenadores actuales para el tratamiento e interpretación de los mismos, una vez digitalizados. Y, en tercer lugar, este tratamiento puede hacerse eficazmente porque, paralelamente, se han desarrollado y se están desarrollando las técnicas analíticas que permiten reconocer las estructuras que caracterizan el proceso; este desarrollo viene facilitado para las enormes posibilidades que ofrecen los ordenadores para la simulación numérica de los procesos.

\* \* \*

El análisis de los procesos de combustión puede hacerse en el marco de la Dinámica de Fluidos, como medios continuos, por ser, en la mayoría de las aplicaciones, la longitud característica,  $L$ , del flujo muy grande frente al camino libre medio,  $\lambda$ , entre colisiones de una molécula. Este tratamiento continuo es posible porque, además, el tiempo entre colisiones elásticas,  $t_\lambda$ , es pequeño frente al tiempo característico del movimiento,  $t_m$ . Las colisiones entre las moléculas son entonces tan frecuentes que dominan el estado local del fluido, llevándolo a un estado muy próximo al del equilibrio termodinámico local, caracterizado por un número reducido de magnitudes fluidas. Las pequeñas variaciones espaciales de estas magnitudes, observadas por una molécula en su recorrido entre colisiones, son responsables de los efectos de no equilibrio termodinámico global; éstos aparecen representados por las velocidades de difusión, flujos de calor y esfuerzos viscosos.

El tratamiento de los procesos de combustión se simplifica porque las colisiones inelásticas que conducen a las reacciones químicas son muy poco frecuentes frente a las colisiones elásticas. Es decir, los tiempos característicos  $t_q$  de las reacciones químicas son muy grandes frente al tiempo  $t_\lambda$  entre colisiones; por ello el equilibrio termodinámico local, establecido por las colisiones elásticas, es el que corresponde a mezclas no reactivas. Los efectos de las reacciones químicas darán lugar a un desplazamiento lento de este equilibrio termodinámico local, que puede conducir o no al equilibrio termodinámico completo, dependiendo del

valor, grande o pequeño, del número de Damköhler. Este número es la relación  $t_m/t_q$  entre el tiempo característico mecánico del movimiento y el tiempo característico de las reacciones químicas. El estado del fluido, en el límite continuo, está bien descrito por el campo de velocidades  $v$ , energía interna específica  $e$ , y densidad de  $\rho_\alpha$  de cada una de las especies moleculares que componen la mezcla reactiva. Es de esperar que estas magnitudes sean funciones de las coordenadas espaciales y del tiempo, con derivadas temporales y espaciales de todos los órdenes, continuas en cada fase fluida.

Las ecuaciones que permiten calcular la evolución temporal y dependencia espacial de estas magnitudes son las leyes de conservación de la masa para cada una de las especies, de la cantidad de movimiento y de la energía. Por no existir equilibrio termodinámico global ni equilibrio químico local, deben incluirse las contribuciones de las reacciones químicas y de la difusión en las ecuaciones de conservación de la masa de cada una de las componentes; así mismo, han de incluirse los esfuerzos viscosos y los flujos de calor en las ecuaciones de la cantidad de movimiento y energía. La Teoría Cinética de Gases nos muestra que las velocidades de difusión son proporcionales a los gradientes de las fracciones másicas de las especies que componen la mezcla, que los flujos de calor están determinados por los gradientes de temperatura y que los esfuerzos viscosos son proporcionales a los gradientes de velocidad. Los coeficientes de proporcionalidad que aparecen en estas leyes constitutivas incluyen los coeficientes de difusión, de conductividad térmica y de viscosidad, funciones del estado termodinámico local.

La aparición de la presión, junto a los esfuerzos viscosos, en las ecuaciones de conservación y la presencia de la temperatura en la ley de Fourier, que determina los flujos de calor, obliga a añadir a las ecuaciones de conservación anteriores las ecuaciones de estado, que aporta la Termodinámica o la Mecánica Estadística de mezclas no reactivas. Estas ecuaciones de estado relacionan todas las variables

termodinámicas que encontremos con un conjunto independiente de ellas, tal como el formado por la presión, temperatura y fracciones másicas. También hemos de añadir, para completar el sistema de ecuaciones, las expresiones que, en función del estado termodinámico local, nos proporciona la Cinética Química para la tasa de producción másica de cada especie debida a las reacciones químicas.

El sistema de ecuaciones resultante es un sistema de ecuaciones no lineales de tipo parabólico. En éstas aparecen derivadas primeras temporales, que representan la acumulación local de masa cantidad de movimiento y energía, términos proporcionales a la velocidad local del fluido y a los gradientes espaciales de la magnitudes fluidas, que representan los efectos del transporte convectivo (o advectivo) y, por último, términos con derivadas segundas espaciales de las fracciones másicas, velocidad y temperatura, que representan los efectos de la difusión de masa, de cantidad de movimiento y de energía térmica. El carácter parabólico de este sistema de ecuaciones refleja el carácter irreversible de la dinámica de fluidos reactantes. Como consecuencia, el conjunto de ecuaciones resultante determina la evolución del fluido para  $t > 0$ , si se conocen los valores iniciales de su velocidad y de sus variables termodinámicas. Las condiciones de contorno, en la interfase con otra fase fluida o con otros sólidos, resultan de la hipótesis de equilibrio termodinámico local y de las leyes de conservación de masa, cantidad de movimiento y energía a través de la interfase; en estas condiciones de transmisión han de incluirse los efectos de las reacciones superficiales y cambios de fase, consecuencia de la no existencia de equilibrio químico ni termodinámico global.

\* \* \*

Las principales dificultades del análisis teórico de los procesos de combustión están ligadas, en primer lugar, a nuestro conocimiento parcial de la cinética de las reacciones químicas, tanto de los mecanismos o reacciones elementales involucradas como de los valores de las constantes

de reacción; en segundo lugar, al carácter tan complejo y no lineal del sistema de ecuaciones de conservación que describen los procesos; y, por último, al carácter turbulento de los flujos que encontramos en estos sistemas de combustión.

Para dar una muestra de la complejidad de la cinética de las reacciones químicas, basta señalar que en la descripción detallada de la reacción con el aire de un hidrocarburo como el n-heptano es necesario tener en cuenta la presencia de unas 500 especies intermedias. El mecanismo de las reacciones elementales correspondiente a las colisiones reactivas entre estas especies contiene más de 1.500 reacciones. Los mecanismos detallados de reacción son distintos para cada hidrocarburo, aunque tengan en común la mayoría de las especies y de las reacciones elementales. Hoy día se está aprovechando muy eficazmente la potencia de los ordenadores actuales para la generación semi-automática de los mecanismos de reacción y para la estimación de las constantes de reacción<sup>4</sup>.

Afortunadamente los tiempos característicos asociados a las distintas reacciones elementales son muy dispares y muchas de estas reacciones pueden eliminarse por no producir efectos significativos. La gran mayoría de las especies intermedias son tan reactivas que su concentración mantiene un valor muy pequeño, resultante del balance entre su producción y su consumo, sin efecto apreciable de los fenómenos de transporte. Mediante esta hipótesis de estado estacionario, justificada por la gran disparidad de las escalas temporales de las reacciones, es posible simplificar considerablemente los esquemas cinéticos. La simplificación depende mucho del objetivo del análisis; por ejemplo, si éste va dirigido a la descripción de los procesos de ignición y propagación de llamas o si nos preocupa la producción de hollín ó

<sup>4</sup>Ver J. Warnatz *Combustion Chemistry* (W.C. Gardiner, editor) pgs. 197-360, Springer (1984).

contaminantes.

Un mecanismo simplificado de 20 reacciones, basta frecuentemente para describir adecuadamente la combustión de un hidrocarburo en condiciones muy diversas de presión, temperatura y riqueza de la mezcla reactiva local. Estas reacciones se seleccionan, con ayuda de ordenadores, haciendo estudios de la sensibilidad de algunos procesos básicos de combustión ante cambios en las constantes de las reacciones elementales. La gran sensibilidad de las velocidades de reacción con la temperatura permite una simplificación adicional del esquema cinético cuando se conoce con cierta aproximación el rango de temperaturas y presiones a que tendrá lugar la reacción. De nuevo, esta simplificación se basa en la disparidad de escalas temporales de las reacciones y puede resultar en un esquema cinético de una a cuatro reacciones globales<sup>5</sup>.

El uso de esquemas cinéticos simplificados tiene una larga historia en la Teoría de la Combustión. Sin embargo, hasta ahora, éstos se obtenían por consideraciones de tipo fenomenológico, buscando correlacionar los resultados experimentales con un número reducido de reacciones globales, en tanto que hoy día se obtienen de un modo más sistemático, arrancando del esquema cinético real.

\* \* \*

Lo que distingue a unos flujos de otros son las condiciones iniciales y de contorno. De estas condiciones podemos extraer las escalas básicas del flujo. Estas son, entre otras, la longitud característica,  $L$ , del movimiento, el tiempo característico,  $t_0$ , de variación de las condiciones de contorno y la velocidad característica,  $U$ . Además hay otras escalas características del estado del fluido que manejamos; éstas vienen dadas, por ejemplo, por los valores típicos de su densidad y

<sup>5</sup>Ver, por ejemplo, G. Paczko, P.M. Lefdal y N. Peters, *Reduced schemes for methane, methanol and propane flames*. 21st Symp. (Int) on Combustion, pg 739-748 (1986).

temperatura, de la viscosidad cinemática  $\nu$ , de la difusividad térmica  $D_T$  y de la difusividad másica  $D_\alpha$  de cada una de las especies. Así mismo, encontraremos los tiempos  $t_q$ , característicos de las distintas reacciones químicas elementales o globales, evaluados a la temperatura de referencia y con los valores característicos de las fracciones másicas de las distintas especies fluidas.

Los parámetros adimensionales formados con estas escalas son los que determinan la estructura del flujo, como señalaba claramente Gregorio Millán en su Discurso de Ingreso. La igualdad de los parámetros adimensionales en dos flujos se traduce en su semejanza dinámica, que es la base de la experimentación con modelos, en la que se busca la semejanza parcial si no es posible la total.

Aprovecho esta oportunidad para rendir aquí homenaje a D. Julio Palacios, cuyo centenario celebraremos pronto. D. Julio Palacios hizo contribuciones muy importantes al Análisis Dimensional, entre las que quiero resaltar su descubrimiento de la conveniencia de utilizar escalas de longitud distintas para las distintas direcciones en la descripción de flujos o fenómenos de carácter marcadamente anisótropo. D. Julio Palacios introdujo en nuestra Escuela de Ingenieros Aeronáuticos la preocupación por la formulación de nuestros problemas en forma adimensional. Nos enseñó también a hacer uso del análisis dimensional (en definitiva de las propiedades de simetría de las ecuaciones involucradas) para simplificar la solución de los problemas.

Los parámetros adimensionales miden la importancia relativa de los distintos términos o mecanismos físicos en las ecuaciones y frecuentemente toman valores grandes o pequeños frente a la unidad; de ahí la conveniencia del análisis asintótico que permita simplificar la descripción del flujo. Sin hacer una relación completa de los parámetros adimensionales que determinan los flujos reactivos, citaremos aquí, por su importancia, los números de Strouhal, Mach, Froude, Damköler y Reynolds.

El número de Strouhal es la relación  $LUt_0$  entre el tiempo de residencia (invertido por una partícula en recorrer el campo fluido) y el tiempo de variación de las condiciones de contorno. Cuando este número es pequeño frente a la unidad, el flujo puede tratarse como casi-estacionario. Cuando el flujo es sometido a excitaciones de alta frecuencia, los números de Strouhal pueden ser muy altos y el flujo tiene una respuesta de tipo acústico. El número de Mach es la relación entre la velocidad del fluido y la velocidad del sonido, y su cuadrado es la relación entre la energía cinética y térmica. Con frecuencia el número de Mach es pequeño en los procesos de combustión, lo que se traduce en simplificaciones importantes en la descripción del flujo.

El número de Froude es la relación  $U^2/Lg$  entre la aceleración típica del fluido y la aceleración gravitatoria. Cuando es de orden unidad o pequeño, en el proceso de combustión el movimiento inducido por las fuerzas gravitatorias juega un papel importante. Los efectos gravitatorios determinan el carácter de muchos procesos de combustión<sup>6</sup>, en tanto que en otros las fuerzas gravitatorias juegan un papel despreciable. No es posible, sin embargo facilitar la simulación experimental de estos últimos utilizando velocidades más pequeñas y longitudes más grandes pues, entonces, los efectos gravitatorios se harían importantes.

En nuestra Escuela hay un programa importante dirigido por D. Ignacio Da Riva para aprovechar las oportunidades que ofrecen los laboratorios espaciales para la simulación de flujos, utilizando escalas

<sup>6</sup>Este es el caso de los fuegos. Ver, por ejemplo, F.A. Williams *Urban and wildfire fire phenomenology*. Prog. Energy Combust. Sci. Vol. 8, 317-354 (1982). La propagación de llamas sobre combustibles sólidos y líquidos está también muy influida por los efectos gravitatorios; ver a este respecto el trabajo de exposición y reseña *Controlling mechanisms of flame spread*. Comb. Sci. and Techn. Vol. 32, 1-32 (1983), escrito por el Ingeniero Aeronáutico español C. Fernández Pello (hoy profesor en la Universidad de Berkeley) y T. Hirano.

imposibles de alcanzar en tierra, porque con ellas los flujos aparecerían distorsionados por los efectos gravitatorios. Mediante estas investigaciones se trata, además, de establecer la posibilidad de crecimiento de macrocristales en condiciones de microgravedad. Paralelamente, existe en nuestra Escuela un programa, dirigido por D. Carlos Sánchez Tarifa y en el que yo colaboro, dedicado al análisis experimental y teórico de la propagación de fuegos, en las condiciones de gravedad reducida que se consiguen en los vuelos parabólicos de la NASA y de la Agencia Europea del Espacio. En un próximo futuro, estos experimentos se realizarán en cohetes de sondeo, donde los tiempos de observación pasan de los 20 segundos de los aviones a varios minutos y los niveles de gravedad residual efectiva se reducen considerablemente.

\* \* \*

El número de Damköhler de las reacciones químicas es la relación entre el tiempo mecánico y el tiempo químico; cuando es muy pequeño frente a la unidad, los reactantes evolucionan y se mezclan como si la reacción química estuviese congelada. En el caso límite opuesto, en que el número de Damköhler es muy grande para todas las reacciones, la evolución del flujo tiene lugar sin desviaciones significativas del equilibrio químico local.

En muchos casos es aceptable modelar el mecanismo de reacción mediante una reacción global irreversible entre el combustible y el oxígeno. La masa de oxidante consumida, la masa de productos generados y el calor liberado en la reacción, son todos ellos proporcionales a la masa de combustible consumida por unidad de volumen y tiempo. Esta es proporcional al producto de las concentraciones del combustible y del oxígeno, teniendo como exponentes los órdenes respectivos de la reacción global. La constante de proporcionalidad incluye el bien conocido factor exponencial de Arrhenius, cuya variación con la temperatura es tanto más fuerte cuanto mayor sea, frente a la energía térmica, la energía de activación de la reacción global. Es este factor el que refleja el hecho

de que solamente en una fracción de las colisiones la energía aportada por las moléculas es superior a la energía necesaria para la rotura de los enlaces químicos.

Cuando en un proceso de mezcla y combustión las reacciones químicas pueden modelarse mediante una reacción global irreversible entre el combustible y el oxidante, con una velocidad de reacción tan alta que el número de Damköhler es grande frente a la unidad, es posible hacer una descripción asintótica del mismo, considerando la reacción química infinitamente rápida como primera aproximación. Burke y Schumann<sup>7</sup> introdujeron en 1928 esta descripción asintótica para el análisis de los sistemas de combustión en los que los reactantes no están inicialmente mezclados. Comprendieron que en el caso límite en que se supone infinitamente rápida la reacción química el combustible y el oxidante no pueden coexistir en el campo fluido; éstos aparecen separados por una capa de reacción infinitamente delgada o superficie de llama. A ésta llegan los reactantes, en proporciones estequiométricas, transportados por difusión a través de los productos, desde ambos lados de la superficie de reacción. El calor liberado por la combustión en la superficie de llama es transportado por conducción a ambos lados de la misma.

Según la descripción asintótica de Burke y Schumann, la reacción tiene lugar en la superficie de la llama, con un valor infinitamente pequeño de la concentración de los reactantes, a un ritmo infinitamente rápido que impide el paso de los reactantes a través de la misma. En esta descripción asintótica, correspondiente al caso límite en que el número de Damköhler es infinito, la reacción resulta controlada por la difusión; en el proceso intervienen las características termoquímicas de la reacción global pero no la cinética química, como es obvio. El problema

<sup>7</sup>S.P. Burke y T.E.W. Schumann: *Diffusion flames* Ind. Eng. Chem. 20, 998-1004 (1928).

de la descripción de las llamas controladas por la difusión es, por lo tanto, un problema fluidodinámico en el que juegan un papel esencial los fenómenos de transporte de calor y masa. En el problema matemático resultante aparece la posición de la superficie de llama como incógnita, al igual que la intensidad de los sumideros de reactantes y fuentes de calor y productos, que estando localizados en la superficie, son proporcionales a la masa de combustible consumida por unidad de superficie y tiempo en la llama.

La solución de este problema de frontera libre se simplifica considerablemente cuando las difusividades másicas de las distintas especies pueden suponerse iguales a la difusividad térmica. Aunque este caso no se da con carácter general, ni siquiera para los procesos en fase gaseosa, esta hipótesis de equidifusión ha sido utilizada ampliamente en el análisis de las llamas de difusión. Conduce a un valor de la temperatura en la llama que, excepto en las proximidades del inyector, es igual a la llamada temperatura de llama adiabática, la cual excede a la temperatura inicial de los reactantes en una cantidad proporcional a la energía liberada en la reacción. La temperatura de la llama es inferior a la de la llama adiabática cuando la difusividad de los reactantes es inferior a la difusividad térmica y es superior en caso contrario. He incluido, más adelante, en este texto un esbozo del procedimiento a emplear para analizar las llamas de difusión cuando las difusividades másicas y térmicas no son iguales.

\* \* \*

Mi primera tarea de investigación con Gregorio Millán consistió en examinar el papel de la cinética de la reacción en la estructura de las llamas de difusión, tratando de encontrar un criterio preciso para la validez de la hipótesis de Burke-Schumann en el análisis de las mismas. Este trabajo sería paralelo al análisis teórico y experimental de la combustión de gotas en aire que llevaban a cabo Sánchez Tarifa y colaboradores; este análisis había mostrado cómo era aceptable utilizar

la hipótesis de Burke-Schumann cuando el diámetro de las gotas o la presión en la cámara excedían en valor crítico, pero no en el caso contrario, pues se producía la extinción de la llama. Gregorio Millán había hecho la formulación, como caso prototipo, del problema de la mezcla y combustión simultánea de dos corrientes paralelas, con la misma velocidad, una de un combustible gaseoso y la otra de aire. El análisis debía mostrar, para los valores altos de la velocidad que considerábamos, una transición de un proceso de mezcla sin efectos importantes de la reacción, en la zona inicial de mezcla, a una estructura, del tipo Burke-Schumann para la combustión controlada por la difusión, que encontraríamos aguas abajo.

En el problema parabólico que analizábamos, la longitud característica, en el sentido longitudinal, resultaba de multiplicar por la velocidad el tiempo característico de reacción a la temperatura inicial de los reactantes; la longitud característica transversal era la alcanzada por la difusión en el mismo tiempo. Al escribir el problema en forma adimensional, utilizando estas escalas, quedaba eliminado el número de Damköhler que caracteriza la importancia de los efectos de la reacción. Al no existir parámetros grandes o pequeños en el sistema no lineal de ecuaciones en derivadas parciales resultante, si deseábamos describir la estructura que buscábamos de la transición hacia la solución de Burke-Schumann, no nos quedaba otra alternativa que obtener la solución mediante integración numérica de las ecuaciones. A esta tarea dediqué, debo confesar que con poco éxito, una fracción apreciable de mi tiempo durante un año entero, antes de que, con la llegada del primer ordenador a la Junta de Energía Nuclear, tuviésemos la oportunidad de resolver satisfactoriamente el problema.

El análisis numérico había sido completado antes con un análisis asintótico de la solución, de tipo local, para valores pequeños de la coordenada adimensional que medía las distancias a la placa separadora. También llevamos a cabo otro análisis asintótico para valores grandes de

la misma coordenada, el cual justificaba el tratamiento de Burke y Schumann en esta región. Este último análisis fué generalizado posteriormente para describir la estructura asintótica de las llamas de difusión para valores altos del número de Damköhler. El procedimiento utilizado consistió en adaptar a este problema las ideas introducidas por Prandtl para su Teoría de la Capa Límite<sup>8</sup>. Cuando el tiempo químico es pequeño frente al tiempo de mezcla, el campo fluido aparece dividido en dos regiones: Una región, que llamaremos exterior, donde el flujo aparece bien descrito por el análisis de Burke y Schumann (de velocidad de reacción infinita) y otra región, interior, en forma de capa delgada de reacción en torno a la superficie de llama de Burke-Schumann. En esta capa los efectos de la reacción química aparecen compensados por la difusión de masa y calor en la dirección normal a la llama. El espesor de la capa de reacción (que entonces bautizamos como capa límite química) es tanto más delgado cuanto mayor es el número de Damköhler.

Así pues, el análisis asintótico que reconoce la disparidad de las escalas de las dos regiones, conduce a una simplificación notable de las ecuaciones de partida, diferente para las dos regiones. Las condiciones de contorno, que debemos utilizar para completar estas ecuaciones simplificadas, deben asegurar el acoplamiento de las soluciones en una región, intermedia, de validez común de las ecuaciones. La solución del problema interno nos describe la estructura de la capa de reacción; es decir, la forma en que se produce la interdifusión entre los reactantes y cómo se elimina por conducción el calor generado. Las discontinuidades que, en la solución de Burke-Schumann, presentan los gradientes de temperatura y concentración en la llama (las cuales reflejan el carácter de delta de Dirac de los términos de reacción química en el límite de

<sup>8</sup>L. Prandtl *Über flüssigkeiten bei sehr kleiner reibung*. Verh III Internat. Math Kongr. Heidelberg pg. 484-491, (1905). Traducción inglesa NACA Tech. Memo. No. 452, (1928).

velocidad de reacción infinita) aparecen suavizados en este análisis asintótico, en que se suponen grandes pero finitos los valores del número de Damköhler.

El método utilizado en nuestro análisis de la estructura interna de las llamas de difusión, para valores grandes del número de Damköhler, fué resultado, como decía antes, de la adaptación al problema de las ideas de la Teoría de la Capa Límite. A mediados de los años 50, en el Instituto Tecnológico de California, Kaplun, Lagerstrom y Cole, generalizaron el método de la capa límite para tratar, mediante técnicas de perturbaciones de tipo formal, una variedad muy amplia de problemas de perturbaciones singulares<sup>9</sup>.

Después de hecha la formulación adimensional de un problema físico, encontramos parámetros adimensionales que, frecuentemente, toman valores grandes o pequeños frente a la unidad en los casos prácticos que queremos analizar. Al físico o al ingeniero le interesa conocer la forma de la dependencia de la solución respecto a  $\epsilon$ , valor del parámetro pequeño (o del inverso del parámetro grande). En una gran mayoría de los casos prácticos de interés en la Física, la dependencia de la solución respecto  $\epsilon$  no es analítica en todo el campo espacial o intervalo temporal de interés, lo que da un carácter singular al problema de determinar esa dependencia. El método de los desarrollos asintóticos acoplados fué desarrollado (valga la redundancia) por Kaplun, Lagerstrom y Cole para tratar este tipo de problemas. El método arranca del convencimiento de que es posible y conveniente dividir el dominio físico espacial en regiones y el temporal en etapas para simplificar el análisis, de modo diferente en cada una de ellas. Se escriben las ecuaciones en forma distinta para cada región y etapa, utilizando como variables

<sup>9</sup>Véase M.D. Van Dyke *Perturbation Methods in Fluid Mechanics*. Academic Press (1964) y Parabolic Press (1975). S. Kaplun *Fluid Mechanics and Singular Perturbations*. Academic Press (1967). J. Kevorkian y J.D. Cole *Perturbation Methods in Applied Mathematics* Springer (1981).

independientes las coordenadas espaciales y el tiempo medidos con las escalas, dependientes de  $\epsilon$ , que caracterizan su extensión. A continuación se busca la solución, en forma de desarrollos asintóticos en el sentido de Poincaré, no necesariamente en potencias de  $\epsilon$ , distintos para cada región y etapa, al igual que las escalas usadas para las variables independientes. Las ecuaciones que describen la dependencia temporal y espacial de los distintos términos de los desarrollos se obtienen, por un procedimiento directo de tipo formal, a partir de las ecuaciones primitivas. Las condiciones de contorno e iniciales complementarias se obtienen al exigir la validez común de los desarrollos en regiones o etapas intermedias.

El método de los desarrollos asintóticos acoplados, no nació del vacío, muy al contrario, fué el resultado de buscar un marco coherente para ayudar a la intuición en el tratamiento de un tipo de problemas de perturbaciones singulares: los de tipo capa. Como es de esperar, este tipo de problemas se había encontrado a menudo en la Física e Ingeniería y en muchos casos se habían resuelto satisfactoriamente al obtener, con ayuda de intuiciones geniales, el primer término de los desarrollos asintóticos correspondientes<sup>10</sup>. Este fué el caso de la Teoría de la Capa Límite, desarrollada por Prandtl al plantearse el difícil problema de analizar la estructura de los flujos a altos números de Reynolds. Este trabajo seminal mostró el camino para el tratamiento asintótico de muchos de los problemas no lineales de la Mecánica de Fluidos, pero también en Física se han utilizado frecuentemente procedimientos análogos.

Debo advertir que existen otras muchas técnicas asintóticas para tratar problemas de perturbaciones, además de la técnica de los desarrollos asintóticos acoplados; entre ellas, la aportada por Laplace

<sup>10</sup>Ver la interesante exposición de K.O. Friedrichs *Asymptotic phenomena in Mathematical Physics* Bull. Amer. Math. Soc. Vol. 61, 485-504, (1955) para una reseña histórica del uso y desarrollo de las técnicas asintóticas.

para el cálculo de integrales dependientes de modo singular de un parámetro grande y las técnicas de perturbaciones introducidas por Poincaré para el análisis de la dinámica de los cuerpos celestes. Remitiendo al libro de Bender y Orzag<sup>11</sup> para una excelente introducción a estas técnicas, no quiero dejar de mencionar aquí las técnicas de escalas múltiples. Estas han sido desarrolladas para el tratamiento de problemas de tipo oscilatorio, cuya amplitud o fase son lentamente variables.

Estos métodos de escalas múltiples han encontrado una aplicación muy importante en el desarrollo de las técnicas de homogeneización. Con estas técnicas se busca obtener las leyes constitutivas macroscópicas, a las que responden los medios que microscópicamente son heterogéneos<sup>12</sup>. Para obtener las leyes de comportamiento macroscópico se aprovecha la disparidad de las escalas microscópica y macroscópica. La técnica tiene muchos campos de aplicación entre los que citaré, como ejemplos, el comportamiento elástico de materiales compuestos o policristalinos y el flujo a través de medios porosos. Quiero señalar aquí, que una buena parte de las contribuciones más importantes al desarrollo y justificación matemática de estas técnicas de homogeneización se deben a Enrique Sánchez Palencia, quién fué alumno de la primera promoción a la que yo dí clase de Mecánica de Fluidos y hoy día es Profesor en el Instituto Poincaré de la Sorbona y Miembro Correspondiente de la Academia de Ciencias francesa.

\* \* \*

Volviendo al tema de los flujos reactivos, debo señalar que en la

<sup>11</sup>C.M. Bender y S.A. Orzag *Advanced Mathematical Methods for Scientists and Engineers*. McGraw-Hill (1978).

<sup>12</sup>A. Bensoussan, J.L. Lions y G. Papanicolaou, *Asymptotic Analysis for Periodic Structures*. North Holland (1978). E. Sánchez-Palencia *Non-homogeneous Media and Vibration Theory*. Springer (1980). También el libro editado por E. Sánchez-Palencia y A. Zaoui *Homogenization Techniques for Composite Media*. Springer (1987).

formulación adimensional de estos flujos intervienen otros parámetros importantes, además del primer parámetro de Damköhler antes citado. En la Teoría de la Combustión juegan un papel particularmente importante el segundo parámetro de Damköhler  $Q/RT_c$  y el parámetro de Arrhenius  $E/RT_c$ ; éstos se obtienen, respectivamente, al comparar con la energía térmica característica  $RT_c$  el calor  $Q$  liberado en la reacción por mol de combustible, y la energía  $E$  de activación de la reacción ( $R$  es la constante universal de los gases y  $T_c$  es una temperatura característica; por ejemplo, la temperatura inicial de uno de los reactantes).

El primer parámetro,  $Q/RT_c$ , que mide la exotermicidad de la reacción, tiene un valor moderadamente grande, por lo que la temperatura de los gases puede multiplicarse por un factor, típicamente de 5 a 10, cuando ocurre la combustión. (Esto significa pasar, por ejemplo, de un valor inicial de la temperatura  $T_c=300K$  a un valor  $T_f=2.000K$  de la misma en la llama) El segundo de los parámetros, la energía de activación adimensional que con signo menos coincide con el exponente de Arrhenius, mide la sensibilidad de la velocidad de reacción con la temperatura; este número es grande (20 es un valor típico) para las reacciones globales que encontramos en Combustión. Por ello, bastan incrementos de temperatura  $RT_c^2/E$ , por encima de  $T_c$ , que son muy pequeños frente a  $T_c$ , para multiplicar la velocidad de reacción por un factor  $e$ . Así pues en Combustión encontramos incrementos de temperatura  $(T_f-T_c)$ , desde las condiciones iniciales a las de la llama, muy grandes frente a la temperatura  $RT_c^2/E$ , de Frank-Kamenetski, basada en la temperatura inicial  $T_c$ . El cociente entre estas temperaturas ha recibido el nombre de Zel'dovich, como agradecimiento a sus importantes aportaciones a la Combustión<sup>13</sup>.

<sup>13</sup>Véanse algunas de estas contribuciones en la obra de Y.B. Zel'dovich, G.I. Barenblatt, V.B. Librovich y G.M. Makhviladze. *Mathematical Theory of Combustion and Explosion*. Consultants Bureau (1984).

La existencia en los procesos de combustión de capas delgadas de reacción y también de las ondas de combustión (deflagraciones y detonaciones) está asociada al valor grande del número de Zel'dovich  $(T_f-T_c)E/RT_c^2$ . Estas capas y ondas separan zonas de equilibrio químico de zonas en las que los reactantes se encuentran premezclados o mezclándose con las reacciones químicas congeladas. La solución que Gregorio Millán dió al problema del límite frío, que se presenta al plantear el problema matemático de la determinación de la estructura y velocidad de propagación de las ondas de combustión, se apoya en el valor alto del número de Zel'dovich. Muchos de los conceptos introducidos para la descripción de los procesos de combustión (como son los de ignición, extinción, explosiones térmicas, junto al de ondas de detonación y deflagración) están asociados al hecho de que la energía de activación es alta ( $E/RT_c \gg 1$ ) y que la reacción es exotérmica ( $Q/RT_c \geq 1$ ). Si se dan estas desigualdades, los tiempos químicos característicos (y con ellos los números de Damköhler) cambian en muchos órdenes de magnitud al pasar de las regiones frías de la cámara a las regiones en que, si es que se ha producido la reacción química, encontramos temperaturas altas.

En los últimos 20 años ha habido un crecimiento explosivo en el número de publicaciones en las que se tratan los procesos de combustión con técnicas asintóticas, basadas en los valores grandes del cociente entre la energía de activación y la energía térmica típica<sup>14</sup>. Estas técnicas fueron ya utilizadas ampliamente por Zel'dovich y su Escuela, aunque acompañadas a menudo por hipótesis que parecían dudosas, cuya justificación aparece hoy muy claramente, al examinarlas desde el punto de vista del método de los desarrollos asintóticos acoplados.

El lector encontrará más adelante en este texto algunos ejemplos de

<sup>14</sup>Véanse las obras ya citadas de Williams y de Zel'dovich y colaboradores y también J.D. Buckmaster y G.S.S. Ludford *Theory of Laminar Flames*. Cambridge University Press (1981)

cómo influyen los valores altos de las energías de activación de las reacciones en la estructura de los procesos de combustión; ahora sólo resumiremos los resultados. Así, por ejemplo, cuando observamos los flujos gaseosos reactivos en los que el combustible y el oxidante, no estando inicialmente mezclados, siguen una reacción global (exotérmica e irreversible) de energía de activación alta frente a la térmica, encontramos que: Por ser las reacciones exotérmicas, hay grandes diferencias de temperatura en el campo fluido. Por ser la reacción química tan sensible a la temperatura, el tiempo químico es muy grande frente al tiempo mecánico (generalmente el tiempo de residencia) en las regiones donde la temperatura es baja; ocurriendo lo contrario en las zonas de temperatura alta. Así pues, la reacción química está congelada en las zonas frías y hay equilibrio químico donde la temperatura es alta.

El equilibrio químico implica que uno u otro de los reactantes tiene concentración nula, puesto que ha sido previamente consumido por la reacción química. Esta ha tenido (o está teniendo) lugar en capas delgadas de reacción en forma de *llamas premezcladas* ricas o pobres y, en ciertos casos, *ondas de detonación*, cuando separan zonas de flujo congelado de zonas de equilibrio químico (sin oxidante o sin combustible). La reacción tiene lugar en las capas delgadas que designamos como *llamas de difusión*, cuando separan una zona de equilibrio sin oxidante de una zona de equilibrio sin combustible. El espesor de la capa de reacción en las llamas premezcladas es pequeño frente a la longitud característica del proceso; esto es así, porque las variaciones de temperatura en la capa de reacción no pueden superar apreciablemente el valor de Frank-Kamenetski,  $RT_c^2/E$ , sin que la reacción se congele u ocurra tan rápidamente que se alcance el equilibrio químico. La estructura de la capa de reacción, de tipo universal, está determinada por el balance entre la conducción o difusión normal a la llama y la producción química.

\* \* \*

Es el número de Reynolds,  $UL/\nu$ , el parámetro más importante de la Mecánica de Fluidos y también, sin duda, de la teoría que se ocupa de los procesos de combustión. El número de Reynolds mide la relación entre los términos que caracterizan el transporte convectivo de cantidad de movimiento y su transporte por efectos viscosos. En los movimientos de gases (cuyas difusividades másicas y térmicas son del mismo orden que la difusividad viscosa) el número de Reynolds representa también la relación (llamada número de Peclet) entre los flujos convectivos de masa o calor y los flujos correspondientes por difusión másica o térmica. El número de Reynolds puede interpretarse también como la relación entre el tamaño del campo fluido y la distancia alcanzada, en ausencia de convección, por los efectos de la difusión durante el tiempo de residencia de las partículas fluidas en el campo de observación.

En el análisis de los procesos de combustión nos encontramos con números de Reynolds grandes y pequeños frente a la unidad. Por ejemplo, son pequeños, frente a la unidad, los números de Reynolds que caracterizan el movimiento relativo al medio gaseoso ambiente en que se gasifican, de las gotas de combustible de tamaño microscópico; en cambio el número de Reynolds es grande frente a la unidad para gotas de 100 micras. En el primer caso, en el proceso de vaporización de estas gotas, su movimiento relativo no tiene efectos apreciables. (Si bien, el transporte convectivo radial, asociado al flujo de Stefan debido a la vaporización, juega un papel importante).

Los flujos que encontramos en la mayor parte de los sistemas de combustión, son flujos a altos números de Reynolds. La razón, como veremos, está en que con este tipo de flujos se consigue intensificar la velocidad de combustión al intensificar el proceso de mezcla que controla esta velocidad. Puesto que en los movimientos a altos números de Reynolds, los términos que representan el transporte difusivo aparecen como poco importantes, frente a los términos que representan el transporte convectivo, parece razonable despreciar los efectos viscosos y

de la difusión masica y térmica en las ecuaciones de conservación. Las ecuaciones resultantes, dadas a conocer por Euler en 1.755, son las ecuaciones del movimiento de los fluidos ideales<sup>15</sup>.

Como una primera consecuencia importante de estas ecuaciones de Euler, encontramos que las partículas fluidas mantienen su composición al pasar a través del campo fluido; éste es el resultado de haber eliminado el mecanismo de difusión molecular al escribir estas ecuaciones. Así pues, si los reactantes no están mezclados inicialmente, aparentemente no tendrían tiempo para mezclarse a su paso por la cámara y no habría posibilidad de reacción química entre ellos. Al eliminar de las ecuaciones del movimiento las derivadas segundas espaciales, asociadas a los efectos uniformadores de la viscosidad, difusión y conducción de calor, se pierde el carácter parabólico de las ecuaciones primitivas y también sus propiedades de regularización de las soluciones. Si queremos que las soluciones de las ecuaciones de Euler representen bien los flujos reales, debemos renunciar a la exigencia de continuidad de las magnitudes fluidas y sus derivadas en la solución de las ecuaciones. De ahí la necesidad de incorporar superficies de discontinuidad de la velocidad, presión, temperatura y composición en el seno del campo fluido. Por otra parte, debemos permitir el deslizamiento del fluido ideal respecto a los sólidos que lo limitan, con una temperatura que no tiene por qué coincidir con la del sólido.

Los efectos viscosos y de la difusividad térmica y másica se encargan, como es natural, de suavizar estas discontinuidades y de adaptar el estado del fluido al de la pared. Así, al considerar que los números de Reynolds son grandes pero finitos las superficies de discontinuidad se convierten en capas de transición y de mezcla, de espesor pequeño pero no nulo; por otra parte, el movimiento deslizante en

<sup>15</sup>L. Euler *Principes généraux du mouvement des fluides*. Mémoires de l'Académie de Berlin pg. 274 (1755).

torno a la pared ocurre en una capa límite, térmica y viscosa, también de espesor pequeño pero no nulo. En el *Discurso de Ingreso* de Gregorio Millán encontrará el lector una extensa y excelente exposición de las propiedades de las soluciones continuas y discontinuas de las ecuaciones de Euler, junto con una reseña histórica de los esfuerzos que han conducido a nuestro conocimiento actual de los flujos ideales. Aquí me limitaré a algunas consideraciones adicionales sobre los flujos a altos números de Reynolds, por su relación con los procesos de mezcla turbulentos.

\* \* \*

Se debe a Helmholtz la introducción, en 1868, de las discontinuidades tangenciales en la descripción de los movimientos de los fluidos ideales, con el objetivo de que ésta descripción respondiese más adecuadamente a los flujos reales<sup>16</sup>. Las discontinuidades reciben el nombre de tangenciales porque el fluido no atraviesa la superficie; al contrario de lo que ocurre con las ondas de choque y combustión. Así pues, el movimiento relativo del fluido a la superficie es tangencial a la misma, pero con velocidades, temperatura y concentraciones distintas a cada lado.

Estas superficies de discontinuidad tangencial arrancan de la superficie de los cuerpos que limitan al fluido, como consecuencia del desprendimiento de la capa límite. Como señalamos antes, los mecanismos de transporte molecular convierten estas superficies de discontinuidad en capas delgadas de transición, donde el flujo es de tipo deslizante al igual que lo es en la capa límite. Es decir, la velocidad relativa a la capa, que es tangencial a la misma, presenta, como la temperatura y composición, variaciones muy grandes en distancias muy pequeñas en

<sup>16</sup>H. von Helmholtz *Über discontinuizliche Flüssigkeitsbewegungen*. Monats. Königl. Preuss. Akad. Wiss. Berlin 23, 215-228 (1868). Traducido al inglés a petición de Lord Kelvin, por F. Guthrie, *On discontinuous movements of fluids*. Phil Mag. (4) 36, 337-346 (1868).

sentido transversal a la capa; el espesor de estas capas de torbellinos y mezcla es muy pequeño frente a la longitud característica del campo fluido cuando el número de Reynolds es grande.

Para poner un ejemplo simple, de interés en los sistemas de combustión, imaginemos cómo es el proceso de descarga a la atmósfera de un combustible gaseoso a través de una tobera o inyector. En el movimiento resultante, a altos números de Reynolds, los efectos viscosos están confinados a una capa límite delgada. Esta capa límite abandona la superficie del inyector para formar la capa de torbellinos que separa el chorro de combustible del aire. Idealmente, en ausencia de fenómenos viscosos y de difusión, el chorro, si es subsónico, mantendría indefinidamente, sin mezclarse con el aire, su espesor y velocidad. La razón por la que esto no ocurre se conoce desde 1871, como consecuencia del análisis que hizo Kelvin<sup>17</sup> de la estabilidad de las capas de torbellinos, supuestas infinitamente delgadas. Este análisis mostró que cualquier ondulación de la superficie de discontinuidad viajaba aguas abajo con la velocidad media y crecía a un ritmo proporcional al número de onda de la perturbación.

Cuando en 1880 Rayleigh<sup>18</sup> examinó la estabilidad de las capas de

---

<sup>17</sup>W. Thompson (Lord Kelvin), *Hydrokinetic solutions and observations*. Phil Mag.(4), 42, 362-377, (1871). Este análisis fue generalizado por J.W. Miles, *On the disturbed motion of a plane vortex sheet*. J. Fluid Mech, 4, 538-552 (1958), para retener los efectos de compresibilidad, encontrando que, de acuerdo con la teoría lineal de estabilidad, las capas eran estables para números de Mach, basados en la semidiferencia de velocidades, superiores a  $\sqrt{2}$ . Recientemente M. Artola y A. Majda en *Nonlinear development of instabilities in supersonic vortex sheets*, Physica 28D, 253-281 (1987), han encontrado un mecanismo no lineal de inestabilidad de estas capas de mezcla supersónicas.

<sup>18</sup>Lord Rayleigh *On the stability, or instability, of certain fluid motions*. Proc. London Math. Soc. 11, 57-70 (1880). W. Orr y A. Sommerfeld en sus trabajos, respectivos, *The stability or instability of the steady motions of a perfect liquid and of a viscous liquid* Proc. Roy. Irish Acad. A27 pags. 9-68 y 69-138 (1907) y *Ein Beitrag zur*

torbellinos (utilizando también el marco de las ecuaciones de Euler), teniendo en cuenta el espesor finito de la capa, encontró que éstas sólo eran inestables ante perturbaciones con longitudes de onda superiores a un valor mínimo. Esta longitud es del orden del espesor de la capa, al igual que la longitud de onda de las perturbaciones cuyo ritmo de crecimiento es máximo.

Así pues, las capas de torbellinos son siempre inestables ante perturbaciones de longitud de onda grande, como consecuencia del mecanismo de inestabilidad de Helmholtz-Kelvin. El ritmo de crecimiento de las perturbaciones es máximo para aquellas cuya longitud de onda es del orden del espesor de la capa. Los efectos viscosos son los que determinan el valor inicial de este espesor, pero tienen poca influencia en la evolución de las perturbaciones, que en su etapa inicial está bien descrita por la teoría lineal de la estabilidad de Rayleigh.

El análisis de la capa de torbellinos y de mezcla entre dos corrientes paralelas, separadas aguas arriba por una placa, muestra que las perturbaciones de tipo bidimensional, con longitud de onda comparable al espesor inicial de la capa, crecen en amplitud, concentrándose la vorticidad en torbellinos de eje perpendicular a la dirección del flujo. Puesto que esta concentración de la vorticidad responde a efectos no lineales, la descripción de forma de la evolución de la capa ha de hacerse numericamente.

---

*hydrodynamischen Erklarung der Turbulenten Fluessigkeibewegungen* Proc. 4th Intern Congr. of Mathematicians. Roma Vol.III pgs. 116-124 (1908), formularon el problema de la estabilidad de corrientes deslizantes, reteniendo los efectos de la viscosidad. Fué Heisenberg, en su tesis doctoral, el primero que buscó la solución asintótica de la ecuación de Orr-Sommerfeld, para valores grandes del número de Reynolds. Así demostró que el flujo bidimensional de Poiseuille, estable según la teoría de Rayleigh, era inestable a altos números de Reynolds. Ver su trabajo de los Ann. Phys. Lpz. (4) 74, 577-627 (1924); cuya traducción inglesa *On stability and turbulence of fluid flows* fué publicada como NACA Tech. Memor. 1291 en (1951).

La existencia de grandes torbellinos en las capas de mezcla turbulentas, en forma de estructuras coherentes, fué descubierta en 1971 en el Instituto Tecnológico de California por Brown y Roshko<sup>19</sup>. Estos montaron una instalación en la que se generaban dos corrientes paralelas de Nitrógeno y Helio, inicialmente separadas por una placa, con el objetivo de analizar el proceso, de aplicación a la combustión supersónica, de mezcla turbulenta de chorros de hidrógeno en aire. Los números de Reynolds, del orden de  $10^5$ , garantizaban bien el carácter turbulento del flujo. La gran diferencia de densidades permitía, utilizando técnicas de umbrioscopia o estrioscopia, visualizar el flujo (sin necesidad de sembrarlo con partículas) y tomar películas del mismo a un ritmo de 8000 imágenes por segundo.

Los resultados fueron sorprendentes; mostraban grandes torbellinos con una estructura coherente, casi determinista, que crecían por apareamiento, dando a la capa de mezcla una anchura que variaba linealmente con la distancia a la placa. El carácter caótico del flujo se debía fundamentalmente al carácter caótico de la fase de los torbellinos a su paso por cada punto y del momento en que se producía el apareamiento. Una sonda aspirante con entrada sónica, con un hilo caliente en su interior, desarrollada por el Ingeniero Aeronáutico español Manuel Rebollo en colaboración con Brown, permitía medir las fluctuaciones de concentración en la capa de mezcla con una resolución espacial de 0.1 mm y resolución temporal en el rango de los KHz. Las fuertes oscilaciones de la concentración local mostraban que sólo había mezcla macroscópica pero no microscópica, lo que explicaba la poca eficiencia del proceso de combustión supersónica del hidrógeno en aire<sup>20</sup>.

<sup>19</sup>G.L. Brown y A. Roshko, *The effect of density differences on the turbulent mixing layer* AGARD C.P. 93, 23-1 a 23-11, (1971). Ver también *On density effects and large structure in turbulent mixing layers*. J. Fluid Mech. 64, 775-816 (1974).

<sup>20</sup>G.L. Brown y R.M. Rebollo *A small, fast response probe to measure com-*

A la simulación numérica de este proceso se han dedicado recientemente muchos esfuerzos; en particular, en nuestra Escuela de Ingenieros Aeronáuticos, por Javier Jiménez y Carlos Martel, utilizando técnicas espectrales en la dirección del movimiento y un esquema modificado de diferencias finitas para la dirección transversal<sup>21</sup>. La simulación muestra cómo se concentra la vorticidad en torbellinos y cómo crecen éstos posteriormente por apareamiento, con lo que crece así el espesor de la capa de mezcla. La importancia que este mecanismo de mezcla tiene en la evolución de los chorros, limitados inicialmente por capas de este tipo, es evidente.

Conviene observar que la evolución bidimensional de la capa de mezcla toma pronto un carácter caótico (en el sentido del caos determinista de los sistemas dinámicos), caracterizado por una gran sensibilidad de los detalles del flujo ante pequeñas perturbaciones en las condiciones iniciales. Este carácter caótico, típico de los movimientos turbulentos, se acentúa cuando se incluyen perturbaciones en la dirección de la envergadura; estas perturbaciones producen las ondulaciones de los torbellinos bidimensionales que citamos antes, generándose un sistema de torbellinos contrarrotatorios alineados con el flujo. Estos torbellinos, en forma de estrías longitudinales, juegan un papel muy importante en el proceso de mezcla.

Las capas de mezcla están fuertemente distorsionadas por el flujo turbulento resultante, que es no estacionario, tridimensional y de tipo caótico, acelerando muy fuertemente la mezcla entre los reactantes.

*position of a binary gas mixture*. AIAA J.10, 649-652, (1972). Rebollo utilizó esta sonda para hacer las primeras mediciones fiables de la función de distribución de probabilidad de concentración en el proceso de mezcla turbulento; ver, su Tesis doctoral en el Inst. Tecn. de California (1972).

<sup>21</sup>J. Jiménez y C. Martel *Fractal properties of interfaces in two-dimensional mixing layers* Proc. IUTAM Symp. Stirring and Mixing. La Jolla 20-24 Agosto (1990).

Encontramos dos cascadas en la evolución de los torbellinos: Una cascada directa, de Kolmogorov, de generación de torbellinos de escalas más y más pequeñas por inestabilidades de los torbellinos grandes (que conducen a un alargamiento y distorsión de los torbellinos concentrando la vorticidad) y, también, una cascada inversa, representada por el proceso de apareamiento de los torbellinos. Este determina el crecimiento aparente de la capa de mezcla, reduciendo considerablemente la longitud del chorro y facilitando la mezcla macroscópica de los reactantes; mientras que es la cascada inversa la que facilita la mezcla a escala molecular.

Si observamos una superficie de concentración constante en un flujo turbulento encontramos que esta superficie está fuertemente distorsionada por los torbellinos de todas las escalas, desde la escala grande hasta la escala de Kolmogorov. Los torbellinos grandes transportan en su interior torbellinos de escalas más pequeñas; y los torbellinos de una escala producen distorsiones en la superficie isoconcentración con la escala del torbellino. El área de estas superficies tiene valores extremadamente grandes, debido fundamentalmente a los torbellinos de las escalas más pequeñas; el área aparente de la superficie depende de la escala con que se observa, como corresponde a su carácter fractal determinado por la estructura del flujo turbulento<sup>22</sup>.

---

<sup>22</sup>K.R. Shreenivassan, R. Ramshankar y C. Meneveau, en su trabajo *Mixing, entrainment and fractal dimensions of surfaces in turbulent flows*. Proc. R. Soc. London **A241**, 79-108 (1989), han utilizado consideraciones de tipo fractal para el análisis de datos experimentales del proceso de mezcla entre dos corrientes. J. Jiménez y C. Martel, en su trabajo que ya hemos citado, presentan un análisis, basado en la simulación numérica, de la evolución fractal de las superficies isoconcentración en el proceso de mezcla (y reacción controlada por la difusión) entre dos corrientes paralelas. Encuentran un cambio en la dimensión fractal, que pasa de  $4/3$  a  $5/3$ , cuando se produce el primer apareamiento de los torbellinos.

Las propiedades fractales de las superficies de llama premezclada en un flujo turbulento han sido utilizadas, recientemente, por P. Clavin y E. Siggia, en un trabajo titulado *Turbulent premixed flames and sound*

Es importante tener en cuenta que la escala de Kolmogorov, de los torbellinos más pequeños, se obtiene a partir de la escala grande dividiendo por el número de Reynolds del flujo elevado a la potencia  $3/4$ . De ahí que para la simulación numérica directa del flujo se requiera una malla con un número de puntos proporcional al número de Reynolds elevado a la potencia  $9/4$ . Por ello es todavía difícil, hoy día, hacer la simulación numérica (y también la observación experimental de las escalas pequeñas) cuando el número de Reynolds supera el millar. Citaremos como ejemplo, que la simulación tridimensional de la capa de mezcla, llevada a cabo recientemente en el C.T.R. de la Universidad de Stanford, para un único caso con un número de Reynolds de 6000, ocupó 200 horas de un Cray de la última generación.

En resumen, podemos decir que la mezcla a escala molecular, necesaria para las reacciones químicas, está ligada a la difusión; esta mezcla es acelerada por el proceso de agitación turbulenta. La mezcla sólo puede tener lugar después de la ingestión de fluido (externo), no rotacional, por las escalas grandes del flujo. El fluido ingerido es digerido por el proceso de generación de escalas pequeñas a partir de las escalas grandes hasta llegar a la escala de Kolmogorov donde entra en juego la difusión molecular. En todo caso, este proceso de generación de escalas más y más pequeñas, aunque determinado por el ritmo de ingestión que dictan las escalas grandes, parece poco dependiente del tipo de flujo. En cambio, la forma y tamaño de las escalas grandes, que son en definitiva las determinantes del ritmo de mezcla, son muy dependientes del tipo de flujo (capa límite, chorro o estela). Las escalas grandes o las estructuras coherentes parecen ser, de algún modo, consecuencia de las inestabilidades del flujo.

Después del descubrimiento de Brown y Roshko, se detectaron, o

---

*generation* (enviado a Combust. Sci. and Techn. para su publicación) para el análisis espectral del sonido emitido por la llama.

redescubrieron, estructuras coherentes en muchos flujos turbulentos. Por ejemplo, son estructuras coherentes las manchas turbulentas de Emmons, consideradas antes como flujos de transición de la capa límite. La región de la pared de la capa límite turbulenta aparece dominada por erupciones de vorticidad muy localizadas espacial y temporalmente, que dan lugar a picos muy altos de los esfuerzos viscosos, determinantes de los esfuerzos medios. El descubrimiento de las estructuras coherentes en flujos turbulentos, que no observados con la adecuada resolución temporal aparecen como totalmente caóticos, ha venido a revolucionar nuestras ideas de la turbulencia<sup>23</sup>.

A la caracterización teórica y experimental de estas estructuras coherentes han hecho contribuciones notables varios de nuestros ingenieros aeronáuticos<sup>24</sup>: M. Rebollo, J. Jiménez Sendín, R. Martínez-Val, M. Hernán, Marta Cogollos, en nuestra escuela y, también, L. Bernal y

<sup>23</sup>Ver, por ejemplo, el libro editado por J. Jiménez *The Role of Coherent Structures in Modelling Turbulence and Mixing*, Lecture Notes in Physics Vol. 136. Springer (1980), que recoge los trabajos sobre el tema presentados en un congreso internacional celebrado en Madrid, y las reseñas monográficas de B.J. Cantwell *Organized motion in turbulent flow*, Ann. Rev. Fluid Mech. 13, 457-515 (1981), H.E. Fiedler *Coherent structures in turbulent flows*, Prog. Aerospace Sci. 25, 231-269 (1988) y J.T.C. Liu *Coherent structures in transition and turbulent shear flows*, Ann. Rev. Fluid Mech. 21, 285-315 (1989).

<sup>24</sup>Ver el libro editado por J. Jiménez, citado antes, y los trabajos: M.A. Hernan y J. Jiménez, *Computer analysis of a high-speed film of the plane turbulent mixing layer*. J. Fluid Mech. 119, 323-345 (1982). J. Jiménez, *A spanwise structure in the plane mixing layer*. J. Fluid Mech. 132, 319-336 (1983). J. Jiménez, M. Gogollos y L.P. Bernal *A perspective view of the mixing layer*. J. Fluid Mech. 152, 125-143 (1985). L.P. Bernal y A. Roshko, *Streamwise vortex structure in plane mixing layers*. J. Fluid Mech. 170, 499-525 (1986). J.C. Lasheras, J.S. Cho y T. Maxworthy *On the origin and evolution of streamwise vortical structures in a plane free shear layer*. J. Fluid Mech. 172, 231-258 (1986). J.C. Lasheras y H. Choi, *Three-dimensional instability of a plane shear layer: An experimental study of the formation and evolution of streamwise vortices*. J. Fluid Mech. 189, 53-86 (1988).

J.C. Lasheras, hoy profesores en las universidades de Michigan y California en San Diego, respectivamente. He de agradecer muy especialmente la ayuda prestada por el Profesor Lasheras en el diseño y montaje de una instalación para el análisis de estructuras coherentes en llamas de difusión y el estudio de su posible control, actuando sobre la geometría del inyector, aprovechando las propiedades de receptividad del flujo ante perturbaciones oscilatorias o de tipo acústico. Este proyecto, en que se utilizan técnicas de diagnóstico con Láser muy variadas, ha dado ya resultados muy interesantes<sup>25</sup>; en él colaboran Antonio Lecuona, Pedro Rodríguez Aumente, Antonio Viedma y Cristina Cuerno.

\* \* \*

Nuestra capacidad para diseñar adecuadamente los sistemas en que son determinantes los procesos de combustión está muy ligada a nuestro conocimiento de la estructura de esos procesos. Si bien es cierto que las leyes básicas que los rigen son bien conocidas y, por lo tanto, estaríamos tentados a pensar que estos procesos podrían ser susceptibles de *cálculo*, la realidad es que la *observación* experimental es imprescindible, dada la complejidad del sistema de ecuaciones que los determinan y el carácter turbulento de tipo caótico de los flujos.

Entre la *observación* y el *cálculo* hay una relación muy estrecha, actuando como vínculo las ideas y conceptos teóricos. Unas veces, las ideas tienen su origen en observaciones de datos experimentales reales o de experimentos virtuales, llevados a cabo mediante simulación numérica. Otras veces, los conceptos teóricos proceden del análisis; éste es el caso de muchos conceptos que surgen al tratar con técnicas asintóticas el

<sup>25</sup>Ver, por ejemplo el trabajo de J.C. Lasheras, A. Lecuona y P. Rodríguez Aumente *Three-dimensional vorticity dynamics in the near field of co-flowing forced jets*, presentado en el AMS-SIAM Seminar on Vortex Dynamics and Vortex Methods (1990) que aparecerá en un libro de la AMS Series in Lectures in Applied Mathematics (Editado por C. Anderson y C. Greengard).

problema planteado por la modelización matemática del proceso. Las ideas y conceptos teóricos aportan, por una parte, el punto de vista y el marco apropiado para las observaciones y, por otra parte, facilitan los cálculos y los hacen más eficaces.

Los experimentos cruciales hechos por Reynolds<sup>26</sup> en 1883 para analizar el movimiento en conductos, le llevaron a la idea del tratamiento del flujo en el régimen turbulento utilizando *métodos estadísticos*. Estos métodos han sido y siguen siendo los métodos usados para la correlación y predicción de los resultados experimentales en combustión turbulenta<sup>27</sup> (aunque adolecen del defecto de que deben ser complementados con leyes de tipo semi-empírico para el cierre de las ecuaciones).

Puesto que en los flujos turbulentos a altos números de Reynolds encontramos fluctuaciones rápidas de las variables fluidas, tanto espaciales como temporales, que son de tipo caótico, parece razonable considerar el flujo turbulento como un proceso estocástico, examinando los aspectos probabilísticos del flujo. La descripción probabilística debería hacerse utilizando como base la funcional de densidad de probabilidad conjunta,  $\mathcal{P}(u)$ , definida de manera que  $\mathcal{P}(u)\delta u$  sea la probabilidad de encontrar el estado del fluido reactante (caracterizado por las funciones de  $x, t$  correspondientes a la velocidad, densidad,

<sup>26</sup>O. Reynolds *An experimental investigation of the circumstances which determine whether the motion of water shall be direct or sinuous, and the law of resistance in parallel channels*. Phil. Trans. Roy Soc. **174**, 935-982 (1883). El tratamiento estadístico y las ecuaciones de Reynolds fueron introducidas en su trabajo *On the dynamical theory of incompressible viscous fluids and the determination of the criterion*. Phil. Trans. Roy Soc. A. **186**, 123-164 (1895).

<sup>27</sup>Ver, por ejemplo, el AGARD Report No. 755 *Special Course on Modern Theoretical and Experimental Approaches to Turbulent Flow Structure and Modelling* (1987). También S.M. Correa y W. Shyy *Computational models and methods for continuous gaseous turbulent combustion*. Prog. Energy Combust. Sci. Vol 13, 249-292 (1987).

temperatura, fracciones másicas) en un entorno pequeño  $\delta u$  del estado  $u$  del espacio funcional.

El uso de la funcional de distribución de probabilidad en turbulencia se inicia con el trabajo de E. Hopf en 1952. Su aplicación a los flujos reactivos turbulentos fué hecha en primer lugar en 1973 por César Dopazo y E.E. O'Brien<sup>28</sup>. Las ecuaciones de conservación de los flujos reactivos pueden utilizarse para generar una ecuación lineal en derivadas funcionales que determina la funcional de distribución de probabilidad. No es difícil escribir las soluciones de esta ecuación de un modo formal; sin embargo, la tarea de extraer información de estas soluciones formales parece casi imposible.

A partir de las funcionales de distribución de probabilidad, pueden obtenerse las funciones de distribución de probabilidades; como es el caso, por ejemplo, de  $P(Y_F; x)dY_F$ , que es la probabilidad de que la fracción másica del combustible en un punto  $x$  del espacio esté en un intervalo  $dY_F$  en torno al valor  $Y_F$ . Es posible generar a partir de la ecuación de la funcional de distribución de probabilidad, un conjunto jerárquico de ecuaciones para la determinación de las funciones de distribución de probabilidad; pero estas ecuaciones presentan el problema

<sup>28</sup>El trabajo de E. Hopf *Statistical hydrodynamics and functional calculus*. J. Ratl. Mech. Anal. **1**, 87-123 (1952) fué seguido por los trabajos de T.S. Lundgren *Distribution functions in the statistical theory of turbulence*. Phys. Fluids, **10**, 969-975 (1967) and *Model equations for non-homogeneous turbulence*. Phys. Fluids **12**, 485-497 (1969). La aplicación a los flujos reactivos fué hecha por C. Dopazo en su Tesis doctoral en la Universidad de Nueva York en Stony Brook (1973) y por él y E.E. O'Brien en una serie de trabajos; ver por ejemplo, *A probabilistic approach to the autoignition of reacting turbulent mixtures*. Acta Astron. **1**, 1239-1255 (1974) *Statistical treatment of non-isothermal chemical reactions in turbulence*. Combust. Sci. and Techn. **13**, 99-122 (1976). Ver también E.E. O'Brien *The probability density function (p.d.f.) approach to reacting turbulent flows*, pag. 185-218 del libro *Turbulent Reacting Flows*. Edit. por P.A. Libby y F.A. Williams. Springer (1980) y S.B. Pope *P.d.f. methods in turbulent reactive flows*. Prog. Energy Combust. Sci. **11**, 119-192 (1985).

del cierre; esto es, siempre encontramos en ellas más incógnitas que ecuaciones. El cierre no puede hacerse sin introducir hipótesis adicionales.

Las medias estadísticas, o las medias temporales en flujos estadísticamente estacionarios, son los valores de más interés en las aplicaciones<sup>29</sup>. En muchos casos prácticos, bastará conocer los valores medios puntuales de las velocidades, temperaturas y concentraciones y las desviaciones estadísticas respecto a los valores medios. Estos valores pueden obtenerse como momentos de las funciones de distribución de probabilidad. También pueden utilizarse las ecuaciones de conservación para obtener, como hizo Reynolds, las ecuaciones (llamadas de Reynolds) que determinarían la distribución espacial de los valores medios. Sin embargo, estas ecuaciones presentan también el problema del cierre, pues en ellas aparecen los valores medios de los productos de las fluctuaciones. Es posible obtener ecuaciones de conservación para estos últimos valores, pero en estas ecuaciones aparecen los valores de las medias de los productos triples de las fluctuaciones.

En la modelización de los flujos turbulentos se cierran las ecuaciones dando expresiones, elegidas mediante consideraciones empíricas, para los valores medios de los productos de las fluctuaciones (cuando se utilizan cierres de primer orden) o para los productos triples (en los cierres de segundo orden, como en el caso del método  $k, \epsilon$ ).

Los cierres directos de los términos fluctuantes de producción

<sup>29</sup> Dado el carácter espacial y temporalmente intermitente que tienen las zonas turbillonarias, de mezcla eficaz, en los flujos turbulentos, se acude con frecuencia, tanto en los análisis teóricos como experimentales, al uso de medias condicionales. Las medias incluyen como peso la función de intermitencia, que toma los valores 0 y 1, respectivamente, en las regiones no turbulentas y turbulenta. Ver C. Dopazo *On conditional averages for intermittent turbulent flows*. Jour. Fluid Mech. **81**, 433-438 (1977), donde se muestra cómo se ha de proceder para evaluar analíticamente estas medias.

química en los flujos reactivos son poco fiables, por lo que, para su modelización, se utilizan funciones de distribución de probabilidad de concentración y temperatura de forma pre-elegida. Los parámetros que intervienen en estas funciones se determinan a partir de los valores medios y desviaciones típicas de las fluctuaciones proporcionados por las ecuaciones de conservación de Reynolds<sup>30</sup>.

\* \* \*

El problema del cierre en los tratamientos estadísticos de los flujos turbulentos parece un obstáculo insalvable desde el punto de vista teórico; de ahí que, aunque las necesidades actuales de cálculo en Ingeniería nos fueren a seguir utilizando los métodos estadísticos (acudiendo a la modelización fenomenológica), se piense en usar métodos determinísticos para el análisis de los flujos turbulentos. Estos métodos han recibido un gran impulso en las últimas décadas gracias al descubrimiento de las estructuras coherentes, a los avances en la teoría no lineal de estabilidad y al potencial que ofrecen los grandes ordenadores para la simulación numérica directa. Nadie pone en duda que los flujos turbulentos son las soluciones, de tipo no estacionario y tridimensional, que encontramos para valores altos del número de Reynolds. El punto de vista actual es que los flujos turbulentos pueden comprenderse analizando los cambios que experimenta la estructura del flujo al crecer el número de Reynolds, desde los valores pequeños correspondientes al flujo laminar hasta los valores altos para los que el

<sup>30</sup> Véase el AGARD Report 755 y el artículo de Correa y Shyy citados antes y también el artículo *Turbulent combustion modelling* de R. Borghi en Prog. Energy Combust. Sci. **14**, 245-292 (1988) para una exposición de los métodos estadísticos de cálculo de los flujos turbulentos reactivos. El lector puede encontrar una presentación de datos experimentales, organizados desde el punto de vista de las técnicas de cálculo de tipo estadístico, en el número de la revista Prog. Energy Combust. Sci. **12**, 253-405 (1986) dedicado a la evaluación de datos en flujos turbulentos reactivos simples.

flujo turbulento se dice que está plenamente desarrollado.

La teoría no lineal de la estabilidad hidrodinámica se ocupa de analizar los cambios que experimenta la estructura de los flujos al variar los parámetros adimensionales que los determinan. Las teorías no lineales se apoyan en análisis lineales de estabilidad; cuando el parámetro de orden alcanza un valor crítico, el flujo básico deja de ser estable y aparece, por bifurcación de la solución anterior, un nuevo flujo que, cerca del límite de estabilidad, puede describirse utilizando un análisis débilmente no lineal<sup>31</sup>.

Así, por ejemplo, un movimiento estacionario con condiciones de contorno estacionarias puede perder estabilidad al aumentar el número de Reynolds, para dar lugar a un flujo que en unos casos es estacionario y en otros casos periódico (bifurcación de Hopf). Este es, por ejemplo, el caso del flujo alrededor de un cilindro que, cuando el número de Reynolds supera un valor del orden de 50, deja de ser estacionario para convertirse en periódico con desprendimiento alternativo de torbellinos de signos opuestos que forman una calle de torbellinos. Esta calle recibe el nombre de Karman porque fué él quién, en 1911, examinó la estabilidad de distintas configuraciones de torbellinos puntuales; demostrando así que la calle era marginalmente estable sólo para un valor de la relación entre las separaciones longitudinales y transversales (que coincidía con la observada experimentalmente), siendo inestable para cualquier otro valor de la relación. Javier Jiménez demostró que el comportamiento es el mismo para torbellinos no puntuales, como consecuencia de la estructura

<sup>31</sup>Véase el libro de P.G. Drazin y W. H. Reid *Hydrodynamic Stability*. Cambridge University Press (1981) y el libro editado por H.L. Swinney y J.P. Gollub *Hydrodynamic instabilities and the transition to turbulence* Springer (1981). Véase también, el interesante artículo de P. Huerre y P.A. Monkewitz *Local and global instabilities in spatially developing flows* Ann. Rev. Fluid Mech. 22, 473-537 (1990)

Hamiltoniana de las ecuaciones del flujo no viscoso<sup>32</sup>.

El análisis no viscoso de la estabilidad de las corrientes deslizantes paralelas llevado a cabo por Lord Rayleigh en 1980, mostraba que la presencia de un punto de inflexión en el perfil de velocidades era una condición necesaria para la inestabilidad del flujo; un flujo como el de Poiseuille, en el límite considerado de números de Reynolds infinitos, era estable en contra de la evidencia experimental. El análisis de la estabilidad de las corrientes paralelas de tipo deslizante debía hacerse utilizando la ecuación de Orr-Sommerfeld que incluye los efectos viscosos. Sólo recientemente ha sido posible obtener el número de Reynolds crítico, mediante la solución numérica de esta ecuación. Previamente, la determinación sólo aproximada del Reynolds crítico debía hacerse utilizando técnicas asintóticas para valores grandes del número de Reynolds<sup>33</sup>. Así fué como Heisenberg demostró en su Tesis doctoral que el flujo de Poiseuille bidimensional era inestable para grandes números de Reynolds.

Lord Rayleigh se ocupó también, sin tener en cuenta los efectos viscosos, de la estabilidad hidrodinámica de otros flujos de gran interés en los procesos de combustión. Así, por ejemplo, mostró cómo los chorros líquidos en un gas, a causa de las fuerzas de tensión superficial, eran inestables ante perturbaciones con longitudes de onda superiores a su perímetro<sup>34</sup>. El ritmo de crecimiento de las perturbaciones era máximo para una longitud de onda más grande, la cual determinaba el tamaño de las

<sup>32</sup>T. von Karman y H. Rubach *Über der Mechanismus des Flüssigkeits und Luftwiderstandes*, Phys. Z. 13, 49-59 (1912). J. Jiménez *Linear stability of the inviscid Karman vortex street* J. Fluid Mech. 178, 177-194 (1987)

<sup>33</sup>Véase el Discurso de Ingreso de G. Millán y el artículo de S.A. Marlow *Shear flow instabilities and transition*, pgs 181-228, del libro editado por Swinney y Gollub, citado antes.

<sup>34</sup>Lord Rayleigh *On the instability of jets* Proc. London Math. Soc. 10, 4-13, (1879)

gotas formadas por la inestabilidad.

Lord Rayleigh hizo también un análisis de la estabilidad del equilibrio de fluidos de densidad no uniforme<sup>35</sup>; encontró que eran inestables las configuraciones en que la gravedad actuaba en la dirección del fluido más ligero. Más tarde G.I. Taylor<sup>36</sup> demostró que es el mismo el mecanismo de inestabilidad cuando hay una aceleración de la interfase entre dos fluidos en la dirección del fluido más denso. El mecanismo de inestabilidad de Rayleigh-Taylor juega un papel muy importante en la determinación de la estructura geométrica de las llamas premezcladas que separan los gases frescos de los quemados (mucho menos densos).

El análisis, sin efectos viscosos, de la estabilidad de las ondas de deflagración, llevado a cabo independientemente por G. Darrieus en Francia (1938) y por L.D. Landau en la Unión Soviética (1944), puso de manifiesto que las deflagraciones planas son inestables. (Véase el Discurso de Ingreso de G. Millán para una discusión de estas inestabilidades y los intentos de encontrar mecanismos estabilizadores). Sólo recientemente ha sido posible entender la forma de la respuesta caótica o celular que se encuentra cuando la forma plana no es estable<sup>37</sup>.

A Rayleigh se debe la primera determinación, con efectos viscosos, del valor crítico de pérdida de estabilidad hidrodinámica, cuando trataba de explicar el mecanismo de inestabilidad, observado por Benard en 1900,

<sup>35</sup>Lord Rayleigh *Investigation of the character of the equilibrium of an incompressible heavy fluid of variable density*. Proc. London Math. Soc. 14, 170-174. (1883)

<sup>36</sup>G.I. Taylor *The instability of liquid surfaces when accelerated in a direction perpendicular to their planes I*. Proc. Roy. Soc. A 201, 192-196 (1950).

<sup>37</sup>Ver G.I. Sivashinsky *Instabilities, pattern formation and turbulence in flames* Ann. Rev. Fluid Mech. 15, 391-427 (1983), y P. Clavin *Dynamic behavior of premixed flame fronts in laminar and turbulent flows*. Prog. Energy Combust. Sci. 11, 1-59 (1985).

de una capa líquida horizontal calentada por abajo<sup>38</sup>. Lord Rayleigh mostró que cuando la diferencia de temperaturas (convenientemente adimensionalizada para formar el parámetro que hoy llamamos de Rayleigh) superaba un valor crítico se establecía un movimiento convectivo que incrementaba el flujo de calor.

El análisis de los movimientos convectivos establecidos en capas líquidas cuando pierden estabilidad debido a efectos de tensión superficial o gravitatorios ha atraído la atención de los físicos en las dos últimas décadas. España no ha estado ajena a este movimiento gracias a la labor del Profesor García Velarde<sup>39</sup>. Así, los físicos han aportado un punto de vista complementario al tradicional para el estudio de la transición a la turbulencia de los movimientos fluidos.

La descripción de la solución bifurcada, que encontramos cuando la básica pierde estabilidad, sólo puede hacerse reteniendo efectos no lineales. Landau señaló el camino para hacer esta descripción, pero los primeros cálculos de la respuesta no lineal no fueron hechos hasta 1960 por Watson y Stuart. La teoría lineal de estabilidad muestra cómo para valores supercríticos del parámetro de orden (número de Reynolds, por ejemplo) hay algún modo cuya amplitud crece exponencialmente; la teoría no lineal busca encontrar la ecuación (de tipo Ginzburg-Landau, por ejemplo) que determina la evolución de esta amplitud para tiempos grandes. Landau había hecho la conjetura de que a la turbulencia se

<sup>38</sup>Lord Rayleigh *On convection currents in a horizontal layer of fluid, when the higher temperature is on the under side*. Phil. Mag. (6) 32, 529-546 (1916). G.I. Taylor hizo en 1923, un análisis semejante, *Stability of a viscous liquid contained between two rotating cylinders*, Phil. Trans. Roy. Soc. A 223, 289-343, (1923), que puso de manifiesto la inestabilidad ante fuerzas centrífugas del flujo entre dos cilindros concéntricos cuando la velocidad adimensional de rotación superaba un valor crítico.

<sup>39</sup>Véanse sus artículos *Convective instability: A physicist approach*, con C. Normand y Y. Pomeau. Rev. of Modern Physics, 49, 581-624 (1977) y *Convection* con C. Normand en Scientific American 243, 92-108 (1980)

llegaba como consecuencia de una sucesión infinita de bifurcaciones de Hopf que iban añadiendo sucesivamente nuevas frecuencias al flujo<sup>40</sup>. Después del trabajo de Lorenz en 1963 y Ruelle y Takens en 1971<sup>41</sup> se sabe que esta conjetura no es cierta. Una de las vías de transición al movimiento caótico es la de Ruelle y Takens; en ella una primera bifurcación de Hopf convierte un movimiento estacionario en uno periódico (un ciclo límite en el espacio de las fases o de estados); una segunda bifurcación introduce una nueva frecuencia y el atractor en el espacio de las fases es un toro de dos dimensiones; la tercera bifurcación da lugar, genéricamente, a un movimiento caótico, que para tiempos grandes termina en un atractor extraño en el espacio de las fases, con una dimensión fractal dada por un número no entero<sup>42</sup>.

Este tipo de respuesta caótica se da en sistemas dinámicos con más de dos grados de libertad, sólo si están regidos por ecuaciones no lineales, como señalaba Alberto Galindo en su Discurso de Ingreso. El descubrimiento del caos determinista en sistemas dinámicos simples, aunque fué anticipado por Poincaré y antes intuido por Maxwell, ha sido una de las grandes sorpresas de las dos últimas décadas<sup>43</sup>.

<sup>40</sup>Véase la última edición del libro *Fluid Mechanics* de L.D. Landau y E.M. Lifchitz, Pergamon Press (1987), que recoge también el punto de vista actual sobre la transición a la turbulencia

<sup>41</sup>E.N. Lorenz *Deterministic nonperiodic flow*. J. Atmos. Sci. **20**, 130-141 (1963). D. Ruelle y F. Takens *On the nature of turbulence*. Comm. Math. Phys. **20**, 167-192 (1971). Otras vías hacia el caos son la cascada de M.J. Feigenbaum *The transition to aperiodic behavior in turbulent systems*. Commun. Math. Phys. **77**, 65-86 (1980) y la de la intermitencia de P. Manneville e Y. Pomeau *Different ways to turbulence in dissipative dynamic systems*. Physica D1, 219-226 (1980).

<sup>42</sup>Véase los libros de Landau y Lifchitz y de Swinney y Gollub citados antes y también el artículo de J. Guckenheimer *Strange attractors in fluids: Another view*. Ann. Rev. Fluid Mech. **18**, 15-31 (1986).

<sup>43</sup>Véase el artículo de A. F. Rañada *Movimiento caótico* en Investigación y Ciencia, **114**, 12-23 (1986)

La gran sensibilidad que, para tiempos grandes, tiene la respuesta de los flujos turbulentos ante pequeñas perturbaciones en las condiciones iniciales, era bien conocida en la Mecánica de Fluidos. Era bien conocido el horizonte temporal de predictibilidad que introducía esta sensibilidad en el análisis de los flujos reales; lo que ha sido una sorpresa es que el carácter caótico no estaba ligado a los infinitos grados de libertad del movimiento fluido.

La existencia de los atractores extraños en la respuesta caótica de los sistemas dinámicos debería ofrecernos luz para el desarrollo de las teorías estadísticas de la turbulencia. Para sistemas Hamiltonianos, a causa del teorema de Liouville y según el teorema ergódico de Birkhoff, puede afirmarse que existe un valor límite, para tiempos grandes, del valor medio temporal de cualquier variable dinámica; pero ésto no puede asegurarse para los sistemas disipativos en los que hay contracción del espacio de estados. Podríamos esperar que existiesen, para tiempos grandes, valores medios temporales de las variables dinámicas para cualquier solución independientemente de las condiciones iniciales; pero los estudios que se han llevado a cabo de las medidas invariantes de los sistemas caóticos no parecen justificar esta esperanza<sup>44</sup>.

Los experimentos que en la década de los 70 pusieron de manifiesto la existencia de estructuras coherentes han introducido ideas estructurales en el análisis de flujos turbulentos; en muchos flujos las estructuras coherentes que encontramos cuando el flujo es turbulento tienen una semejanza sorprendente con las que muestra las teorías lineal de estabilidad (El carácter caótico de los flujos parece estar ligado a las fluctuaciones en la fase de estas estructuras). Las posibilidades que ofrecen los ordenadores actuales han dado un gran impulso a las técnicas de análisis basadas en la *simulación numérica directa*<sup>45</sup>. Las teorías no

<sup>44</sup>Véase el artículo de Lanford citado antes.

<sup>45</sup>Ver a este respecto el extenso trabajo de revisión de P. Givi *Model-free*

lineales de estabilidad para el análisis de los atractores de los sistemas dinámicos ofrecen un marco y punto de vista para interpretar y organizar la ingente masa de datos aportada por las simulaciones experimentales y numéricas. No es pues aventurado predecir un crecimiento explosivo de nuestro conocimiento de los flujos turbulentos reactivos, gracias a las nuevas técnicas laser de observación y al potencial de cálculo de los nuevos ordenadores.

\* \* \*

He pretendido, con estas observaciones, resaltar el papel tan importante que tiene la Mecánica de Fluidos en los procesos de combustión; aunque éste es, también, el caso en otras muchas áreas de la Ciencia y Tecnología. La importancia económica, industrial y ambiental de los procesos de combustión, unido al carácter complejo de los mismos y de los sistemas de ecuaciones no lineales que los gobiernan, ha animado a matemáticos, físicos, químicos e ingenieros a aunar esfuerzos para analizar estos procesos.

Un ingrediente importante de los procesos de combustión y, también, de otros campos de aplicación de la Mecánica de Fluidos, es la *turbulencia*, ejemplo prototipo de respuesta caótica en sistemas deterministas. La inestabilidad de los flujos turbulentos, que les hace muy sensibles, para tiempos grandes, a las perturbaciones iniciales, introduce un horizonte temporal en la predictibilidad de los mismos. Cómo atacar este problema ha sido y sigue siendo un reto importante para los físicos, matemáticos e ingenieros.

La Mecánica de Fluidos no ha recibido la atención que merece por

---

*simulations of turbulent reactive flows*. Prog. Energy Combust. Sci. **15**, 1-107 (1989). El Profesor Javier Jiménez tiene en nuestra Escuela de Ingenieros Aeronáuticos un programa muy ambicioso de simulación numérica de flujos de transición a la turbulencia; ejemplos de los resultados de esta programa son su trabajo, ya citado, con C. Martel y su análisis *Transition to turbulence in two dimensional Poiseuille flow* J. Fluid Mech. **218**, 265-297 (1990).

parte de la comunidad científica española, teniendo en cuenta la importancia práctica de sus aplicaciones y el reto que presentan al físico y al matemático sus múltiples problemas pendientes.

Las técnicas de medición con Láser han abierto una nueva vía para el análisis experimental de los procesos de combustión. Sin embargo, estas técnicas no serán eficaces antes de entender los fenómenos de interacción entre la radiación luminosa y las especies reactivas; lo que obliga a desarrollar una teoría de la medida que explique esta interacción.

Los grandes ordenadores actuales permiten la simulación numérica directa de los flujos reactivos. Sin embargo, a las inestabilidades propias de los procesos de combustión se suman a menudo las inestabilidades asociadas a los algoritmos numéricos empleados para tratar estos problemas no lineales; por ello, la solución está siempre supeditada a nuestro buen conocimiento de los problemas matemáticos originales y de los introducidos por los métodos numéricos.

Hacer crecer la comunidad científica que se ocupa de la Mecánica de Fluidos en España es nuestra tarea pendiente<sup>46</sup>. Los múltiples problemas matemáticos y físicos de este área de la Física macroscópica son difíciles, pero fascinantes. Desearía que creciese exponencialmente el número de jóvenes universitarios atraídos por los problemas fluidodinámicos. A ellos les deseo la fortuna que yo tuve, cuando fui acogido por un pequeño grupo, que estaba empeñado en hacer retroceder la frontera de nuestro conocimiento de los procesos de combustión; un área de carácter multidisciplinar, llena de problemas difíciles y de gran importancia tecnológica, a la que, llegando entre los primeros, supieron

---

<sup>46</sup>Debo expresar aquí mi admiración por la labor del Académico Enrique Costa Novella al mostrar la importancia de la Mecánica de Fluidos en la Ingeniería Química. También quiero expresar, muy especialmente mi agradecimiento al Profesor Manuel García Velarde por sus aportaciones propias a la Física de Fluidos y por su labor eficaz al dar a conocer los problemas actuales de la Física de Fluidos a la comunidad científica española.

hacer contribuciones importantes. Así se ganaron un bien merecido prestigio en la comunidad científica internacional, del que yo me beneficié de un modo especial.

Este grupo, creado y dirigido por Gregorio Millán, fué el núcleo fundador de lo que se conoció por la Escuela Española de von Karman. Los que formamos parte de la misma debemos sentirnos honrados al llamarla, con toda justicia, la Escuela de Millán; por la ingente labor que él realizó para su creación y consolidación, por sus importantes aportaciones a la formulación coherente de la Fluidodinámica de los procesos de Combustión y por su tenaz empeño en que sus alumnos y colaboradores, apoyándose en esta formulación, abordasen los problemas prácticos de la Ingeniería con las técnicas más modernas y universales. Quiero hacer mención especial de dos de mis maestros y compañeros, miembros del Grupo original de Combustión, que han sido pilares fundamentales de esta Escuela de Millán; me refiero a los profesores Carlos Sánchez Tarifa e Ignacio Da Riva.

Carlos Sánchez Tarifa, Profesor de Propulsión, fué el iniciador de nuestras actividades experimentales en Combustión. Sus trabajos pioneros sobre vaporización y combustión de gotas han adquirido un carácter clásico en Combustión. Fué el impulsor, inspirador y director de un extenso programa, también pionero, de análisis teórico y experimental sobre propagación de incendios, subvencionado por el Servicio Forestal de Estados Unidos. Hoy día comparte su trabajo de ingeniería en Propulsión con el programa, ya mencionado, sobre propagación de llamas en condiciones de gravedad reducida.

Ignacio Da Riva, nuestro profesor actual de Aerodinámica, hizo también contribuciones muy importantes a la Teoría de la Combustión, entre las que quiero mencionar, por ser en su momento pioneras y hoy clásicas, las que hizo, en colaboración con Gregorio Millán, sobre el uso y condiciones de validez de la hipótesis de estado estacionario en el análisis de la propagación de llamas. Yo tuve la fortuna de trabajar

muchos años con Ignacio Da Riva, tanto en el INTA, donde él dirigía nuestro programa de investigación en Combustión Supersónica, como en la Escuela de Ingenieros Aeronáuticos, donde compartimos la enseñanza de la Mecánica de Fluidos. Su preocupación por dotar a la Escuela de túneles aerodinámicos para la enseñanza e investigación dió como resultado los dos túneles de que disponemos, que bien podríamos decir están construidos con sus propias manos; con ellos ha contribuido a la formación práctica de nuestros alumnos y ha llevado a cabo numerosos estudios de Aerodinámica Industrial. De sus importantes trabajos sobre Fluidodinámica en Microgravedad ya he hablado antes. Por su infatigable actividad, por su tenaz preocupación por el trabajo bien hecho e impaciencia ante el trabajo chapucero, por el rigor y claridad de sus clases y conferencias, ha sido un ejemplo y polo de atracción para los alumnos de nuestra Escuela.

Yo, siguiendo a mis maestros, me he esforzado y he animado a mis alumnos para que se esfuercen en la búsqueda de explicaciones racionales de los, aparentemente tan complejos, procesos fluidodinámicos y de combustión; tratando, en lo posible, de obtener predicciones útiles para la Ingeniería. Aunque en mi caso los resultados hayan sido muy modestos, muchos de mis alumnos se han embarcado en esta aventura fascinante y han hecho contribuciones importantes a la Mecánica de Fluidos y a la Combustión. Estoy seguro de que al expresar a los demás mi entusiasmo por estas contribuciones me erigí en su portavoz y, al mismo tiempo, me adscribí parte de sus méritos.

A estos alumnos y a los maestros y compañeros excepcionales que he tenido, así como a vuestra benevolencia, debo el honor de hablar aquí en este momento.

\* \* \*

Me he permitido la libertad de incluir en el texto una exposición resumida de las ecuaciones generales que determinan la dinámica de los flujos reactantes, recogida de la exposición más completa de la *Aerothermochemistry* de Millán. Con este resumen se pretende mostrar el carácter complejo y multidisciplinar de la Teoría de la Combustión, dar unas indicaciones del campo de validez de las ecuaciones e introducir, parcialmente, la nomenclatura empleada.

Por haber sido un tema central de mi actividad investigadora, he incluido también un análisis de tipo general sobre la estructura de las llamas de difusión. Para ello, he examinado las llamas desde el punto de vista de las técnicas asintóticas y me he apoyado especialmente en la gran sensibilidad que tienen las velocidades de reacción con los cambios de temperatura.

## I. ECUACIONES DE LA DINAMICA DE FLUJOS REACTIVOS

### I.1 - Tratamiento continuo de los flujos reactivos

El análisis del movimiento de los fluidos reactivos, tanto en fase líquida como en fase gaseosa, puede hacerse tratando a los fluidos como medios continuos. Esto es así porque el tiempo  $t_\lambda$  entre colisiones sucesivas de una molécula y el recorrido medio  $\lambda$  entre colisiones son, en la mayoría de los casos de interés práctico, pequeños frente al tiempo  $t_m$  y la longitud característica  $L$  del movimiento macroscópico. En este caso las moléculas de cada partícula fluida intercambian en las colisiones su cantidad de movimiento y energía para adquirir localmente, después de un tiempo poco superior a  $t_\lambda$ , una distribución muy próxima a la que tendrían en equilibrio termodinámico, en el caso de que la parcela de fluido en torno a cada punto no interaccionase con el resto<sup>47</sup>.

Al describir los movimientos de fluidos reactivos, es importante distinguir las colisiones que, al romper los enlaces moleculares y establecer otros nuevos, son responsables de las reacciones químicas de las colisiones de tipo elástico que no implican estos cambios. Ocurre que para que la colisión sea inelástica, las moléculas han de aportar una energía grande frente a la energía típica de traslación de las mismas o bien han de ser colisiones triples. Por ello, las colisiones inelásticas son poco frecuentes; el tiempo característico  $t_q$  entre colisiones inelásticas (o tiempo característico de la reacción química) es muy grande frente al tiempo  $t_\lambda$  entre colisiones elásticas; éstas últimas establecen el equilibrio termodinámico local entre las especies moleculares, sin efecto apreciable de las colisiones inelásticas, tal como ocurriría si se tratase de una mezcla de especies no reactivos. Este estado de casi-equilibrio termodinámico local evoluciona lentamente

<sup>47</sup>Ver, por ejemplo, L.D. Landau y E.M. Lifchitz. *Statistical Physics*. Pergamon Press. London (1958).

(respecto a  $t_\lambda$ ) como consecuencia de las colisiones inelásticas, o reacciones químicas, y también, por supuesto, como consecuencia de la interacción de cada parcela fluida con el resto del fluido. Cuando el tiempo característico del movimiento macroscópico,  $t_m$ , no es grande frente a  $t_q$  el equilibrio termodinámico local no implica equilibrio químico.

Para caracterizar el estado de equilibrio termodinámico (no químico) local de una mezcla fluida reactiva basta conocer su densidad  $\rho$ , energía interna específica  $e$ , y las fracciones másicas  $Y_\alpha = \rho_\alpha/\rho$  de  $N-1$  de las  $N$  especies moleculares que componen la mezcla.

Si hubiese equilibrio termodinámico global la velocidad local  $v_\alpha$  de la especie  $\alpha$  (velocidad media de las moléculas de la especie  $\alpha$  en el entorno del punto) coincidiría con la velocidad local  $v$  del fluido (ó velocidad media de todas las especies) y, para algún observador, ésta sería nula en todo el campo fluido. Por no haber equilibrio termodinámico global,  $v$ ,  $\rho$ ,  $e$ ,  $Y_\alpha$  son funciones, continuas en cada fase, de la variable espacial  $x$  y del tiempo  $t$ , con derivadas continuas espaciales de segundo orden. Además, existen velocidades de difusión  $v_{d\alpha} = v_\alpha - v$ , pequeñas frente a las velocidad de agitación térmica, flujos de calor  $q$ , y esfuerzos viscosos  $\tau'_{ij}$ , adicionales a las fuerzas de presión  $p$ . Por otra parte, por no haber equilibrio químico, la producción másica  $W_\alpha$  de la especie  $\alpha$  por unidad de volumen y tiempo es no nula.

## I.2 - Ecuaciones de conservación<sup>48</sup>

La evolución del fluido está sujeta a las leyes de conservación de la masa, cantidad de movimiento y energía, que escribiremos en forma conservativa.

<sup>48</sup>G. Millán *Aerothermochemistry* INTA, Madrid (1956) y *Discurso de Ingreso en la Real Academia de Ciencias* (1975). F.A. Williams. *Combustion Theory*. 2nd Edition. Benjamin Cummings. Menlo Park (1985).

Principio de conservación de la masa de cada especie  $\alpha$ .

$$\frac{\partial (\rho Y_\alpha)}{\partial t} = - \operatorname{div}(\rho Y_\alpha v) - \operatorname{div}(\rho Y_\alpha v_{d\alpha}) + W_\alpha \quad (1)$$

La ecuación describe el incremento local de la masa de la especie  $\alpha$  como consecuencia del aporte (a la unidad de volumen en la unidad de tiempo) debido al transporte por convección, por difusión y por reacción química. Sumando término a término las  $N$  ecuaciones de conservación se obtiene la ecuación de continuidad

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = - \operatorname{div}(\rho v) \quad (1')$$

si se tiene en cuenta que

$$\sum_{\alpha=1}^N Y_\alpha = 1, \quad \sum_{\alpha=1}^N Y_\alpha v_{d\alpha} = 0, \quad \sum_{\alpha=1}^N W_\alpha = 0 \quad (1'')$$

La ecuación (1') puede sustituir a una cualquiera de las  $N$  ecuaciones (1)

Ecuación de la cantidad de movimiento.

$$\frac{\partial (\rho v)}{\partial t} = - \operatorname{div}(\rho v v) - \operatorname{grad} p + \operatorname{div} \tau' + \rho f_m \quad (2)$$

que expresa la variación con el tiempo de la cantidad de movimiento contenida en la unidad de volumen, como consecuencia del aporte convectivo de cantidad de movimiento y de la contribución debida a las fuerzas de presión, viscosidad y másicas. Estas últimas incluyen, además de las fuerzas gravitatorias  $\rho g$ , las fuerzas de inercia debidas al movimiento del sistema de referencia empleado.

Ecuación de conservación de la energía.

$$\frac{\partial}{\partial t} \left\{ \rho \left( e + \frac{v^2}{2} \right) \right\} = \operatorname{div} \left\{ -\rho \left( e + \frac{v^2}{2} \right) v - p v + \tau' \cdot v - q \right\} + \rho f_m \cdot v \quad (3)$$

que muestra cómo varía la energía interna y cinética como consecuencia del aporte convectivo de estas energías, del trabajo de las fuerzas de presión, viscosidad y másicas y de la energía recibida por conducción. No

hemos añadido la contribución  $-\text{div } q_r$ , del aporte de calor debido a la radiación, pues en muchos procesos de combustión sus efectos sobre la dinámica del fluido son secundarios; cuando se quiere incluir este aporte han de añadirse las ecuaciones de transporte radiativo que permitan calcular los flujos de calor  $q_r$  por radiación<sup>49</sup>.

### I.3 - Leyes constitutivas de transporte

Las ecuaciones (1) a (3) han de ser complementadas por leyes, o más bien relaciones, constitutivas de transporte que ligan los flujos másicos de difusión,  $J_\alpha = \rho Y_\alpha v_{d\alpha}$ , los esfuerzos viscosos  $\tau'_{ij}$  y el flujo de calor por conducción  $q$  con los gradientes locales de las variables termodinámicas (presión  $p$ , temperatura  $T$  y fracciones másicas  $Y_\alpha$ ) que caracterizan el equilibrio (o casi equilibrio) termodinámico local. La existencia de estas relaciones locales, y la posibilidad de tratamiento continuo del fluido reactante, está sujeta a la hipótesis  $\lambda \ll L$ .

Así, por ejemplo, la Teoría Cinética de Gases<sup>50</sup> muestra que, para valores pequeños de  $\lambda/L$ , los esfuerzos viscosos son funciones lineales de las velocidades de deformación, dados por la Ley de Navier-Poisson

$$\tau'_{ij} = \mu (\nabla_i v_j + \nabla_j v_i) + (\mu_v - 2\mu/3) \nabla_k v_k \delta_{ij} \quad (4)$$

escrita aquí en coordenadas cartesianas, donde  $\nabla_i v_j = \partial v_j / \partial x_i$  (utilizando el convenio de Einstein de subíndices repetidos cuando se usan caracteres latinos) y  $\mu$  y  $\mu_v$  son los coeficientes de viscosidad, ordinario y volumétrico. Esta ecuación es también válida para los líquidos newtonianos (que es el caso de la mayoría de mezclas líquidas sin macromoléculas).

<sup>49</sup>Ver por ejemplo, Ya. B. Zel'dovich y Yu. P. Raizer *Physics of Shock Waves and High Temperature Hydrodynamic Phenomena*. I. Academic Press (1967).

<sup>50</sup>Ver por ejemplo: J.O. Hirshfelder, C.F. Curtis y R.B. Bird. *Molecular Theory of Gases and Liquids*. J. Wiley, New York (1954).

Si consideramos mezclas, líquidas o gaseosas diluidas (esto es para mezclas en que hay una especie mayoritaria, en tanto que las demás  $\alpha'$  tienen fracciones másicas pequeñas), las velocidades de difusión, o los flujos por difusión, vienen dadas por la Ley de Fick

$$J_\alpha = \rho Y_\alpha v_{d\alpha} = -\rho D_\alpha \text{grad } Y_\alpha \quad (5)$$

donde  $D_\alpha$  es el coeficiente de difusión de la especie  $\alpha$  en la especie mayoritaria  $N$ , cuya velocidad de difusión está dada por la relación

$$-Y_N v_{dN} = \sum_{\alpha=1}^{N-1} Y_\alpha v_{d\alpha} \quad (5')$$

(Las mezclas de combustible en aire pueden considerarse, sin grandes errores, como mezclas binarias, en las que el nitrógeno molecular juega el papel de especie mayoritaria). En (5) no se han incluido, pues frecuentemente son despreciables, los flujos de difusión asociados a los gradientes de presión (barodifusión) y a los gradientes de temperatura (termodifusión o efecto Soret)<sup>51</sup>.

Para valores pequeños de  $\lambda/L$ , de acuerdo con la Teoría Cinética de Gases, los flujos de calor son proporcionales a los gradientes de temperatura y a las velocidades de difusión, siguiendo la Ley de Fourier generalizada.

$$q = -k \text{grad } T + \sum_{\alpha=1}^N J_\alpha h_\alpha \quad (6)$$

donde  $k$  es el coeficiente de conducción de calor y  $h_\alpha$  es la entalpía específica de la especie  $\alpha$  en la mezcla. En (6) no se ha incluido el término asociado al efecto Dufour, complementario del Soret, que es despreciable en la mayoría de los procesos de combustión.

### I.4 - Ecuaciones de estado y cinética química

A las ecuaciones anteriores han de añadirse:

<sup>51</sup>Véase D.E. Rosner *Transport Processes in Chemically Reacting Flow Systems*. Butterworths (1986).

a) Las ecuaciones de estado que, como consecuencia del equilibrio termodinámico local, ligan todas las variables termodinámicas (por ejemplo  $\rho, e, h_\alpha$ ) con un conjunto (por ejemplo  $p, T, Y_\alpha$ , con  $\alpha'=1, \dots, N-1$ ) de variables termodinámicas independientes, que caracterizan junto con  $v$  el estado local del fluido.

b) Los coeficientes de transporte<sup>52</sup>  $\mu, \mu_v, k$  como funciones de  $p, T, e Y_\alpha$  y los coeficientes de difusión  $D_\alpha$ , como funciones de  $p, y T$ .

c) Expresiones, proporcionadas por la Cinética Química, para las velocidades de producción másica  $W_\alpha$ , debidas a las reacciones químicas, como funciones del estado termodinámico local ( $p, T, Y_\alpha$ ).

De la Termodinámica o de la Mecánica Estadística tomamos prestadas las ecuaciones de estado correspondientes a mezclas no reactivas<sup>53</sup>. La Teoría Cinética, en el límite continuo  $\lambda/L \ll 1$ , proporciona expresiones para los coeficientes de transporte<sup>54</sup>.

La Cinética Química se ocupa de establecer cuales son las reacciones elementales (consecuencia directa de las colisiones moleculares inelásticas) y del ritmo de estas reacciones. Esta proporciona, ver por ejemplo los libros de Benson y Gardiner<sup>55</sup>, las expresiones

$$W_\alpha = W_\alpha(p, T, Y_\alpha) \quad (7)$$

Nos limitaremos aquí a escribir las ecuaciones de estado para mezclas gaseosas, con densidades pequeñas frente a la de los líquidos, las cuales se comportan como mezclas de gases perfectos.

<sup>52</sup>Véase el libro ya citado de Rosner, y E. Costa Novella *Ingeniería Química. 2 Fenómenos de Transporte*. Alhambra Universidad (1984).

<sup>53</sup>Véase el libro de Landau y Lifshitz, ya citado, y W.G. Vincenti y C.H. Kruger, *Introduction to Physical Gas Dynamics*. J. Wiley, New York (1965).

<sup>54</sup>Vease los libros ya citados de Hirshfelder y colaboradores, Vincenti y Kruger, Rosner y Costa Novella.

<sup>55</sup>S.W. Benson *Thermochemical Kinetics*. J. Wiley (1976). W.C. Gardiner (editor) *Combustion Chemistry*. Springer (1984).

### Ecuación térmica de estado

$$p = \rho TR/M \quad (8)$$

donde  $R$  es la constante universal de los gases y  $M$  es la masa molecular media dada, en función de las masas moleculares de las distintas especies  $M_\alpha$ , por la expresión

$$1/M = \sum_{\alpha=1}^N Y_\alpha / M_\alpha \quad (8')$$

### Ecuación energética de estado

$$e + p/\rho = h = \sum_{\alpha=1}^N Y_\alpha h_\alpha \quad (9)$$

donde  $h$  es la entalpía específica local y  $h_\alpha$  la entalpía específica de la especie  $\alpha$ , dada en función de la temperatura  $T$  por la expresión

$$h_\alpha - h_\alpha^r = h_{T\alpha} = \int_{T_r}^T c_{p\alpha}(T) dT \quad (9')$$

Aquí  $h_\alpha^r$  es la entalpía específica de la especie  $\alpha$  a la temperatura de referencia  $T_r$ ,  $h_{T\alpha}$  es la entalpía térmica de la misma especie y  $c_{p\alpha}$  es su calor específico a presión constante.

Cuando, como ocurre con frecuencia, nos ocupamos de mezclas diluidas, con una especie  $N$  mayoritaria,  $M$  puede aproximarse por un valor constante  $M \approx M_N$ , y la entalpía específica  $h$  por la expresión

$$h = e + p/\rho = h_q + h_T = \sum_{\alpha=1}^N Y_\alpha h_\alpha^r + \int_{T_r}^T c_p(T) dT \quad (9'')$$

donde el calor específico  $c_p(T)$  viene dado aproximadamente por el valor  $c_{pN}(T)$ , función sólo de  $T$ . Denominaremos entalpía química específica al término  $h_q = \sum Y_\alpha h_\alpha^r$  y entalpía térmica  $h_T(T)$  al último término de (9'').

Sin embargo, no está justificado aproximar  $h_q$  por  $h_N(T_r)$ , dados los valores altos (frente a la energía térmica) de las entalpías específicas de formación de las especies minoritarias. Nótese también, que la ley de Fourier generalizada (6) debe sustituirse por

$$q = -k \text{ grad } T + \sum_{\alpha=1}^N \rho h_{T\alpha}^r Y_{\alpha} v_{\alpha} \quad (6')$$

donde sólo aparece, junto a la conducción de calor ordinaria, el flujo de energía química por difusión; pues, siendo consecuente con las aproximaciones anteriores, podemos despreciar el término  $\sum \rho h_{T\alpha}^r Y_{\alpha} v_{\alpha}$ .

Por otra parte, la aproximación de gases perfectos conlleva a suponer que los coeficientes de transporte  $\mu$ ,  $\mu_v$ ,  $k$  y  $\rho D_{\alpha}$  son sólo función de la temperatura  $T$ . Los parámetros adimensionales

$$P_r = \mu c_p / k \quad \text{y} \quad L_{\alpha} = k / \rho D_{\alpha} c_p, \quad (10)$$

números de Prandtl y Lewis, en el caso de los gases, pueden considerarse constantes, de orden unidad. En tanto que la dependencia de  $\mu$  con  $T$  se aproxima a menudo por la relación

$$\mu / \mu_r = (T/T_r)^n \quad (11)$$

donde  $n$  es un número, comprendido entre 0.5 y 0.75, dependiente del rango de temperaturas involucrado. Con frecuencia se acepta un valor aproximado constante para  $c_p$ .

Si se utilizan las formas aproximadas (6') y (9'') de la ley de Fourier y de la ecuación térmica de estado, es posible re-escribir la ecuación de la energía en la forma siguiente

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \left\{ \rho (h_T + v^2/2) \right\} + \text{div} \left\{ \rho (h_T + v^2/2) v \right\} = \\ & = \frac{\partial p}{\partial t} + \text{div}(\tau \cdot v) + \rho f_m \cdot v + \text{div}(k \text{ grad } T) - \sum_{\alpha=1}^N h_{\alpha}^r W_{\alpha} \end{aligned} \quad (12)$$

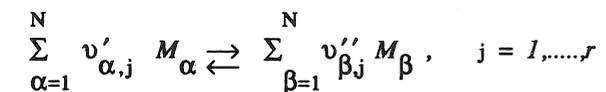
que describe la evolución de la entalpía térmica y cinética. En esta ecuación aparece, explícitamente representada por el último término, la aportación calorífica debida a las reacciones químicas.

#### Velocidades de reacción química

Por último hemos de añadir las expresiones (7), esto es, las relaciones  $W_{\alpha} = W_{\alpha}(p, T, Y_{\alpha})$ , proporcionadas por la Cinética Química, que

dan las masas de las especies  $\alpha$  producidas por unidad de volumen y tiempo por la reacción química. Quiero incluir aquí, sin con ello liberar al lector de consultar las referencias<sup>56</sup> de la Cinética Química, algunas consideraciones respecto a la forma de estas expresiones cinéticas y de la terminología que empleamos en Combustión.

Las reacciones químicas son consecuencia de colisiones inelásticas que eliminan moléculas reactivas y dan lugar a otras especies reactivas y productos. Llamamos reacciones elementales (en principio siempre reversibles) a las reacciones químicas que son consecuencia directa de las colisiones inelásticas; de manera que entre las  $N$  especies hay  $r$  reacciones elementales posibles, que describiremos mediante expresiones de estequiometría de la forma



entendiendo que  $v'_{\alpha,j}$  moléculas de la especie  $\alpha$  se consumen para dar lugar a  $v''_{\beta,j}$  moléculas de la especie  $\beta$ , cuando la reacción  $j$  ocurre en sentido directo; ocurriendo lo opuesto cuando la reacción tiene lugar en el sentido inverso. La velocidad de producción másica de la especie  $\alpha$  puede escribirse, sumando las contribuciones de cada una de las reacciones elementales, en la forma

$$W_{\alpha} = M_{\alpha} \sum_{j=1}^r (v''_{\alpha,j} - v'_{\alpha,j}) \omega_j \quad (13)$$

donde intervienen los coeficientes de estequiometría molar  $v''_{\alpha,j} - v'_{\alpha,j}$  y con la velocidad de reacción molar  $\omega_j$  asociada a la reacción  $j$ .

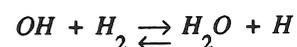
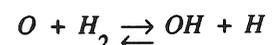
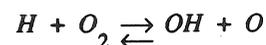
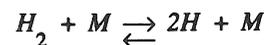
La Cinética Química muestra que, en las condiciones de validez del tratamiento continuo, si las reacciones son elementales

<sup>56</sup>Véanse los libros de Benson y Gardiner ya citados y, por ejemplo, el artículo de C.K. Westbrook y F.L. Dryer *Chemical Kinetic Modelling of Hydrocarbon Combustion*. Prog. Energy Combust. Sci., 10, 1-58 (1984).

$$\omega_j = k_{fj} \prod_{\alpha=1}^N (\rho Y_{\alpha}/M_{\alpha})^{v'_{\alpha j}} - k_{bj} \prod_{\alpha=1}^N (\rho Y_{\alpha}/M_{\alpha})^{v''_{\alpha j}} \quad (14)$$

donde las "constantes"  $k_{fj}$  y  $k_{bj}$  de las reacciones directa e inversa son funciones sólo de la temperatura. Estas constantes pueden escribirse, con buena aproximación, como producto de un factor pre-exponencial constante y un factor de Arrhenius,  $\exp(-E/RT)$ , determinado por la energía  $E$  de activación de la reacción. El cociente entre las constante de reacción directa e inversa es la constante de equilibrio.

A título de ejemplo señalaremos que en la reacción del hidrógeno,  $H_2$ , con el aire intervienen además de las especies moleculares  $O_2$ ,  $H_2O$  y  $N_2$  (que se comporta esencialmente como una especie inerte, no reactiva) los radicales  $H$ ,  $OH$ ,  $O$  y  $HO_2$ , que juegan un papel esencial en la reacción. Algunas de las reacciones elementales que intervienen son



de las cuales, la primera en el sentido directo es una reacción de disociación, en la que interviene una cualquiera  $M$  de las especies moleculares para romper en la colisión el enlace molecular de  $H_2$ ; esta reacción tiene una energía de activación alta y es endotérmica. En el sentido inverso la reacción es de recombinación de radicales, endotérmica, sin energía de activación; pero ocurre a un ritmo lento frente al de colisiones moleculares, pues exige colisiones triples.

La segunda y tercera de las reacciones señaladas arriba son reacciones bimoleculares en los dos sentidos; en el sentido directo son reacciones de ramificación en cadena de los radicales. La última reacción mantiene, sin ramificar, la cadena de los radicales.

Para poner un ejemplo, la producción de  $H$  asociada a la primera reacción puede escribirse

$$W_H = 2M_H \left\{ k_{f1} (\rho Y_{H_2}/M_{H_2})(\rho/M) - k_{b1} (\rho Y_H/M)^2 (\rho/M) \right\}$$

Nótese que podemos utilizar la expresión (13) de las velocidades de reacción química para escribir el último término de (12), de aportación química a la energía térmica, en la forma

$$-\sum_{\alpha=1}^N h_{\alpha} W_{\alpha} = -\sum_{\alpha=1}^N h_{\alpha} M_{\alpha} \sum_{j=1}^r (v''_{\alpha j} - v'_{\alpha j}) \omega_j = \sum_{j=1}^r Q_j \omega_j \quad (15)$$

donde

$$Q_j = \sum_{\alpha=1}^N h_{\alpha} M_{\alpha} \sum_{j=1}^r (v''_{\alpha j} - v'_{\alpha j}) \quad (15')$$

es el calor, por mol, liberado por la reacción  $j$  en el sentido directo.

## I.5 - Condiciones iniciales y de contorno

En lo que sigue, por simplicidad en la exposición, nos limitamos al caso en que sólo hay una fase reactiva, gaseosa, limitada total o parcialmente por superficies sólidas  $\Sigma_S$ , donde la velocidad y temperatura son conocidas.

Las ecuaciones de conservación (1)-(3), las ecuaciones constitutivas (4)-(6), las ecuaciones de estado (8) y (9''), las relaciones (10)-(11) para los coeficientes de transporte y las expresiones (13) y (14) para la cinética química constituyen un sistema de ecuaciones aplicables a todo punto interior del dominio fluido.

El sistema de ecuaciones resultante es de tipo parabólico y permite describir, para  $t > 0$ , la evolución del estado del fluido representado por las  $N+1$  variables termodinámicas independientes  $p$ ,  $T$ ,  $Y_{\alpha}$ , y la velocidad  $v(x,t)$ , si especificamos en  $t=0$  el estado inicial del fluido,  $v(x,0)$ ,  $p(x,0)$ ,  $T(x,0)$  e  $Y_{\alpha}(x,0)$ , junto a las condiciones de contorno que indicaremos a continuación:

Si el fluido llega hasta el infinito ha de conocerse allí el estado del mismo

$$x \rightarrow \infty: v = v_{\infty}, p = p_{\infty}, T = T_{\infty}, Y_{\alpha} = Y_{\alpha\infty}$$

y éste debe satisfacer el sistema de ecuaciones.

Donde el fluido está limitado por un sólido, esto es, en  $\Sigma_S$  definido por la ecuación  $F(x,t) = 0$ , la velocidad  $v$  y temperatura  $T$  del fluido deben coincidir, en todos los puntos de la superficie, con la temperatura  $T_s$  del sólido y también con su velocidad  $v_s$  (si está justificado suponer que no hay gasificación). Además, si el sólido es no reactivo no debe haber flujo por difusión de las especies  $\alpha$  a través de la superficie; de manera que en  $\Sigma_S$  se debe cumplir que  $n \cdot \text{grad } Y_{\alpha} = 0$ , siendo  $n = \nabla F / |\nabla F|$  el vector unitario normal a la superficie. En la interfase,  $f(x,t)=0$ , de un gas con un líquido, el equilibrio termodinámico local exige la continuidad de la temperatura  $T$  y de los potenciales químicos  $\mu_{\alpha}$  de cada una de las especies que componen la mezcla. Estos potenciales son funciones, distintas para las dos fases, del estado termodinámico local caracterizado por  $(p, T, Y_{\alpha})$ . También debe haber continuidad de la velocidad tangencial a la superficie.

Como consecuencia de la existencia de gradientes espaciales de las magnitudes fluidas puede haber vaporización y condensación, lo que se traduce en saltos en la componente normal de la velocidad a la interfase y en saltos en los flujos por difusión y de calor. Estos saltos, al igual que los de presión y esfuerzos viscosos, deben cumplir las relaciones que se derivan de las ecuaciones de conservación, escritas en forma integral, para un volumen de control de espesor infinitesimal que se mueve con la interfase<sup>57</sup>. Nótese que la posición de la interfase ha de determinarse, suponiendo conocida su posición inicial, como parte del problema.

Dada la complejidad del sistema de ecuaciones obtenido y de las

<sup>57</sup>Véase el libro de Rosner, ya citado.

condiciones iniciales y de contorno, no ha sido por el momento posible asegurar la existencia y unicidad de la solución con la formulación clásica. Si bien, la existencia de estas demostraciones para las ecuaciones más particulares de Navier-Stokes, junto con la creencia de que estas ecuaciones y condiciones subsidiarias recogen correctamente los aspectos fisicoquímicos esenciales del flujo, nos permite suponer que el sistema tiene solución clásica, que es única y que, si las condiciones de contorno presentan la adecuada regularidad, las soluciones son continuas, con derivadas espaciales y temporales continuas de todos los órdenes.

## I.6 - Parámetros adimensionales de los flujos reactivos

En cada problema fluidodinámico las condiciones iniciales y de contorno introducen, al menos, una longitud característica  $L$  (tal que pueden esperarse variaciones significativas de las magnitudes fluidas cuando en un instante dado se recorren distancias del orden de  $L$  en el espacio fluido). Por otra parte, las condiciones de contorno introducen al menos una velocidad característica  $U$ . Si se dan variaciones significativas en las condiciones de contorno en tiempos del orden de  $t_0$ , también podemos esperar localmente variaciones significativas de las variables en tiempos del orden de  $t_0$ . Podemos, entonces, hacer estimaciones del orden de magnitud de los distintos términos de las ecuaciones de conservación de las distintas especies, en la forma que damos aquí para la especie  $\alpha$ .

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial t} (\rho Y_{\alpha}) + \frac{1}{\rho} \text{div}(\rho v Y_{\alpha}) - \frac{1}{\rho} \text{div}(\rho D_{\alpha} \nabla Y_{\alpha}) = \frac{W'_{\alpha}}{\rho} - \frac{W''_{\alpha}}{\rho} \quad (16)$$

$$Y_{\alpha c} / t_0 \quad Y_{\alpha c} U / L \quad Y_{\alpha c} D_{if} / L^2 \quad 1 / t'_{\alpha} \quad Y_{\alpha c} / t''_{\alpha}$$

donde cada uno de los términos aparece representado por el inverso de un tiempo característico:  $t_0$  es el tiempo característico de variación de las condiciones de contorno,  $L/U$  es el tiempo de residencia  $t_r$ ;  $L^2/D_{if}$  (donde  $D_{if}$  es el valor típico del coeficiente de difusión  $D_{\alpha}$ ), es el

tiempo característico de difusión a través de la longitud  $L$ . En (16) hemos escrito el término de reacción química en la forma  $W_\alpha = W'_\alpha - W''_\alpha$ , separando los términos positivos de producción de la especie  $\alpha$ , (que ocurren con tiempo característico  $t'_\alpha$ ) de los términos de consumo; estos últimos son necesariamente proporcionales a la concentración  $Y_\alpha$  (ó quizás a su cuadrado) de la especie  $\alpha$ , cuyo valor característico es  $Y_{\alpha c}$ . La reacción de consumo de la especie  $\alpha$  tiene un tiempo característico  $t''_\alpha$ .

Las relaciones  $t/t_o$ ,  $t/t_d$ ,  $t/t'_\alpha$ ,  $t/t''_\alpha$  son parámetros adimensionales que juegan un papel determinante en la caracterización del flujo reactivo.

Así, si el número de Strouhal,  $S_t = t/t_o = LU/t_o$ , es  $S_t \ll 1$ , pueden desprejarse las derivadas temporales en las ecuaciones, considerando el movimiento como casi-estacionario. El límite  $S_t \rightarrow 0$  es un límite singular, en el que, al observar el proceso en tiempos del orden de  $t_r$ , se utiliza la aproximación casi-estacionaria y ha de renunciarse a satisfacer las condiciones iniciales. Sin embargo, en una primera etapa, para tiempos del orden de  $t_o$ , esta aproximación no estaría justificada.

Si el número de Peclet,  $P_e = t/t_d = UL/D_{if}$ , es  $P_e \ll 1$  los efectos convectivos son despreciables frente a los de difusión. En el caso límite opuesto  $P_e \gg 1$  los efectos de la difusión (y en gases los de conducción de calor y viscosidad) son despreciables en la mayor parte del fluido, quedando confinados a capas delgadas de mezcla. El espesor  $\delta_m$  de éstas es tal que en ellas los términos convectivos  $Y_{\alpha c} U/L$  y los de difusión  $Y_{\alpha c} D_{if} / \delta_m^2$  son del mismo orden.

El espesor de las capas de mezcla tiende a cero en el límite  $P_e \rightarrow \infty$ , desapareciendo fuera de las mismas los términos de difusión. En estos casos límite también desaparecen de las ecuaciones los efectos de la viscosidad y conducción de calor, lo que corresponde a la dinámica de un fluido ideal. Al desaparecer en este límite las derivadas espaciales de segundo orden de la velocidad, fracciones másicas y temperatura, se deben modificar las condiciones de contorno, permitiendo al fluido deslizar

tangencialmente al contorno con una temperatura y composición que no tienen por qué cumplir allí ninguna condición. Por otra parte, en el límite  $P_e \rightarrow \infty$  las soluciones presentan discontinuidades en superficies interiores al fluido. Estas son superficies fluidas, cuando la discontinuidad es de tipo tangencial, ó bien superficies de discontinuidades de tipo normal (ondas de choque u ondas de combustión, que tienen una velocidad no nula de propagación respecto al fluido).

En el *Discurso de Ingreso* de Gregorio Millán encontrarán una exposición excelente de las condiciones que deben cumplirse en estas discontinuidades y, también, de su estructura interna, cuando para valores grandes (pero finitos) de  $P_e$  se convierten en capas delgadas, donde han de retenerse los efectos de los términos de transporte. Las superficies de discontinuidad, de contacto o tangenciales, correspondientes al límite  $P_e \rightarrow \infty$ , se transforman en capas delgadas de mezcla o de torbellinos (cuando hay discontinuidad de velocidades tangenciales). Estas capas de torbellinos son frecuentemente inestables y el movimiento de tipo caótico que aparece es turbulento.

Por último, si se comparan los términos convectivos con lo de reacción química se obtienen los números de Damköhler  $t/t'_\alpha$  y  $t/t''_\alpha$

$$D'_a = LU t'_\alpha, \quad D''_a = LU t''_\alpha$$

Cuando los números de Damköhler son  $D_a \ll 1$  los términos de reacción química son despreciables y ésta puede considerarse congelada. Cuando el número de Damköhler  $D''_a$  es  $D''_a \gg 1$  decimos que la especie  $\alpha$  se comporta como muy reactiva y su concentración viene dada por la ecuación

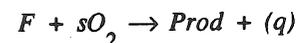
$$W'_\alpha = W''_\alpha \quad (17)$$

siendo  $t''_\alpha/t'_\alpha$  el orden de  $Y_\alpha$  (del orden de la unidad a lo sumo). Los términos convectivos, que implícitamente hemos supuesto como dominantes en el primer miembro de (16), son despreciables en este caso límite  $D''_a \gg 1$ .

El límite  $D''_a \rightarrow \infty$  conduce a la llamada hipótesis de estado

estacionario para la especie  $\alpha$ , que implica despreciar los términos de transporte y acumulación de  $Y_\alpha$  en (16) frente a los términos de producción y consumo de la reacción química. La concentración  $Y_\alpha$  viene entonces determinada por (17); si se verifica que  $t''/t'_\alpha \ll 1$ , el valor resultante de  $Y_\alpha$  es pequeño frente a la unidad y no aparece entonces explícitamente en la dinámica del fluido, aunque si implícitamente en la evaluación de las velocidades de producción de las otras especies<sup>58</sup>.

La hipótesis de estado estacionario es frecuentemente aplicable a varias de las especies intermedias reactivas, lo que permite, como se hace frecuentemente, modelar la reacción química mediante una reacción global de tipo Arrhenius (irreversible) de la forma



dónde entendemos que se consume una masa  $s$  de oxígeno, generándose una energía térmica  $q$  y una masa  $(1+s)$  de productos por unidad de masa de combustible.

Si  $Y_F$  e  $Y_O$  son las fracciones másicas de combustible y oxígeno, los valores correspondientes de las masas producidas por reacción química se aproximan a menudo por la ley global de Arrhenius,

$$W_o/s = W_F = -\rho B Y_F^n Y_O^m \exp(-E/RT) \quad (18)$$

Donde  $B$  es el factor de frecuencia de la reacción, supuesto constante por

<sup>58</sup>N. Peters y colaboradores han desarrollado un programa de obtención racional de esquemas cinéticos simplificados a partir de los originales; Ver, por ejemplo, C. Paczko, P.M. Ledfal y N. Peters, *Reduced schemes for methane, methanol and propane flames*. 21st Symp. (Int) on Combustion pgs. 739-748, (1986). Por otra parte, Harvey Lam, de la Universidad de Princeton, ha desarrollado un método de cálculo numérico para el análisis de sistemas homogéneos reactivos en que aparecen escalas muy dispares, que introduce automáticamente la hipótesis de estado estacionario y otras aproximaciones de las técnicas de perturbaciones singulares; ver, por ejemplo, S.H. Lam y D.A. Goussis *Understanding complex chemical kinetics with computational singular perturbations*, 22nd. Symp. (Int) on Combustion (1988).

simplicidad en la exposición;  $n>0$  y  $m>0$  son los órdenes de reacción global y  $E$  la energía de activación correspondiente. La energía térmica aportada por la reacción química, último término de (12), es  $-W_F q$ , donde  $q$  es el calor generado por unidad de masa de combustible quemada.

Cuando utilizamos una reacción global de tipo Arrhenius con la cinética (18) y se supone constante la masa molecular y un calor específico  $c_p$  sólo dependiente de  $T$ , basta especificar los valores de  $v$ ,  $p$ ,  $T$  y de las fracciones másicas  $Y_F$  e  $Y_O$  para describir el movimiento del fluido reactante.

Los flujos que encontramos en Combustión son flujos a bajos números de Mach en la mayoría de las aplicaciones; siendo las ondas de detonación una excepción importante. Cuando el número de Mach es pequeño, la energía cinética es despreciable frente a la térmica y podremos despreciar el trabajo de los esfuerzos viscosos en la ecuación (12) de conservación de la energía. Por otra parte, mediante estimaciones de órdenes de magnitud, podemos deducir de la ecuación de la cantidad de movimiento que las variaciones espaciales de presión son muy pequeñas, relativas a la propia presión, del orden del cuadrado del número de Mach para flujos que no sean de tipo acústico. Entonces, la ecuación (12) toma la forma:

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho c_p v \cdot \text{grad } T = \frac{dp_1}{dt} + \text{div}(k \text{ grad } T) - q W_F \quad (19)$$

dónde hemos despreciado también el trabajo de las fuerzas másicas. El calor de reacción  $q$ , por unidad de masa de combustible, viene dado por

$$q = h_F^r + s h_o^r - (1+s) h_p^r \quad (20)$$

dónde, por ejemplo,  $h_p$  es la entalpía específica de formación de los productos; la presión  $p_1$  es el valor de  $p$  en un punto cualquiera de la cámara. Cuando la combustión tiene lugar en una cámara cerrada el término  $dp_1/dt$  juega un papel muy importante; pero en muchas aplicaciones la presión  $p_1$  en la cámara de combustión se mantiene constante y como

consecuencia la ecuación (19) se simplifica.

Esta no es la única simplificación introducida por la hipótesis de que los números,  $M$ , de Mach del proceso de combustión son bajos. También en la ecuación de estado (8) podemos suponer  $p = p_1$ , al despreñar las variaciones espaciales de presión debidas al movimiento, que son del orden de  $M^2$  frente a la propia presión; con esta aproximación eliminamos del análisis las ondas acústicas. Además, es posible eliminar de la ecuación de la cantidad de movimiento los esfuerzos viscosos de tipo presión asociados a la viscosidad volumétrica; para ello los incorporamos a las variaciones de presión para formar una presión modificada; ésta, como consecuencia de las aproximaciones anteriores, es una variable de tipo mecánico que actúa, como un multiplicador de Lagrange del cálculo variacional, para asegurar que se cumple el principio de conservación de la masa.

## II. ESTRUCTURA DE LAS LLAMAS DE DIFUSION

### II.1 - Consideraciones generales

Daremos en lo que sigue una descripción de la estructura de las llamas de difusión, considerando una reacción global de tipo Arrhenius, irreversible, con órdenes de reacción unidad. Pensaremos, como ejemplo, en un chorro de combustible gaseoso que sale al aire o a un medio ambiente oxidante, a través de un inyector de radio  $a$ .

Para las condiciones de contorno, debemos especificar los valores de la temperatura  $T_0$  fracción másica  $Y_{F0}$  del combustible y la distribución de velocidades aguas arriba en el inyector; esta distribución está caracterizada por su valor medio  $U$ . Si el aire está en reposo lejos del inyector bastará conocer allí su temperatura  $T_a$  (que, por simplicidad, supondremos aquí igual a  $T_0$ ) y la fracción másica  $Y_{O0}$  del oxígeno, junto al valor de la presión ambiente  $p_a$ . Supondremos nula la concentración de productos y oxígeno en el flujo de alimentación del combustible, al igual que la concentración de productos y combustible en el aire ambiente.

Las derivadas de las fracciones másicas en dirección normal a la superficie del inyector son nulas en la misma, en tanto que allí la temperatura del fluido debe ser igual a la del inyector. En el caso extremo en que las paredes del inyector son fuertemente conductoras (y el sentido de la expresión ha de precisarse con estimaciones de órdenes de magnitud) esta temperatura será  $T_0$ ; mientras que en el caso opuesto, de pared adiabática, la derivada de la temperatura del fluido en dirección normal a su superficie será nula allí.

Si la velocidad media del combustible en el inyector cambia con el tiempo (duplicándose, por ejemplo, en un tiempo  $t_0$ ), podemos esperar encontrar en tiempos  $t_0$  cambios análogos de las magnitudes en un punto fijo genérico de la cámara.

Las condiciones de contorno nos proporcionan una velocidad característica  $U_c$ , una dimensión característica  $a$  y un tiempo

característico  $t_o$ , que podemos utilizar para la estimación de los órdenes de magnitud de los distintos términos de las ecuaciones de conservación. Como ejemplo, damos aquí los órdenes de magnitud para la ecuación de conservación del combustible

$$\frac{\partial Y_F}{\partial t} + v \cdot \nabla Y_F - \rho^{-1} \nabla \cdot (\rho D_f \nabla Y_F) = - B e^{-E/RT} Y_F Y_o \quad (21)$$

$$t_o^{-1} \quad U_c/a \quad D_f/a^2 \quad t_q^{-1}$$

Para esta estimación grosera hemos considerado de orden unidad las fracciones máxicas y que éstas sufren cambios de orden unidad cuando se esperan tiempos de orden  $t_o$  en un punto típico fijo del campo fluido (a una distancia  $a$  del inyector); y que lo mismo ocurre cuando en un instante fijo nos movemos una distancia  $a$  en el campo fluido. El tiempo característico químico  $t_q$  es del orden del inverso de la constante de reacción  $B \exp(-E/RT)$ .

Supondremos en lo que sigue que el número de Strouhal,  $a/U_c t_o$ , es pequeño o a lo sumo del orden de la unidad: lo que en este último caso nos obliga a retener los términos no estacionarios en las ecuaciones. El valor del número de Peclet  $aU_c/D_f$  suele ser grande en las aplicaciones, lo que nos llevaría a despreciar los términos de difusión en la mayoría del campo fluido, pero no en las capas delgadas de mezcla cuyo espesor característico  $\delta_m$  viene dado por la relación

$$U_c/a = D_f/\delta_m^2, \quad (22)$$

obtenida usando en (21) la estimación adecuada del término de difusión para los puntos de la capa de mezcla (a distancias  $a$  del inyector). Aquí, el tiempo de difusión a través de la capa de mezcla aparece identificado con el tiempo de residencia.

Las capas de mezcla a altos números de Reynolds son también las capas de torbellinos introducidas por Helmholtz en 1.868. Estas son inestables, con una inestabilidad de tipo convectivo, como mostraron Kelvin en 1.871 y Lord Rayleigh en 1.880. En el análisis de Lord Kelvin

la capa se supone infinitamente delgada, mientras que Lord Rayleigh tuvo en cuenta el espesor finito de la capa<sup>59</sup>.

Las perturbaciones con longitud de onda poco superior al espesor de la capa crecen rápidamente, debido a estas inestabilidades de Helmholtz-Kelvin, concentrándose la vorticidad en torbellinos de eje transversal al flujo. Estos torbellinos crecen en tamaño por apareamiento (que ocurre de un modo no periódico), estando al mismo tiempo sujetos a las inestabilidades tridimensionales que dan lugar a una cascada de remolinos de escalas más y más pequeñas.

Como consecuencia de la cascada inversa (asociada al proceso de apareamiento de los torbellinos), la capa de mezcla anular que limita el chorro crece en espesor y disminuye el núcleo no mezclado del chorro de combustible, hasta desaparecer a una distancia de cuatro ó cinco diámetros del inyector. Aunque es distinto aguas abajo el mecanismo de crecimiento del chorro, su espesor sigue creciendo linealmente con la distancia; en tanto que tanto la velocidad como la concentración media del elemento combustible decaen, en el eje del chorro, como la potencia inversa de la distancia al origen del inyector.

Los campos fluctuantes de velocidad, temperatura y concentración están dados por las ecuaciones de conservación de la masa (1'), de la cantidad de movimiento (2) y

$$\frac{\partial Y_F}{\partial t} + v \cdot \nabla Y_F - (\rho L_F)^{-1} \nabla \cdot (\rho D_T \nabla Y_F) = W_F/\rho \quad (23)$$

$$\frac{\partial Y_o}{\partial t} + v \cdot \nabla Y_o - (\rho L_o)^{-1} \nabla \cdot (\rho D_T \nabla Y_o) = s W_F/\rho \quad (24)$$

<sup>59</sup>Para una excelente exposición de la teoría de la estabilidad ver el libro de P.G.Drazin, y W.H. Reid. *Hydrodynamic Stability*. Cambridge Univ. Press (1981). Véase también, para el caso que nos ocupa, el artículo de A. Michalke *Survey on jet instability theory* en Prog. Aerospace Sci. 21, 159-199, (1984).

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla T - \rho^{-1} \nabla \cdot (\rho D_T \nabla T) = -(q/c_p) W_F / \rho \quad (25)$$

de conservación de la masa del combustible, del oxígeno y de la energía. En estas ecuaciones interviene la difusividad térmica  $D_T = k/\rho c_p$  y los números de Lewis del combustible y del oxidante; los términos de producción química están dados por la ley de Arrhenius (18).

En los flujos turbulentos los términos convectivos y de acumulación local son del mismo orden y también son del mismo orden los términos de difusión en las regiones donde tiene lugar la reacción química, imposible sin la mezcla de los reactantes por difusión. La importancia del término de reacción relativa a los términos de transporte en las ecuaciones (21), (24) y (25) viene dada, si suponemos que el tiempo mecánico es el tiempo de residencia  $a/U_c$ , por el número de Damköhler

$$D_a = aU_c^{-1} B e^{-E/RT} \quad (26)$$

cuyo valor puede cambiar fuertemente a través del campo fluido debido a los cambios con la temperatura del factor exponencial de Arrhenius.

## II.2 - Análisis de Burke-Schumann

Cuando el número de Damköhler es  $D_a \gg 1$  en todo el campo fluido los reactantes no pueden coexistir con concentraciones importantes. Si es  $U_c/a$  el orden de magnitud de los términos de transporte del primer miembro de (21) y  $t_q^{-1} = B e^{-E/RT} \gg U_c/a$ , podemos concluir que

$$Y_F Y_o = O(t_q U_c/a) = O(D_a^{-1})$$

Esto implica que cuando  $D_a \rightarrow \infty$  la ecuación (21) se simplifica a

$$Y_F = 0 \quad \text{ó} \quad Y_o = 0 \quad (27)$$

Los reactantes no coexisten en el campo fluido si la velocidad de reacción es infinita; el campo fluido aparece separado en dos dominios  $\Omega_F$  y  $\Omega_o$  por una superficie de reacción  $\Sigma_f$ . En el dominio del combustible  $\Omega_F$ , la concentración del oxidante es nula,  $Y_o = 0$ ; en el dominio  $\Omega_o$  del

oxidante la concentración de combustible es nula,  $Y_F = 0$ . Ambos reactantes tienen concentración nula en la superficie de llama  $\Sigma_f$  donde tiene lugar la reacción con una velocidad infinita.

En 1928 Burke y Schumann<sup>60</sup> mostraron cómo podía describirse la estructura de las llamas de difusión cuando la velocidad de reacción era muy grande. La descripción de Burke-Schumann (B-S) corresponde al límite  $D_a \rightarrow \infty$ , en cuyo caso los reactantes no pueden coexistir.

En la Fig.1 se muestran esquemáticamente los perfiles de temperatura y concentración para una sección transversal AA' dada. Los perfiles muestran distribuciones de temperatura y concentración continuas, pero con derivadas discontinuas en la llama  $\Sigma_f$ . Las discontinuidades están asociadas a los términos de reacción, que aparecen representados por funciones delta de Dirac en las ecuaciones de conservación (23) a (25).

El carácter de función delta de Dirac del término de reacción adimensional  $(-a/U_c) W_F / \rho = (a/U_c) B e^{-E/RT} Y_F Y_o = D_a Y_F Y_o$ , está asociado al límite  $D_a \rightarrow \infty$ ; el cual proporciona un valor nulo de  $W_F$  fuera de la llama y un valor de  $W_F$  infinito en la llama.

Del análisis asintótico de la estructura de la solución, representada en la Fig.1, podemos anticipar que en la zona delgada de reacción los términos de reacción están equilibrados por los de difusión normales a la llama. Esto es

$$-\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial n} \left\{ \rho D_T \frac{\partial}{\partial n} \left[ \frac{Y_F}{L_F} \right] \right\} = - B e^{-E/RT} Y_F Y_o \quad (28)$$

$$-\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial n} \left\{ \rho D_T \frac{\partial}{\partial n} \left[ \frac{Y_o}{L_o} \right] \right\} = - s B e^{-E/RT} Y_F Y_o \quad (29)$$

<sup>60</sup>S.P. Burke y T.E.W. Schumann, *Diffusion Flames*. Ind. Eng. Chem. **20**, 998-1004 (1928). Reproducido en First Symp. (Int) on Combustion (1929).

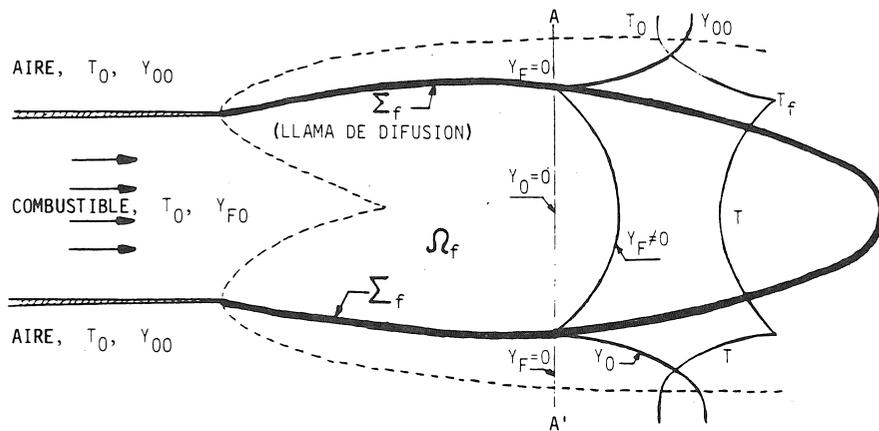


Fig. 1.- Perfiles de temperatura y concentración de las llamas de difusión en el límite de Burke-Schumann.

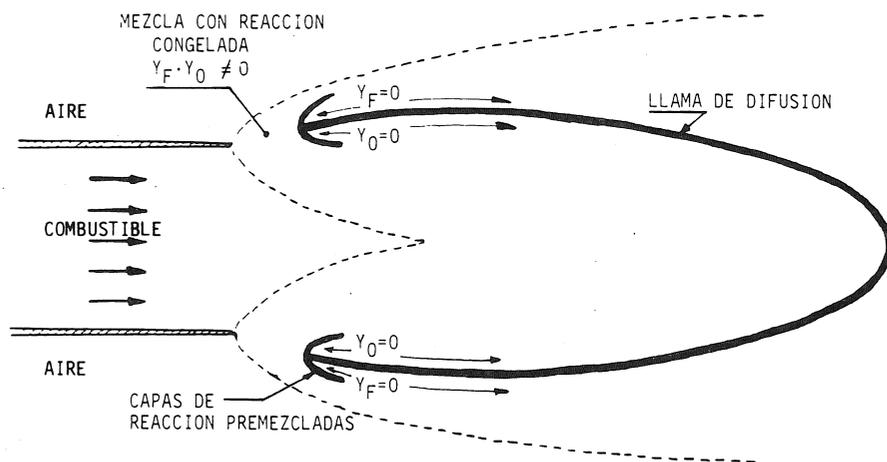


Fig. 2.- Estructura de la llama de difusión con llamas triples.

$$-\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial n} \left\{ \rho D_T \frac{\partial}{\partial n} (T) \right\} = \frac{q}{c_p} B e^{-E/RT} Y_F Y_O \quad (30)$$

donde  $n$  es la distancia en la dirección de la normal, exterior, a la llama. Podemos eliminar de estas ecuaciones los términos de reacción formando combinaciones lineales apropiadas de las mismas, que integradas a través de la llama nos proporcionan las relaciones:

$$-\rho D_T \frac{\partial}{\partial n} \left[ \frac{Y_F}{L_F} - \frac{Y_O}{s L_O} \right] = m_F'' = m_O''/s \quad (31)$$

$$\left[ \rho D_T \frac{\partial T}{\partial n} \right]_{-\infty} - \left[ \rho D_T \frac{\partial T}{\partial n} \right]_{+\infty} = q m_F''/c_p \quad (32)$$

al tener en cuenta que  $Y_F=0$  cuando  $n \rightarrow \infty$  y que  $Y_O=0$  cuando  $n \rightarrow -\infty$ .

En estas relaciones  $m_F''$ ,  $m_O''$  y  $q m_F''$  son, respectivamente, las masas de combustible y oxígeno consumidas y el calor liberado en la llama por unidad de superficie y unidad de tiempo. Así pues, los reactantes llegan por difusión a la llama (desde lados opuestos) en proporción estequiométrica y el calor liberado por la reacción,  $q m_F''$  por unidad de área y tiempo, debe abandonar la misma por conducción.

Por lo tanto, para la descripción de Burke-Schumann de las llamas de difusión debemos resolver las Ecs.(23) y (25) con  $W_F=0$  e  $Y_O=0$  en el lado del combustible del campo fluido, y las Ecs.(24) y (25) con  $W_F=0$  y  $Y_F=0$  en el lado del oxígeno. La superficie de la llama debe determinarse (como un problema de frontera libre) exigiendo que  $Y_F$ ,  $Y_O$  y  $T$  sean continuas en ella, y que sus derivadas en la dirección normal cumplan las condiciones de salto que se deducen de las Ecs. (31) y (32).

Burke y Schumann indicaron cómo podría resolverse este problema cuando los números de Lewis del combustible y oxígeno son iguales a la unidad (la aproximación equidifusiva): en este caso las combinaciones lineales  $(Y_F - Y_O/s)$  y  $(Y_F + c_p T/q)$  se difunden como si se tratase de magnitudes escalares pasivas. Estas combinaciones, llamadas variables de

Schvab-Zel'dovich, han sido muy utilizadas con la aproximación equidifusiva<sup>61</sup>. Generalizaremos aquí este tratamiento para el caso de números de Lewis distintos de la unidad<sup>62</sup>.

Definamos la fracción de mezcla generalizada como

$$Z = (S\hat{Y}_F + 1 - \hat{Y}_O)/(S+1) \quad (33)$$

donde  $\hat{Y}_F = Y_F/Y_{FO}$ ,  $\hat{Y}_O = Y_O/Y_{OO}$  y

$$S = s Y_{FO} L_o / Y_{OO} L_F \quad (34)$$

es la relación estequiométrica generalizada de combustible aire. (Este valor es del orden de 15 para la combustión de un hidrocarburo en aire). La variable fracción de mezcla  $Z$  es una combinación lineal normalizada de las fracciones másicas, obtenida a partir de  $Y_F/L_F + (Y_{OO} - Y_O)/sL_o$  que, de acuerdo con la Ec.(31), se difunde a través de la llama sin efectos de la reacción. La normalización, dividiendo por su valor en la corriente de suministro de combustible, asegura que  $Z=1$  allí y  $Z=0$  en el aire ambiente.

Restando a la Eq.(23) la Eq.(24) dividida por  $s$ , se obtiene una ecuación de conservación para  $Z$

$$L_e(Z) \rho \left[ \frac{\partial Z}{\partial t} + v \cdot \nabla Z \right] - \nabla \cdot (\rho D_T \nabla Z) = 0 \quad (35)$$

Para ello se debe tener en cuenta que, de acuerdo con las condiciones de equilibrio de Burke-Schumann,

$$Y_O = 0 \text{ para } Z \geq Z_s \text{ y } Y_F = 0 \text{ para } Z \leq Z_s \quad (36)$$

siendo  $Z_s$  el valor estequiométrico de la fracción de mezcla, definido por

<sup>61</sup>Véase la obra de Williams, ya citada, de 1985 y el artículo de R.W. Bilger *Turbulent flows with non premixed reactants* en el libro *Turbulent Reacting Flows* (editado por P.A. Libby y F.A. Williams). Springer 1980.

<sup>62</sup>Para más detalles, véase el artículo del autor *The analysis of diffusion flames for non-unity Lewis numbers* que aparecerá en *J. Fluid Mech.* (1991).

$$Z_s = 1/(S+1) = (1+s Y_{FO} L_o / Y_{OO} L_F)^{-1} \quad (37)$$

En (35),  $L_e(Z)$  es un número de Lewis efectivo, definido por

$$L_e = L_F \text{ para } Z > Z_s \text{ y } L_e = L_o \text{ para } Z < Z_s \quad (38)$$

La superficie de la llama está dada por la superficie de nivel

$$Z(x, t) = Z_s \quad (39)$$

de la variable fracción de mezcla.

La Ec.(35) es una ecuación, no lineal, de conservación para la variable  $Z$ , fracción de mezcla modificada; esta ecuación, junto con (36), puede reemplazar a las Ecs.(23) y (25). Nótese que  $Z$ , dada su definición, es función continua y con derivadas primeras continuas en la llama. En cambio, las derivadas segundas de  $Z$  en dirección normal a la llama son discontinuas en ella, como consecuencia del salto que allí tiene  $L_e$ . En el caso particular en que los números de Lewis son iguales,  $Z$  se reduce a la forma clásica de la fracción de mezcla y está descrita por la ecuación de conservación (35), lineal por ser  $L_e$  constante. En este caso también son continuas en todo el espacio las derivadas segundas espaciales de  $Z$ .

A partir de las Ecs.(23)-(25) puede obtenerse una ecuación de conservación análoga a la Ec.(35), libre de términos de reacción, para sustituir a (25), junto a (27) y (35), cuando se analiza la estructura de las llamas de difusión en el límite de Burke-Schumann (B-S) de números de Damköhler infinitamente grandes. En efecto, sumando a la Ec.(23) la Ec.(24) multiplicada por  $S/s$  y la Ec.(25) multiplicada por  $(1+S)c/pq$  se obtiene, teniendo en cuenta (36), la ecuación de conservación

$$\rho \left[ \frac{\partial H}{\partial t} + v \cdot \nabla H \right] - \nabla \cdot (\rho D_T \nabla H) + N(Z) \rho \left[ \frac{\partial Z}{\partial t} + v \cdot \nabla Z \right] = 0 \quad (40)$$

para el exceso de entalpía  $H$ , definida por

$$H = \hat{Y}_F + \hat{Y}_O - 1 + (1+S)L_{Fp} c (T - T_o) / q Y_{FO} \quad (41)$$

donde

$$N(Z) = (L_F - 1)(S+1)/S \text{ si } Z > Z_s \quad (42a)$$

$$N(Z) = (1 - L_o)(S+1) \text{ si } Z < Z_s \quad (42b)$$

La temperatura y concentraciones pueden obtenerse en función de  $Z$  y  $H$  por las relaciones,

$$(1+S)L_F c_p (T - T_o) / qY_{FO} = H + (1+1/S)(1-Z) \quad (43a)$$

$$\hat{Y}_o = 0, \hat{S}Y_F = (S+1)Z - 1 \geq 0$$

$$(1+S)L_F c_p (T - T_o) / qY_{FO} = H + (1+S)Z \quad (43b)$$

$$\hat{Y}_F = 0, \hat{Y}_o = 1 - (S+1)Z \geq 0$$

La función exceso de entalpía  $H$  es igual a cero en la corriente de suministro de combustible y, también, en la zona no perturbada del aire. Las condiciones de contorno para  $H$  en las paredes del inyector se obtienen a partir de las condiciones que dimos antes para  $Y_F$ ,  $Y_o$  y  $T$ ; en el caso particular de que la pared sea adiabática,  $\partial H / \partial n = 0$  en la pared.

La ecuación (40) es una ecuación de conservación lineal para la variable  $H$ , en la que los términos en  $Z$  aparecen como fuentes distribuidas; la discontinuidad que presentan estos términos en la llama se traduce en la presencia en la misma de discontinuidades en la derivada segunda en dirección normal a la llama, pero no en  $H$  ni en sus derivadas primeras.

Para números de Lewis iguales a la unidad,  $N=0$ . Si, además, las paredes del inyector fuesen adiabáticas la solución de la Ec.(40) proporcionaría  $H=0$ ; alcanzando la temperatura  $T_f$  de la llama el valor  $T_e$  de la temperatura de la llama adiabática,

$$T_e = T_o + qY_{FO} / c_p (1+S) \quad (44)$$

Para otros valores de los números de Lewis, la temperatura de la llama

toma el valor

$$T_f = T_o + (H_f + 1)qY_{FO} / c_p L_F (1+S) \quad (45)$$

donde  $H_f$ , el valor de  $H$  para  $Z=Z_s$ , es distinto de cero debido a los llamados efectos de difusión preferencial.

En resumen, cuando se describe la estructura de las llamas de difusión en límite de (B-S), para valores infinitos del número de Damköhler, las ecuaciones de conservación (23)-(25), que incluyen en su segundo miembro funciones delta de Dirac de intensidad desconocida situadas en una superficie de llama también desconocida, pueden reemplazarse por las condiciones (36) de equilibrio químico y las ecuaciones no lineales de transporte (35) y (40) para las variables  $Z$  y  $H$  (continuas y con derivadas primeras continuas en todo el campo fluido). Estas ecuaciones (35) y (40) pueden escribirse en forma conservativa:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho G) + \nabla \cdot (\rho v G) - \nabla \cdot (\rho D_T \nabla Z) = 0 \quad (46)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \{\rho(K+H)\} + \nabla \cdot \{\rho v(K+H)\} - \nabla \cdot (\rho D_T \nabla H) = 0 \quad (47)$$

en las que intervienen las funciones  $G(Z)$  y  $K(Z)$ , definidas por

$$G = (Z - Z_s) L_e(Z) \text{ y } K = (Z - Z_s) N(Z) \quad (48)$$

Esta descripción de los procesos de combustión controlados por difusión será particularmente útil en la modelización estadística de flujos reactivos turbulentos y, también, para su simulación numérica directa.

Para poner un ejemplo del tratamiento de Burke-Schumann, he incluido, en el Apéndice A, el análisis de la llama de difusión en una capa de mezcla distorsionada por un torbellino situado en ella.

### II.3 - Estructura de la zona de reacción

Para valores grandes pero finitos del número de Damköhler, podemos anticipar que la reacción está restringida a una capa delgada, que está

centrada en la superficie de la llama, dada por  $Z=Z_s$  con la descripción de (B-S). Fuera de la capa de reacción la temperatura y concentraciones están bien descritas por la solución de (B-S).

En la capa de reacción las ecuaciones de conservación se reducen a las ecuaciones(28)-(30), que representan un balance entre la reacción y la difusión. Por ser pequeñas las diferencias entre  $T$  y  $T_f$ , tanto más pequeñas cuanto más grandes sean los números de Damköhler, estas ecuaciones admiten simplificaciones adicionales: el factor de Arrhenius puede reemplazarse por  $\exp(-E/RT_f)$  y, también,  $\rho$  y  $D_T$  por los valores  $\rho_f$  y  $D_{Tf}$  que tienen en la llama en el límite (B-S). Así pues, las ecuaciones de conservación toman la forma

$$\frac{\partial^2 Y_F}{\partial n^2} = L_F D_{Tf}^{-1} Be^{-E/RT_f} Y_F Y_o \quad (49)$$

$$\frac{\partial}{\partial n} (Y_o / s L_o - Y_F / L_F) = m_f'' / \rho_f D_{Tf} \quad (50)$$

$$\frac{\partial^2 H}{\partial n^2} = 0 \quad (51)$$

donde las Ecs.(50) y (51), con  $H$  definido por la Ec.(41), son combinaciones de las Ecs.(28) a (30).

Debemos añadir a las Ecs.(49)-(51) las condiciones de contorno obtenidas del empalme con la solución exterior de (B-S). De (51) deducimos

$$H = H_f + n H_{nf} \quad (52)$$

donde  $H_{nf} = \partial H / \partial n$ , está evaluada en la llama,  $Z=Z_s$ , utilizando la solución de (B-S). Análogamente, la Ec.(50) puede integrarse para darnos

$$Y_o / s L_o - Y_F / L_F = n m_f'' / \rho_f D_{Tf} \quad (53)$$

donde

$$L_F m_f'' / \rho_f D_{Tf} = -Y_{Fo} (1 + 1/S) Z_{nf} = 1/d \quad (54)$$

siendo  $d$  una medida del espesor local aparente de la capa de mezcla y

$$Z_{nf} = \partial Z / \partial n \text{ en } Z = Z_s$$

Las Ecs.(49) y (53) pueden utilizarse con las condiciones

$$Y_F = 0 \text{ en } n \rightarrow \infty, \quad Y_o = 0 \text{ en } n \rightarrow -\infty \quad (55)$$

para determinar  $Y_F(n)$  e  $Y_o(n)$ ; la temperatura estará dada por la Ec.(52).

Utilizando las escalas apropiadas  $Y_{Fc}$  y  $dY_{Fc}$  para las variables  $Y_F$  y  $n$ , la ecuación (49) toma la forma normalizada<sup>63</sup>,

$$d^2 y / d\eta^2 = y(y+\eta) \quad (56)$$

a resolver con las condiciones de contorno

$$y = 0 \text{ en } \eta \rightarrow \infty, \quad y+\eta = 0 \text{ en } \eta \rightarrow -\infty \quad (57)$$

El valor resultante de  $Y_F$  en la zona de reacción es del orden de

$$Y_{Fc} = \left\{ B d^2 D_{Tf}^{-1} s L_o \exp(-E/RT_f) \right\}^{-1/3} = \delta_a^{-1/3}; \quad (58)$$

$\delta_a$  es el número de Damköhler efectivo local, dependiente de la temperatura  $T_f$  y del valor, según (54), del gradiente de la fracción de mezcla, calculados en la llama con la aproximación de (B-S). Las variaciones de temperatura, respecto a  $T_f$ , que encontramos en la zona de reacción son del orden de  $(T_f - T_o) \delta_a^{-1/3}$ ; cuando estas variaciones, para valores moderadamente grandes del número de Damköhler, se hacen del orden de  $RT_f^2/E$ , el factor de Arrhenius no puede aproximarse por un factor constante.

Puesto que, como consecuencia de la presencia de una concentración no nula de reactantes en la zona de reacción, la temperatura cae por debajo de  $T_f$  y, como consecuencia, disminuye significativamente la

<sup>63</sup>A. Liñán, *On the Internal Structure of Laminar Diffusion Flames*. OSR/EOAR TN 62-69, Astia Doc. No. 273069. INTA. Madrid (1961); este análisis fué generalizado por el autor en su Aero Eng. Thesis, en el CALTECH (1963). F.E. Fendell, *Ignition and extinction of combustion of initially unmixed reactants*. J. Fluid Mech. 21, 291-303 (1965).

velocidad de reacción, la ecuación de balance (56) ha de modificarse para incluir los cambios en el factor exponencial de Arrhenius. Por ello, para valores grandes de la energía de activación adimensional,  $E(T_f - T_o)RT_f^2 \gg 1$ , la estructura interna de la llama de difusión, en el régimen que llamamos de extinción, cuando  $(T_f - T_o)\delta_a^{-1/3} \sim RT_f^2/E$ , viene descrita por la ecuación

$$d^2y/d\eta^2 = y(y+\eta) \exp\{-\delta^{-1/3}(y+m\eta)\} \quad (59)$$

a resolver con las condiciones de contorno

$$y_\eta = 0 \text{ para } \eta \rightarrow \infty; \quad y_\eta = -1 \text{ para } \eta \rightarrow -\infty \quad (60)$$

En este problema intervienen dos parámetros: Un número de Damköhler efectivo,  $\delta$ , del orden de  $\delta_a \{E(T_f - T_o)/RT_f^2\}^3$ , característico del régimen de extinción y el parámetro  $m$  que mide la relación  $(1-m)/m$  entre los flujos de calor desde la llama hacia el lado del combustible y hacia el lado del oxidante. Estos valores vienen determinados, en cada punto de la llama por la solución de Burke-Schumann.

Es importante observar que, debido a la presencia en la ecuación (59) del factor exponencial de Arrhenius, la reacción química puede congelarse a uno o a ambos lados de la zona de reacción, por lo que es necesario cambiar la forma (57) de las condiciones de contorno a la forma (60), menos fuerte. Así pues, cuando en el régimen de extinción  $\delta$  es de orden unidad, podemos encontrarnos con valores no nulos de  $y_\infty$  ó  $(y+\eta)_\infty$  que reflejan el paso, sin quemar, de combustible o de oxidante a través de la zona de reacción. Estos valores, funciones de  $\delta$  y  $m$  han de obtenerse al resolver numéricamente (o bien asintóticamente, para valores extremos de  $m$ ) el problema (59)-(60)<sup>64</sup>.

Para comprender las razones de este escape de los reactantes

<sup>64</sup> A. Liñán. *The asymptotic structure of counter-flow diffusion flames for large activation energies*. Acta Astronautica, **1**, 1007-1035, (1974). P. Clavin y A. Liñán *Theory of gaseous combustion*, pg 291-338 de Non-equilibrium Cooperative Phenomena in Physics and Related Fields. M.G. Velarde ed., NATO ASI series, Physics B, 116, Plenum Press (1983)

conviene observar que  $E(T_f - T_o)/RT_f^2 = -\delta^{-1/3}(y+m\eta)$ ; por lo tanto la temperatura decrece con una pendiente proporcional a  $m$  hacia el lado del oxidante y con una pendiente proporcional a  $(1-m)$  hacia el lado del combustible. Si  $m$  es cero ó negativo no habrá congelación de la reacción en el lado del oxígeno y, por lo tanto, tampoco escape de combustible hacia ese lado; por la misma razón no habrá escape de oxígeno si  $m > 1$ .

La solución del problema (59)-(60) es única para valores de  $m$  no pertenecientes al intervalo  $(0,1)$ . No existe solución al problema cuando  $m$  pertenece a este intervalo y  $\delta < \delta_E(m)$ ; existiendo dos soluciones para valores de  $\delta > \delta_E$  (de estas dos soluciones, es inestable aquella para la que es más grande el escape de reactantes).

Una buena correlación para los números de Damköhler  $\delta_E$  de extinción, resultantes de la integración numérica, viene dada por la expresión

$$\delta_E = (e/2)\{m-2m^2+1.04m^3+0.44m^4\} \quad (61)$$

válida para el intervalo  $0 < m < 0.5$  y también para el intervalo  $0.5 < m < 1$  si sustituimos  $m$  por  $1-m$ .

La multiplicidad de soluciones del problema (59)-(60) para  $\delta > \delta_E$  y la no existencia de soluciones para  $\delta < \delta_E$  es consecuencia de la fuerte dependencia de la velocidad de reacción con la temperatura. Al disminuir  $\delta$  aumenta, en la solución estable, el espesor de la zona de reacción y crece la concentración de reactantes y, por ello, disminuye la temperatura en la zona; esta disminución de la temperatura produce una disminución de la velocidad de reacción, lo que se traduce (a causa de los efectos no lineales) en la existencia de dos soluciones o ninguna.

Cuando es grande la energía de activación de la reacción, las variaciones de temperatura respecto al valor de Burke-Schumann son tan pequeñas que podemos utilizar esta solución, con buena aproximación, si  $\delta > \delta_E$ ; la llama está extinguida para valores más pequeños del número de Damköhler.

## II.4 - Estructura de la llamas de difusión para valores grandes de la energía de activación

Nos ocuparemos ahora de la influencia que tiene la gran sensibilidad de la velocidad de reacción con la temperatura cuando la reacción es exotérmica,  $q/c T_o - 1$  (o lo que es equivalente  $T_e - T_o \sim T_e$ ), y la energía de activación adimensional  $E/RT_e$  es grande frente a la unidad<sup>65</sup>.

Por ser la reacción exotérmica, podemos encontrar con variaciones importantes de temperatura en el campo fluido. En el caso equidifusivo que, por simplicidad en la exposición, consideraremos en lo que sigue, la temperatura puede pasar del valor inicial  $T_o$  al valor  $T_e$  (su máximo valor si no hay fuentes externas de calor). Por ser alta la energía de activación, los tiempos característicos de reacción  $t_{qo}$  y  $t_{qe}$ , a la temperatura inicial y temperatura de la llama adiabática, satisfacen las desigualdades

$$t_{qo} = B^{-1} \exp(E/RT_o) \gg t_{qe} = B^{-1} \exp(E/RT_e) \quad (62)$$

Por lo tanto, el número de Damköhler

$$D_a = aU^{-1} B e^{-E/RT} \quad (63)$$

que mide la relación entre los términos convectivos y de reacción química, cambia mucho a través del campo fluido como consecuencia de los cambios en la temperatura.

<sup>65</sup>El lector puede encontrar muchos ejemplos de cómo estas desigualdades afectan a los procesos de combustión consultando: el libro de Williams, ya citado; la obra de Ya.B. Zel'dovich, G.I. Barenblatt, V.B. Librovich y G.M. Makhviladze, *Mathematical Theory of Combustion and Explosion*, Consultants Bureau (1984); el libro de J.D. Buckmaster, y G.S.S. Ludford *Theory of Laminar Flames*, Cambridge Univ. Press (1981); el libro de D. A. Frank-Kamenetskii *Diffusion and Heat Transfer in Chemical Kinetics*, Plenum Press. New York (1969); y el artículo de F.J. Clarke *Parameter perturbations in flame theory*, Prog. Aerospace Sci. 16 3-29 (1975). El artículo de John Clarke incluye un resumen de sus importantes aportaciones al análisis de la estructura interna de las llamas de difusión con cinética múltiple.

Definamos una temperatura de cruce  $T_c$  dada por

$$aU^{-1} B \exp(-E/RT_c) = 1 \quad (64)$$

Si  $T_c < T_o$ , el número de Damköhler será  $D_a \gg 1$  en todo el campo fluido, y el proceso de combustión estará, controlado por la difusión, bien descrito por el análisis de Burke-Schumann. Cuando  $T_c > T_e$ , la reacción química estará congelada en todas partes.

En el caso importante en que  $T_o < T_c < T_e$  encontraremos el flujo en equilibrio químico, con  $Y_F = 0$  o bien  $Y_O = 0$ , en las zonas donde la temperatura sea mayor que  $T_c$ , mientras que la reacción estará congelada en las zonas donde  $T < T_c$ . Las zonas de flujo en equilibrio químico están separadas de las zonas donde la mezcla ocurre con la reacción congelada por una capa de reacción delgada, del tipo llama premezclada, donde uno de los reactantes se consume por completo, consumiéndose sólo parcialmente el otro. La región sin combustible está separada de la región sin oxígeno por una llama de difusión. Las dos capas de reacción de tipo premezclado (una rica y otra pobre) y la llama de difusión forman una estructura, ver Fig. 2, que recibe el nombre de llama triple<sup>66</sup>, que

<sup>66</sup>Estos frentes fueron observados por H. Phillips *Flame in a buoyant methane layer*. Tenth Symposium (Int) on Combustion 415-472. The Combustion Institute Pittsburgh (1965). F.A. Williams, en su artículo de revisión *Combustion in laminar flows*, Ann. Reviews of Fluid Mech. 3, 171-188, (1971), examina la estructura de estos frentes basándose en el trabajo de A. Liñán y A. Crespo *Asymptotic analysis of unsteady diffusion flames* que aparecería más tarde en Combust. Sci. and Techn. 14, 95-117(1976). Para análisis más recientes: ver el trabajo de Y. Ohki y S. Tsugé, *Flame propagation through a layer with varying equivalence ratio*, Prog. in Astr. and Aeron. 105, 233-245 (1986); el trabajo de A. Liñán *Diffusion flame attachment and flame propagation along mixing layers*, pags. 151-154 del libro *Mathematical Modelling in Combustion and Related Topics*, editado por C.M. Brauner y C. Schmidt-Lainé, Martinus Nijhoff Publ. (1988); y, también, los trabajos de J.W. Dold *Flame propagation in a non-uniform mixture: The structure of anchored triple flames*, Prog. in Astr. and Aeron. 113, 240-248, (1988) y J.W. Dold, L.J. Hartley y D. Green, *Dynamics of laminar triple-flame structures in non-premixed turbulent combustion*, que aparecerá en "Dynamical Issues in Combustion

encontramos frecuentemente en Combustión. Ejemplos importantes se encuentran en la propagación de llamas sobre combustibles sólidos y en el régimen de combustión con llamas de difusión granulares de los combustibles sólidos compuestos<sup>67</sup>.

Con objeto de entender porqué ésto es así, escribamos la ecuación (23) de conservación para el combustible en la forma

$$-(a/U) \left\{ \frac{\partial Y_F}{\partial t} + v \cdot \nabla Y_F - \rho^{-1} \nabla \cdot (\rho D_F \nabla Y_F) \right\} = Y_F Y_O \exp\{E(T-T_c)/RTT_c\} \quad (65)$$

Mientras que podemos esperar valores de orden unidad para los términos de transporte del primer miembro de la ecuación, en el caso límite  $E/RT_c \rightarrow \infty$  (con  $T_c$  fijo) el término de reacción del segundo miembro será exponencialmente pequeño para  $T < T_c$ , lo que implica flujo congelado; para  $T > T_c$  el factor de Arrhenius  $\exp[(E/RT_c)(T-T_c)/T]$  se hará infinitamente grande, de modo que el factor  $Y_F Y_O$  debe ser exponencialmente pequeño, al ser iguales los dos miembros de la Ec.(65).

El término de reacción  $W_F/\rho$ , en el límite de energía de activación infinita ( $E/RT_c \rightarrow \infty$ ), se convierte en una función delta de Dirac localizada en la zona de reacción, donde  $T=T_c$ ; la reacción está equilibrada, en las capas de reacción premezcladas, por el término que representa la difusión normal a la llama. En la llama la temperatura y concentraciones son continuas, siendo  $Y_F=0$  ó  $Y_O=0$  en la llama y también en la zona de equilibrio químico. Sin embargo, hay saltos en los gradientes de temperatura y concentraciones, relacionados entre sí por los coeficientes de estequiometría de la reacción global que aparecen

Theory", IMA Volume in Mathematics and its Applications, editado por P.C. Fife, A. Liñán y F.A. Williams (1991).

<sup>67</sup>Ver por ejemplo, E.W. Price, J.K. Sambamurthi, R.K. Sigman y R.R. Panyam *Combustion of ammonium perchlorate-polymer sandwiches* Combustion and Flame 63, 381-413 (1986)

reflejados en los segundos miembros de (23)-(25)<sup>68</sup>.

El término de reacción es también una delta de Dirac en la llama de difusión que separa las zonas de equilibrio. A lo largo de la llama de difusión la temperatura crece desde  $T_c$ , el valor en su borde de ataque donde se encuentra con las llamas premezcladas, hasta el valor  $T_e$  que tomará aguas abajo, donde los efectos de pérdida de calor a las paredes del inyector no sean apreciables y, por esa razón,  $H=0$ . Si las paredes del inyector son buenas conductoras del calor su temperatura será muy próxima a  $T_e$ . Puesto que el calor llega por conducción a las paredes del inyector desde las llamas,  $H$  será negativo en la región de la llama triple; de modo que la temperatura de las llamas premezcladas puede ser  $T_c < T_e$  en su borde de ataque. (Véase el Apéndice B para un análisis más detallado de la zona de anclaje). La conducción de calor, aguas arriba, hacia el inyector es pues esencial para que la llama de difusión pueda estar anclada al inyector, con una temperatura  $T_c < T_e$  en su frente<sup>69</sup>.

Si el número de Reynolds del flujo de salida del inyector es grande y el medio ambiente oxidante está en reposo, los efectos de la difusión y conducción de calor aparecen limitados a la capa de mezcla y viscosa que rodea al chorro de combustible y que arranca del borde de salida del inyector. En esta capa sólo cuentan los efectos de la conducción y difusión transversales a la capa. Goldstein<sup>70</sup> hizo la descripción del campo fluidodinámico en la zona inicial, de esta capa, utilizando las aproximaciones de capa límite; la velocidad en la línea de corriente

<sup>68</sup>La estructura de las capas de reacción es la descrita, para el régimen de llama premezclada, en el trabajo de 1974, antes citado, del autor.

<sup>69</sup>Un problema semejante se presenta al analizar la interacción de una llama con una pared fría, tratada en un trabajo pionero por T. von Karman y G. Millán *Thermal theory of a laminar flame near a cold wall*. Fourth Symp. (Int) on Combustion, 173-177, Williams and Wilkens (1953)

<sup>70</sup>S. Goldstein, *Concerning some solutions of the boundary layer equation in hydrodynamics*, Proc. Cambr. Phil. Soc. 26, 1-30 (1930).

divisoria empezaba creciendo, desde el valor cero, como la raíz cúbica de la distancia al inyector. Sin embargo, la aproximación de la capa límite falla en una pequeña región inicial, adyacente al inyector, donde han de retenerse los efectos de la conducción y difusión en sentido del flujo<sup>71</sup>.

La velocidad característica  $U_N$  del fluido y el tamaño característico  $\delta_N$  de esta región, de Navier Stokes, donde los efectos de la conducción de calor aguas arriba son importantes, cumplen las relaciones

$$U_N \delta_N / D_{TO} = 1, \quad U_N / \delta_N = 4U/a \quad (66)$$

Mediante la primera de las ecuaciones se asegura el balance entre la convección de calor y la conducción en la región de Navier-Stokes, de anclaje de la llama. Mediante la segunda de las relaciones se asegura que el movimiento en la región de Navier-Stokes está determinado por los esfuerzos viscosos transmitidos a la región desde la corriente de combustible. Esto último implica que el gradiente de velocidad en el borde exterior de la región de Navier-Stokes coincide con el valor que tiene el mismo en la pared del inyector (en la sección de salida del chorro de combustible). Este gradiente de velocidades es  $4U/a$  si la distribución de velocidades es parabólica; siendo del orden de  $U/\delta_F$  cuando el flujo de combustible en el inyector es de tipo capa límite con un espesor  $\delta_F$ . (En este caso la segunda de las relaciones (66) debe sustituirse por  $U_N/\delta_N = U/\delta_F$ ).

Obsérvese que, de acuerdo con la Ec.(64),  $T_c$  crecerá con la velocidad de la corriente. Cuando esta velocidad alcance un valor  $U_L$  tal que, en orden de magnitud<sup>72</sup>,

$$BaU_L^{-1} B \exp(-E/RT_c) = 1, \quad (67)$$

<sup>71</sup>Ver P.G. Daniels, *Viscous mixing in a trailing edge*, Q.Jl. Mech. Appl. Math. 30, 319-342 (1972).

<sup>72</sup>Ver el Apéndice B, para una estimación más precisa de  $U_L$ .

la llama triple se desprenderá del inyector; situándose aguas abajo en un lugar del chorro donde, en primera aproximación, se puede decir que la velocidad que el frente triple tiene aguas arriba, es igual a la velocidad local de la corriente.

La determinación de esta distancia de levitación (lift-off) es difícil si el flujo es turbulento, porque en ese caso la llama triple debe moverse en capas de mezcla muy delgadas que, aunque localmente se comportan como laminares, están muy distorsionadas y con flujo no uniforme. Peters y Williams<sup>73</sup> han propuesto utilizar ideas de la Teoría de Percolación para evaluar esta distancia; no es posible la propagación de la llama en regiones donde hay una fracción suficiente de las capas de mezcla laminares distorsionadas que no pueden sustentar una llama de difusión, al estar sometidas localmente a una velocidad de estiramiento excesiva.

Conviene advertir aquí que en la mayoría de los casos prácticos el tiempo químico  $t_{qo}$ , basado en la temperatura inicial de los reactantes, es muy grande frente al tiempo mecánico  $a/U$  y, también, frente al tiempo de residencia en la cámara. Para que la combustión sea posible en estos casos el tiempo químico,  $t_{qe}$ , a la temperatura de la llama adiabática ha de ser pequeño frente al tiempo de residencia y, además, debe producirse artificialmente la ignición.

La ignición puede conseguirse aumentando localmente la temperatura, mediante una chispa o con cuerpos calientes. Así se alcanzará pronto el equilibrio químico local al consumir completamente el combustible o el oxígeno; la combustión se extenderá después, en una etapa transitoria, al resto del campo fluido mediante una onda de combustión. Esta onda de combustión es una deflagración, cuando el calentamiento de los reactantes ocurre mediante la conducción, o una detonación, si el calentamiento

<sup>73</sup>N.Peters, y F.A. Williams, *The lift-off characteristics of turbulent jet diffusion flames*, AIAA.J. 21, 423-429, (1983).

ocurre por compresión con una onda de choque. En ambos casos, estas ondas se mueven en un medio fluido, parcialmente premezclado, de composición no uniforme; detrás dejan una llama de difusión, la cual separa las zonas donde queda combustible sin quemar de las zonas donde queda oxígeno.

## II.5 - Llamas de difusión en capas de mezcla sometidas a alargamiento

En flujos turbulentos las capas delgadas de mezcla entre el combustible y aire están distorsionadas y sometidas a un movimiento de deformación de tipo alargamiento o estiramiento por el campo fluido. Una velocidad de estiramiento positiva da lugar a un crecimiento con el tiempo del área ocupada por las partículas fluidas de la capa de mezcla; esto implica un movimiento transversal del fluido hacia la capa que intensifica el proceso de mezcla. La velocidad de alargamiento  $A$  es el inverso de un tiempo que reemplaza al tiempo de residencia  $a/U$  en la definición del número de Damköhler. Para que exista una llama de difusión la velocidad de alargamiento no puede exceder un valor crítico  $A_E$ , de extinción.

Daremos a continuación una breve descripción de los procesos de ignición y extinción de llamas de difusión sometidas a alargamiento<sup>74</sup>. Por simplicidad en la presentación, utilizaremos la aproximación termo-difusiva en la descripción del campo de velocidades. En esta aproximación suponemos constante la densidad a la hora de calcular el campo de velocidades; este campo se utiliza posteriormente en la

<sup>74</sup>Un análisis detallado de la ignición y extinción de las llamas de difusión puede encontrarse en el libro de Williams y en el trabajo del autor de 1974, ya citados. Para la aplicación de estas ideas al análisis de las llamas de difusión turbulentas, véase el libro de Williams y los trabajos de revisión de N. Peters, *Laminar diffusion flamelet models in non-premixed turbulent combustion*, Prog. Energy Combust. Sci. **10**, 319-339 (1984) y *Laminar flamelet concepts in turbulent combustion*, 21st Symp. (Int.) on Combustion, 1231-1250. The Combustion Institute (1986).

evaluación de los términos convectivos de las ecuaciones de conservación.

Describiremos una capa de mezcla bidimensional plana entre dos corrientes opuestas de combustible y oxidante. El campo de velocidades considerado es el campo potencial dado por

$$u=0, v=-Ay, w=Az \quad (68)$$

con una velocidad de deformación  $A$  constante, que es la velocidad de alargamiento de la capa de mezcla en la dirección  $z$ . Nótese que  $A$  es el inverso de un tiempo, que es también el tiempo de difusión a través de la capa de mezcla.

Las ecuaciones de conservación para la temperatura y las fracciones másicas de combustible y oxígeno tienen solución de semejanza, en la que  $T$ ,  $Y_F$  e  $Y_O$  son sólo funciones del tiempo, la coordenada  $y$  transversal a la capa de mezcla y la coordenada  $x$  en dirección transversal a la del alargamiento. Si, por simplicidad, restringimos nuestra discusión al caso de números de Lewis unidad con difusividad térmica constante, las ecuaciones de conservación toman la forma

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} - Ay \frac{\partial \alpha}{\partial y} - D_T \frac{\partial^2 \alpha}{\partial y^2} - D_T \frac{\partial^2 \alpha}{\partial x^2} = -Be^{-E/RT} Y_O Y_F \quad (69)$$

donde  $\alpha = \{Y_F, Y_O/s, -cT/q\}$ , a resolver con las condiciones de contorno

$$y \rightarrow \infty: T - T_o = Y_o - Y_{oo} = Y_F = 0 \quad (70a)$$

$$y \rightarrow -\infty: T - T_o = Y_o = Y_F - Y_{Fo} = 0 \quad (70b)$$

y las condiciones iniciales

$$t=0: T=T_1(x,y), Y_F=Y_{F1}(x,y), Y_O=Y_{O1}(x,y) \quad (71)$$

Es fácil demostrar que la fracción de mezcla  $Z$  y el exceso de entalpía  $H$ , definidas por las Ecs.(33) y (41), que satisfacen las condiciones de contorno  $Z=H=0$  en  $y \rightarrow \infty$  y  $Z=1=H=0$  en  $y \rightarrow -\infty$ , están dadas para tiempos grandes por

$$H=0, 2Z = \operatorname{erfc}(y/\sqrt{2D_T/A}) \quad (72)$$

independientemente de las condiciones iniciales. Por simplicidad, consideraremos que las concentraciones y temperaturas iniciales son tales que (72) se cumple también en  $t=0$ .

Con ayuda de las relaciones (72) podemos reducir la solución del sistema de ecuaciones (69) a la solución de la ecuación

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} - y \frac{\partial \theta}{\partial y} - \frac{\partial^2 \theta}{\partial y^2} - \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} = D_o \hat{Y}_F \hat{Y}_O \exp\{\beta_o \theta / (1 + \alpha_o \theta)\} \quad (73)$$

para  $\theta = c_p (T - T_o) / qY_{FO}$ . Las coordenadas espaciales y el tiempo están medidos con el espesor de la capa de mezcla  $\delta_m = \sqrt{D_T / A}$  y el tiempo  $l/A$ . Aquí  $D_o$  es el número de Damköhler

$$D_o = A^{-1} B Y_{\infty} \exp(-E/RT_o) \quad (74)$$

$$\alpha_o = qY_{FO} / c_p T_o, \quad \beta_o = (E/RT_o) (qY_{FO} / c_p T_o) \quad (75)$$

Por lo tanto, el problema se reduce a resolver la Ec.(73) con las condiciones de contorno

$$\theta = 0 \text{ para } y \rightarrow \pm\infty \quad (76)$$

y la condición inicial

$$\theta = \theta_1(y, x) \text{ en } t = 0 \quad (77)$$

Las fracciones másicas reducidas  $\hat{Y}_F$  y  $\hat{Y}_O$  están dadas en función de  $\theta$  por las relaciones

$$\hat{Y}_F + \theta = 1 - \hat{Y}_O - S\theta = Z = \frac{1}{2} \operatorname{erfc}(y/\sqrt{2}) \quad (78)$$

#### Soluciones unidimensionales estacionarias

Existen soluciones unidimensionales estacionarias de este problema en la forma  $\theta = \theta(y)$ , dadas por la ecuación

$$y \frac{\partial \theta}{\partial y} + \frac{\partial^2 \theta}{\partial y^2} = -D_o \hat{Y}_F \hat{Y}_O e^{\beta_o \theta / (1 + \alpha_o \theta)} \quad (79)$$

con  $\theta = 0$  e  $y \rightarrow \pm\infty$ .

Este problema tiene soluciones múltiples<sup>75</sup> para valores del número de Zel'dovich,  $\beta_o$ , mayores que un valor crítico  $\beta_c(\alpha_o, S)$ ; éstas están representadas esquemáticamente en la Fig.3. Hay tres soluciones para valores de  $D_o$  en el intervalo  $(D_{OE}, D_{OI})$  y la solución es única fuera del intervalo. La solución superior, cuando el parámetro de Damköhler se reduce hasta el valor  $D_{OE}$ , presenta un salto catastrófico a la solución inferior, que asociamos a la extinción. Aquí señalaremos sólo que, para valores grandes del número de Zel'dovich  $\beta_o$ , la temperatura máxima difiere de 0 a lo sumo en una cantidad del orden de  $1/\beta_o$ , en la solución inferior (casi-congelada) que encontramos para valores del número de Damköhler  $D_o$  inferiores al valor de ignición  $D_{OI}$ . En la rama superior, correspondiente a la solución controlada por la difusión para  $D_o > D_{OE}$ ,  $\theta_{\max}$  es próxima a la temperatura de la llama adiabática correspondiente a la solución de (B-S). En este caso límite de números de Damköhler infinitos

$$\hat{Y}_O = 0 \text{ para } Z > Z_s \text{ y } \hat{Y}_F = 0 \text{ para } Z < Z_s \quad (80a)$$

y la llama está situada en  $y = y_p$  dada por

$$2Z_s = \operatorname{erf}(y_p/\sqrt{2}) \quad (80b)$$

Aquí la temperatura de la llama toma el valor  $\theta_c = Z_s = 1/(S+1)$ .

En la rama intermedia, inestable, se alcanzan temperaturas dadas aproximadamente por el siguiente balance

$$1 = D_o \exp\{\beta_o \theta_f / (1 + \alpha_o \theta_f)\} \quad (81)$$

obtenido mediante estimaciones de órdenes de magnitud de los términos de la Ec.(79), si nos despreocupamos de factores potenciales en  $\beta_o$ . Cuando

<sup>75</sup> En el artículo, ya citado, publicado en 1974 por el autor, encontrarán una descripción asintótica de la solución del problema (78)-(79), para valores grandes del número de Zel'dovich, incluyendo las condiciones de ignición y extinción y, con ello, el intervalo de multiplicidad de soluciones.

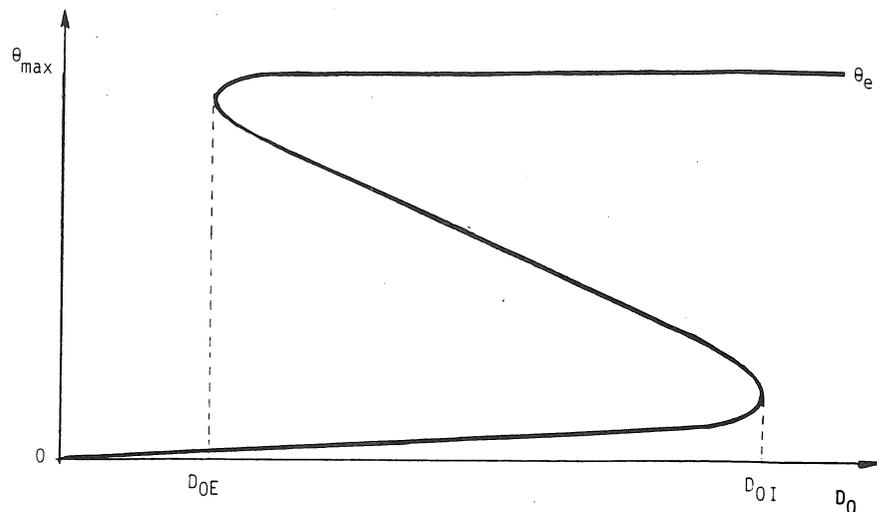


Fig. 3.- Temperatura máxima en la capa de mezcla como función del número de Damköhler.

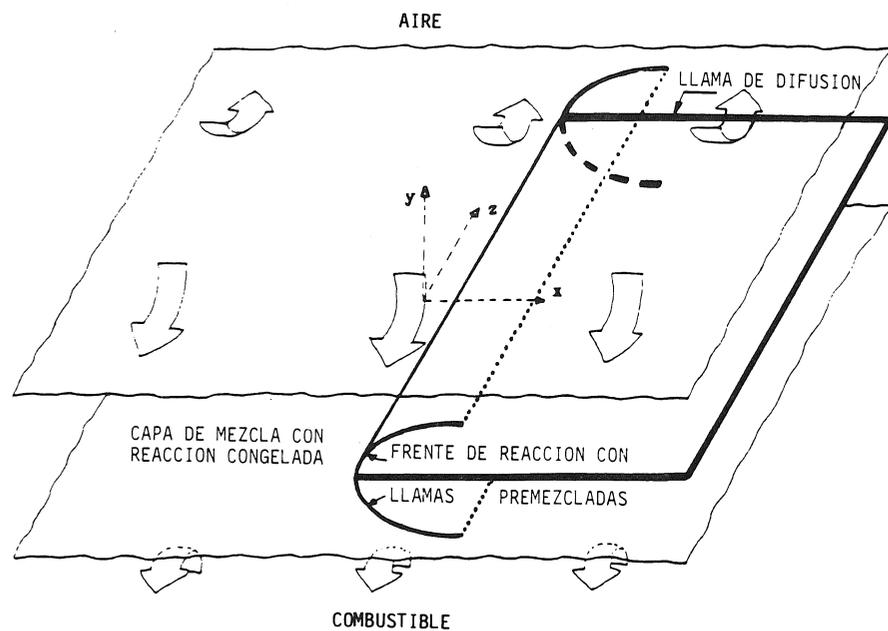


Fig. 4.- Descripción esquemática del frente de extinción o ignición en una capa de mezcla sometida a alargamiento.

$D_0$  es tal que la temperatura  $\theta_f$  dada por (81) es igual a 0, el valor resultante,  $D_0 = 1$ , nos proporciona una estimación aproximada de  $D_{0I}$ . Análogamente, el número de Damköhler dado por (81) con  $\theta_f = \theta_e$  es una estimación aproximada del valor de extinción  $D_{0E}$  de  $D_0$ .

Para obtener un valor más preciso de  $D_{0E}$  es preciso sustituir la relación (81), obtenida mediante la estimación (poco fina) de órdenes de magnitud, por la relación proporcionada por el análisis de la estructura de la zona de reacción. Este análisis conduce al problema (59)-(60).

Un valor más preciso del número de Damköhler de ignición se obtiene del análisis de la forma simplificada de (79) para valores grandes de  $\beta_0$  y números de Damköhler  $D_0$  característicos del régimen de ignición. Para estos valores de  $D_0$ , del orden de  $\beta_0^{-1}$ , los valores de  $\theta$  resultantes son, también del orden  $\beta_0^{-1}$ , suficientes para modificar la velocidad de reacción por un factor de orden unidad; están dados por

$$y \frac{\partial \psi}{\partial y} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} = -D'Z(1-Z)e^\psi \quad (82)$$

con las condiciones de contorno:  $\psi = 0$  en  $y \rightarrow \mp \infty$ . La ecuación (82) es la forma simplificada de (79) que describe las variaciones de temperatura,  $\psi = \beta_0 \theta$ , en el régimen de ignición en que  $D' = D_0 \beta_0$  es de orden unidad. En esta ecuación (82) no se incluyen los efectos, que son pequeños a la vista de (78), del consumo de los reactantes. No existe solución de la ecuación (82), con las condiciones de contorno  $\psi = 0$  en  $y \rightarrow \mp \infty$ , para valores de  $D' > D'_I = 2.59$ . Para valores más pequeños de  $D'$ , existen dos soluciones; la que muestra desviaciones más pequeñas de la solución congelada es estable y la otra, correspondiente al régimen intermedio, es inestable.

#### Frentes de ignición y extinción

En el intervalo de números de Damköhler comprendidos entre los valores de extinción e ignición, las soluciones inferior (casi-congelada) y superior (de casi-equilibrio) pueden coexistir en una capa de mezcla.

Podemos encontrar la primera para valores grandes y negativos de  $x$  y la solución de casi equilibrio para valores grandes y positivos de  $x$ ; estas soluciones aparecen separadas por un frente de transición como el que se muestra en la Fig.4. En efecto, la Ec.(73) tiene soluciones en forma de frentes de reacción  $\theta=\theta(x',y)$ , con  $x'=x+U_F t$ , correspondientes a ondas, que se propagan con la velocidad  $U_F$ , y que unen las dos soluciones. (La existencia de este tipo de soluciones fué propuesta recientemente por B. Dold y el autor). Están dadas por la ecuación

$$U_F \theta_{x'} - y \theta_y - \theta_{yy} - \theta_{x'x'} = D_o \hat{Y} \hat{Y} e^{\beta_o \theta / (1 + \alpha_o \theta)} \quad (83)$$

a resolver con las condiciones de contorno

$$\theta \rightarrow 0 \text{ para } y \pm \infty \quad (84)$$

$$\theta = \theta_1(y) \text{ para } x' \rightarrow -\infty \quad (85)$$

$$\theta = \theta_u(y) \text{ para } x' \rightarrow \infty \quad (86)$$

donde  $\theta_1(y)$  y  $\theta_u(y)$  son las soluciones inferior (casi-congelada) y superior (próxima al equilibrio) de la Ec.(81).  $U_F$  es un autovalor del problema, la velocidad de propagación del frente,

$$U_F = U_F(D_o, \beta_o, \alpha_o, S) \quad (87)$$

El valor resultante de  $U_F$  es positivo para frentes de ignición, correspondientes a valores de  $D_o > D_o^c$ , y  $U_F$  será negativa para valores  $D_o < D_o^c$ , correspondiente a frentes de extinción. Los primeros cálculos numéricos de la estructura de los frentes han sido hechos por B. Rogg en colaboración con el autor. El Profesor J.M. Vega de Prada, de nuestra Escuela de Ingenieros Aeronáuticos, ha encontrado un procedimiento matemático riguroso para el cálculo del número de Damköhler crítico para el que el frente permanece estacionario.

Para valores grandes de la energía de activación adimensional, o del número de Zel'dovich  $\beta_o$ , el frente adquiere una estructura asintótica con llama triple. Las capas muy delgadas de reacción, de tipo premezclado,

van precedidas de una zona de transporte de calor; ésta tiene en la dirección de la capa de mezcla una extensión comparable al espesor de la capa de mezcla cuando el número de Damköhler es del orden del crítico  $D_o^c$ . En cambio, para valores de  $D_o \gg D_o^c$  la capa de transporte que precede a la capa de reacción adquiere un espesor muy delgado frente al de la capa de mezcla; la combinación de la capa de reacción y de la capa delgada de transporte que la precede forma una onda de deflagración ó llama premezclada.

Al análisis de los frentes de ignición y extinción se ha dedicado recientemente un esfuerzo considerable, porque estos frentes tienen un papel importante en las características del desanclaje (lift-off) y apagado (blow-off) de las llamas de difusión laminares y turbulentas. Los efectos de expansión térmica, que no se han tenido en cuenta en el análisis que hemos expuesto aquí para estos frentes, alteran apreciablemente su velocidad de propagación.

## Apéndice A

### EFFECTOS DE UN TORBELLINO EN LAS LLAMAS DE DIFUSION.

#### A.1. Formulación

Analizaremos, como ejemplo, los efectos que tienen en las llamas de difusión la distorsión y el enrollamiento de la capa de mezcla por un torbellino situado en la entrefase del combustible y del oxidante. Consideraremos, en particular, el caso de la evolución con el tiempo de la llama de difusión que se establece entre dos regiones una con combustible y otra con un oxidante, separadas en el instante  $t=0$  por una interfase plana. En esta interfase suponemos que hay un torbellino de intensidad  $\Gamma$  que distorsiona y enrolla la interfase, afectando de un modo sustancial al proceso de mezcla. F. Marble introdujo este modelo<sup>76</sup> para analizar los efectos de los torbellinos en las llamas de difusión turbulentas; mediante este modelo pretendía entender, en particular, cómo es la estructura de la llama de difusión en los grandes torbellinos representativos de las estructuras coherentes de las capas de mezcla turbulentas.

Para el análisis utilizaremos el modelo termodifusivo, que consiste en despreciar los efectos de las variaciones de densidad y de la difusividad térmica a la hora de describir los procesos de transporte.

Si utilizásemos un sistema de coordenadas cilíndricas,  $(r, \theta)$ , el campo de velocidades inducido por el torbellino vendría dado por

$$v_r = 0, \quad v_\theta = \Gamma/2\pi r \quad (A1)$$

Si suponemos que la reacción química es infinitamente rápida podemos

<sup>76</sup>Ver por ejemplo, A.R. Karagozian y F.E. Marble *Study of a diffusion flame in a stretched vortex* Combust. Sci. Tech. **45**, 65-84 (1986). También A.M. Laverdant y S.M. Candel *A numerical analysis of a diffusion flame-vortex interaction* Combust.Sci.Tech. **60**, 79 (1988) y el trabajo de R.G. Rehm, H.R. Baum y D.W. Lozier *Diffusion controlled reaction in a vortex field* Combust. Sci. Tech. **66** 293-317 (1989).

utilizar el tratamiento de Burke-Schumann; con lo que la temperatura y concentraciones vendrán dadas por las condiciones de equilibrio (43), en función de la fracción de mezcla  $Z$  y de la entalpía total  $H$ , que siguen las leyes de conservación (35) y (40).

Para simplificar la exposición, empezaremos analizando el caso en que los números de Lewis son iguales a la unidad y las temperaturas iniciales del combustible y del oxidante son iguales a  $T_0$ . Entonces  $H=0$  y  $Z$  viene dada por la ecuación lineal

$$\frac{\partial Z}{\partial t} + \frac{\Gamma}{2\pi r^2} \frac{\partial Z}{\partial \theta} = D_T \left\{ \frac{\partial^2 Z}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial Z}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 Z}{\partial \theta^2} \right\} \quad (A2)$$

a resolver, para  $t>0$ ,  $r>0$ , con la exigencia de que la solución sea  $2\pi$  periódica en  $\theta$ , regular en  $r=0$  y cumpla la condición

$$Z = Z_\infty(\theta) \text{ tanto en } t=0 \text{ como en } r \rightarrow \infty \quad (A3)$$

Aquí  $Z_\infty(\theta)$  es una función  $2\pi$  periódica en  $\theta$  definida por

$$Z_\infty = 1 \text{ para } 0 < \theta < \pi, \quad Z_\infty = 0 \text{ para } \pi < \theta < 2\pi \quad (A3')$$

Por no existir ninguna longitud característica en el problema (A2)-(A3), existe solución autosemejante, en la que  $Z$  es una función sólo de  $\theta$  y de la variable de semejanza

$$\eta = r\sqrt{\Gamma t/2\pi} \quad (A4)$$

$Z(\eta, \theta)$  viene dada por la ecuación

$$-\frac{\eta}{2} Z_\eta + \eta^{-2} Z_\theta = \delta(Z_{\eta\eta} + \eta^{-1} Z_{\eta\theta} + \eta^{-2} Z_{\theta\theta}) \quad (A5)$$

a resolver, para  $\eta \geq 0$ , con la condición de que  $Z$  sea función  $2\pi$  periódica en  $\theta$ , regular en  $\eta=0$  y tal que

$$Z = Z_\infty(\theta) \text{ en } \eta \rightarrow \infty \quad (A6)$$

El número de Peclet

$$\delta^{-1} = \Gamma/2\pi D_T \quad (A7)$$

es el único parámetro que interviene en el sistema (A5)-(A6) que define la

fracción de mezcla. Las relaciones

$$(S\hat{Y}_F + 1)/(S+1) = Z, \hat{Y}_O = 0 \text{ para } Z > Z_s \quad (A8a)$$

$$(1 - \hat{Y}_O)/(S+1) = Z, \hat{Y}_F = 0 \text{ para } Z < Z_s \quad (A8b)$$

donde  $Z_s = 1/(S+1)$  y  $S = s\hat{Y}_{FO}/Y_{\infty}$ . La distribución de temperaturas viene dada por la relación

$$(T - T_e)/(T_e - T_o) = -(\hat{Y}_O + \hat{Y}_F) \quad (A8c)$$

donde  $T_e = T_o + qY_{FO}/c_p(1+S)$ .

Es interesante observar que también encontramos el problema (A5)-(A6) al analizar el proceso estacionario que se establece cuando la capa de mezcla, entre el combustible y el oxidante, está distorsionada por un torbellino y sometida a un flujo de alargamiento de tipo axilsimétrico en la dirección del torbellino. El campo de velocidades estaría dado por  $v_r = -ar/2$ ,  $v_z = az$  y  $v_\theta = \Gamma/2\pi r$ . La ecuación (A5) resulta al medir  $r$  con la longitud característica  $\sqrt{\Gamma/2\pi a}$ , dando lugar a la variable  $\eta = r/\sqrt{\Gamma/2\pi a}$ .

#### A.2. Análisis para números de Peclet grandes

Aunque es posible<sup>77</sup> obtener la solución del problema (A5), (A6) en forma de un desarrollo en serie de Fourier en la variable  $\theta$ , daremos aquí la forma asintótica de la solución para valores grandes, frente a la unidad, del número de Peclet  $\delta^{-1} = \Gamma/2\pi D_T$ ; esto es, para valores de  $\delta \ll 1$ . Este es el caso límite de interés en los flujos turbulentos.

Para valores pequeños de  $\delta$  la mezcla está confinada a capas delgadas de mezcla en torno a las interfases dadas por las espirales

$$\theta - \eta^{-2} = 0 \quad \text{y} \quad \theta - \eta^{-2} = \pi$$

Debido al fuerte enrollamiento de la interfase, para valores pequeños de  $\eta$  los gradientes de concentración radial se hacen muy fuertes, acelerando el proceso de mezcla por difusión en la dirección radial. Para

<sup>77</sup> Como hicieron Rehm y colaboradores, en el trabajo citado antes.

describir este mecanismo, para valores pequeños de  $\eta$ , conviene escribir la ecuación (5) utilizando como variables  $\eta$  y  $\mu$ , definida por

$$\mu = \theta - \eta^{-2} \quad , \quad (A9)$$

Las líneas  $\mu$  constante son las líneas de corriente del campo de velocidades

$$v_r = -\eta/2 \quad , \quad v_\theta = 1/\eta \quad (A10)$$

que corresponde a un torbellino sometido a un flujo de estiramiento en la dirección de su eje.

La ecuación (5) escrita en las variables  $\eta$ ,  $\mu$  toma la forma

$$-\frac{\eta}{2} Z_\eta = \delta \left\{ (4\eta^{-6} + \eta^{-2}) Z_{\mu\mu} + 4\eta^{-3} Z_{\eta\mu} - 4\eta^{-4} Z_\mu + \eta^{-1} Z_\eta + Z_{\eta\eta} \right\} \quad (A11)$$

La solución debe ser  $2\pi$  periódica en  $\mu$ , regular en  $\eta=0$  y con el comportamiento asintótico

$$Z = Z_\infty(\mu) \text{ en } \eta \rightarrow \infty \quad (A12)$$

La condición de regularidad en  $\eta=0$  implica que  $Z \rightarrow 1/2$  para  $\eta \rightarrow 0$ .

En el límite  $\delta \rightarrow 0$ , el término de difusión representado por el segundo miembro de (A11) tiende, formalmente, a cero para  $\eta \sim 1$ ; con lo que se obtiene la ecuación

$$Z_\eta = 0 \quad (A13)$$

que muestra, si hacemos uso de la condición "inicial" (A12), que

$$Z = Z_\infty(\mu) \quad (A14)$$

Los saltos que presenta  $Z_\infty(\mu)$  en las interfases  $\mu=0$  y  $\mu=\pi$ , se suavizan al introducir, para  $\eta \sim 1$ , capas de mezcla de espesor  $\sqrt{\delta}$  en  $\mu$ . Si queremos describir la fracción de mezcla en estas capas, podemos, para  $\eta \sim 1$ , utilizar la siguiente forma simplificada de (A11):

$$-(\eta/2) Z_\eta = \delta (4\eta^{-6} + \eta^{-2}) Z_{\mu\mu} \quad (A15)$$

si olvidamos términos de orden  $\sqrt{\delta}$  y  $\delta$ , por ser pequeños en comparación con

los términos, de orden unidad, del segundo miembro de (A15).

Esta misma ecuación puede ser utilizada para describir  $Z$  para valores más pequeños de  $\eta$ , del orden de  $\delta^{-1/6}$ , cuando el espesor de las capas de mezcla, medido en la variable  $\mu$ , crece hasta valores de orden unidad, con lo que las capas de mezcla vecinas se solapan. Para estos valores pequeños de  $\delta$  los términos no retenidos en (A15) son de orden  $\delta^{-1/3}$  relativos a los retenidos y todavía está justificado utilizar la forma (A15), simplificada de (A11). Es en esta región  $\eta \sim \delta^{1/6}$ , donde se produce la transición entre un núcleo interior donde los reactantes, en ausencia de reacción, estarían bien mezclados y las alas externas de las capas de mezcla donde la difusión sólo afecta a capas delgadas.

La ecuación (A15) puede escribirse en la forma clásica de la ecuación de conducción del calor unidimensional

$$Z_{\tau} = Z_{\mu\mu} \quad (A16)$$

utilizando como variables  $\mu$  y  $\tau$  definida por

$$\tau = \delta\{(4/3)\eta^{-6} + \eta^{-2}\} \quad (A17)$$

La ecuación (16) ha de resolverse exigiendo que  $Z$  sea  $2\pi$  periódica en  $\mu$  y cumpla la condición inicial

$$Z = Z_{\infty}(\mu) \quad \text{en } \tau=0 \quad (18)$$

La solución puede escribirse como superposición de un conjunto infinito de soluciones correspondientes a perfiles iniciales de tipo meseta

$$Z = \sum_{n=-\infty}^{\infty} E\{(\mu-2n\pi)/2\sqrt{\tau}\} \quad (A19)$$

donde

$$2E\{(\alpha)/2\sqrt{\tau}\} = \text{erfc}(-\alpha/2\sqrt{\tau}) - \text{erfc}\{(\pi-\alpha)/2\sqrt{\tau}\} \quad (A20)$$

Los valores máximos y mínimos de  $Z$ , para un valor dado de  $\eta$  (ó  $\tau$ ), se alcanzan en  $\mu=\pi/2$  y  $\mu=3\pi/2$ , respectivamente, y están dados por

$$Z_{\max} = 1 - \text{erfc}(\pi/4\sqrt{\tau}) + \text{erfc}(3\pi/4\sqrt{\tau}) - \dots \quad (A21a)$$

$$Z_{\min} = 1 - Z_{\max} \quad (A21b)$$

La expresión (A19) es particularmente útil para la descripción de la solución para valores pequeños de  $\tau$  (o grandes de  $\eta$ ). Para valores de  $\tau \gg 1$ , es más conveniente escribir la solución en la forma

$$Z - 1/2 = \sum_{m=0}^{\infty} \{2\pi(2m+1)\}^{-1} e^{-(2m+1)^2\tau} \text{sen}\{(2m+1)\mu\} \quad (A22)$$

y en particular,

$$Z_{\min} = 1/2 - \sum_{m=0}^{\infty} (-1)^m \{2\pi(2m+1)\}^{-1} e^{-(2m+1)^2\tau} \quad (A23)$$

Obsérvese que la posición de la llama está dada por la línea de nivel  $Z(\mu, \tau) = Z_s$ , donde  $Z$  está determinada por (A19) ó (A22). La llama de difusión alcanza el centro del torbellino, sólomente en el caso  $Z_s = 1/2$ . Por ejemplo, para valores más pequeños de  $Z_s$  el oxidante se agota antes de alcanzar el núcleo del chorro, donde encontramos una mezcla homogénea del combustible y productos.

La llamada disipación escalar  $D_T |\nabla Z|^2$ , evaluada en la superficie de la llama, proporciona un aspecto importante de la solución, al ser el inverso del tiempo característico local de mezcla.  $|\nabla Z|$  mide la velocidad de combustión por unidad de superficie de llama y por lo tanto los efectos de no-equilibrio químico. Cuando la disipación escalar o  $|\nabla Z|$  superan un valor crítico se produce la extinción local de la llama<sup>78</sup>.

Es fácil mostrar que, para  $\delta \ll 1$  y  $\eta \sim 1$

$$\frac{\Gamma t}{2\pi} |\nabla Z|^2 = \{\eta^{-2} + 4\eta^{-6}\} Z_{\mu}^2 \quad (A24)$$

en tanto que, para  $\delta \ll 1$  y  $\eta \sim \delta^{1/6}$

$$\frac{\Gamma t}{2\pi} |\nabla Z|^2 = 4\eta^{-6} Z_{\mu}^2 \quad (A25)$$

Los valores resultantes de  $|\nabla Z|^2$ , evaluados en la llama,  $Z=Z_s$ , pasan

<sup>78</sup>Véase mi trabajo de 1974, ya citado, y el apartado II.3.

de un valor inversamente proporcional a  $\delta\Gamma t$ , independiente de  $\eta$  cuando  $v \gg 1$ , que toma en las alas de la llama distorsionada por el torbellino, a otro valor también constante (e igual a 3/4 veces el anterior) para valores de  $\delta^{-1/6} \ll \eta \ll 1$ , para terminar cayendo a cero en el núcleo del torbellino cuando  $\tau \gg 1$  por ser  $\eta \leq \delta^{-1/6}$ .

Por ello, a pesar de que la distorsión introducida en la capa de mezcla por el torbellino da lugar a incrementos muy fuertes del área de la interfase ideal entre el combustible y el aire (las superficies  $\mu=0$  y  $\mu=\pi$ ), ésto no implica que la cantidad de combustible quemado localmente por unidad de superficie crezca al acercarnos al núcleo del torbellino, al contrario, ésta decrece hacia el valor cero. Así pues, el peligro de extinción se presentaría en las alas de la llama de difusión y no en el núcleo. Por ello, podemos esperar que en las llamas de difusión turbulenta la extinción se presente antes en las capas de mezcla situadas entre los torbellinos que en el núcleo de los mismos<sup>79</sup>.

### A.3. Efectos de los números de Lewis distintos de la unidad.

Cuando el número de Lewis es distinto de la unidad debemos modificar la ecuación (A2) multiplicando su primer miembro por el factor  $L_e(Z)$ . Esto no invalida la existencia de solución de semejanza;  $Z$  sigue siendo función de  $(\eta, \theta)$  dada por la ecuación (A15) modificada por la introducción del factor  $L_e(Z)$  en el primer miembro de (A5).

La solución asintótica para  $\delta \ll 1$  de este nuevo problema no lineal puede obtenerse análogamente; utilizando las variables  $\tau$  y  $\mu$ , con lo que llegamos a la ecuación

$$L_e(Z)Z_\tau = Z_{\mu\mu} \quad (A26)$$

que sustituye a (A16). La solución debe ser  $2\pi$  periódica en  $\mu$  y cumplir la

<sup>79</sup> Confirmado en un análisis numérico de P. Givi, W. H. Jou y R.W. Metcalfe *Flame extinction in a temporally developing mixing layer*, 21st. Symp. (Int) on Combustion, 1251-1261, The Combustion Institute (1986).

condición inicial (A18). No es posible obtener, en este caso, la solución en forma explícita, por lo que ha de obtenerse numéricamente.

Para valores de  $L_F \neq 1$  ó  $L_O \neq 1$ ,  $H$  deja de ser idénticamente nula. Viene dada por la ecuación

$$\frac{\partial H}{\partial t} + \frac{\Gamma}{2\pi r^2} \frac{\partial H}{\partial \theta} - D_T \left\{ \frac{\partial^2 H}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial H}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 H}{\partial \theta^2} \right\} = -N(Z) \left\{ \frac{\partial Z}{\partial t} + \frac{\Gamma}{2\pi r^2} \frac{\partial Z}{\partial \theta} \right\} \quad (A27)$$

a resolver para  $r > 0$  y  $t > 0$ , con la condición inicial  $H=0$  en  $t=0$  y también  $H=0$  en  $r \rightarrow \infty$ , junto con la exigencia de que  $H$  sea  $2\pi$  periódica en  $\theta$  y regular en  $r=0$ .

También este problema lineal tiene solución autosemejante, con  $H$  función de las variables  $\theta$  y  $\eta$ . La solución asintótica para  $\delta \ll 1$  puede escribirse, utilizando las variables  $\mu$  y  $\tau$ , como la solución del problema

$$H_\tau - H_{\mu\mu} + N(Z)Z_\tau = 0 \quad (A28)$$

a resolver con la exigencia de que  $H$  sea  $2\pi$  periódica en  $\mu$  y cumpla la condición inicial

$$H=0 \text{ en } \tau=0 \quad (A29)$$

La solución del problema (A18) y (A26) para  $Z$  y (A28)-(A29) para  $H$ , que junto con las condiciones de equilibrio (A8) nos proporciona las distribuciones de temperatura y concentraciones de los reactantes, fué obtenida numéricamente por C. Vázquez Espí, para algunos valores representativos de los números de Lewis del combustible y del oxidante y de la relación de equivalencia  $S$ . Algunos resultados se muestran en la figura 5. Es interesante observar que la temperatura en la llama de difusión varía a lo largo de la misma, tendiendo al valor de la llama adiabática cuando las condiciones son tales que la llama alcanza el núcleo del torbellino.

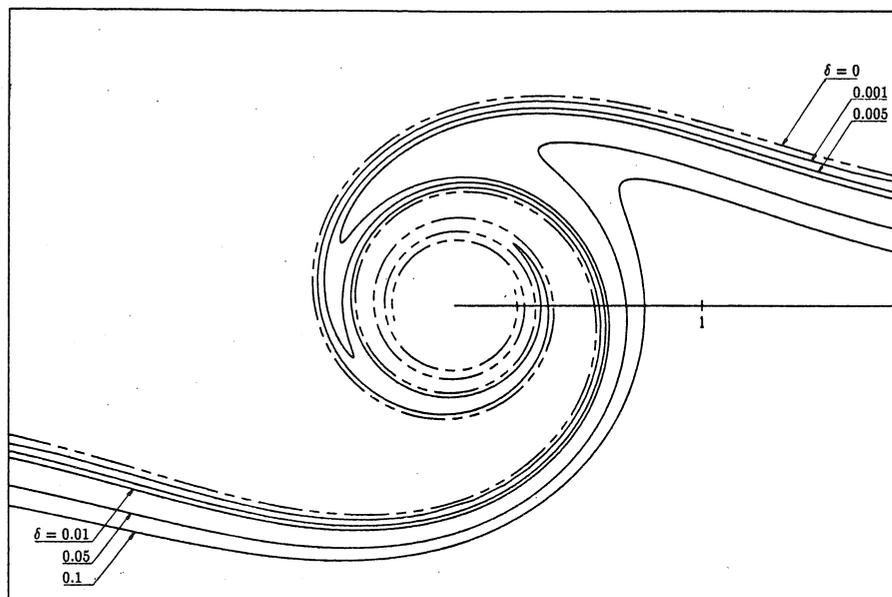


Fig. 5a.- Forma de la llama para  $L_0 = 0.8$ ,  $L_F = 1.5$ ,  $S = 8/3$  y distintos valores del número de Peclet  $1/\delta$ .

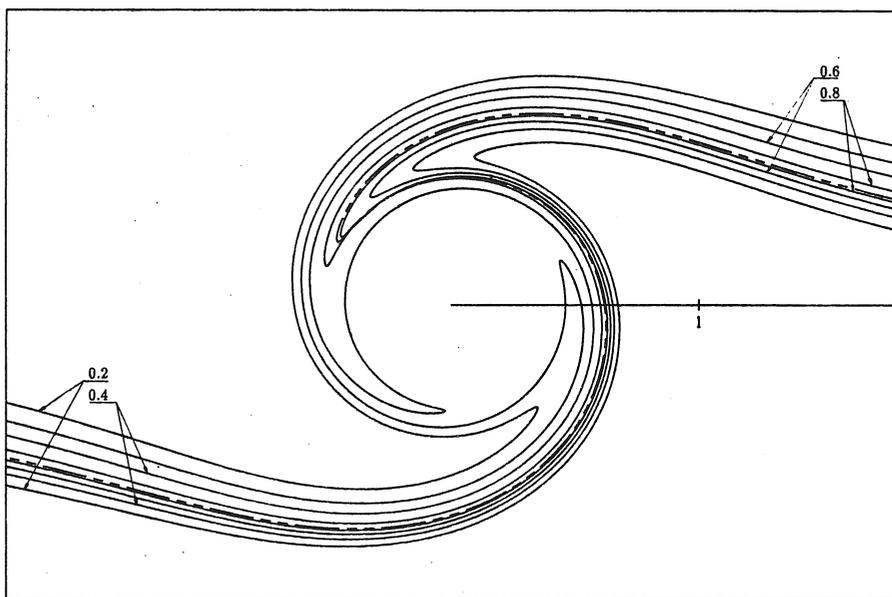


Fig. 5b.- Forma de las isotermas,  $(1 + S)L_F c_p (T - T_{00}) / q Y_{F_0} = \text{cte}$ , y de la llama (---) para  $L_0 = 0.8$ ,  $L_F = 1.5$ ,  $S = 8/3$  y  $\delta = 0.01$

## Apéndice B

### LA ZONA DE ANCLAJE DE LAS LLAMAS DE DIFUSION.

#### B.1. Formulación

El análisis de la zona de Navier-Stokes, donde se ancla la llama de difusión cuando la velocidad de alimentación del combustible no supera un valor crítico, puede hacerse utilizando la aproximación casi-estacionaria. Esto es así, porque el tiempo característico de residencia en la región es, en general, muy pequeño frente al tiempo de variación de la velocidad de inyección. Además, el problema es localmente bidimensional.

Supondremos que la placa que separa el combustible y el oxidante es infinitamente delgada y muy conductora del calor, de modo que su temperatura es constante igual al valor inicial  $T_0$  de la temperatura del aire y del combustible. Utilizaremos un sistema de coordenadas,  $x_1 = x$  e  $y = x_2$ , en dirección de la placa y en dirección normal, respectivamente; de manera que la placa se sitúa en  $y=0$ ,  $x < 0$ . Las componentes respectivas de la velocidad son  $v_1 = u$  y  $v_2 = v$ . Supondremos que el chorro de combustible sale del inyector con un gradiente de velocidades  $a$  en la pared, estando el aire en reposo.

Escribiremos las ecuaciones de conservación en forma adimensional, utilizando  $\delta_N = \sqrt{D_{TO}/a}$  como unidad de longitud y  $U_N = \sqrt{D_{TO} a}$  como unidad de velocidad. Mediremos las temperaturas con  $T_0$  y las densidades con  $\rho_0$ . Supondremos por simplificar la escritura que las difusividades másicas son iguales a la térmica (cuya dependencia con  $T$  es de la forma  $T^{n+1}$ ) y que el número de Prandtl,  $P_r = \mu/\rho D_T$ , es constante, al igual que la masa molecular de la mezcla.

Las ecuaciones, utilizando la notación de subíndices habitual (con  $\nabla = \partial/\partial x$ ), toman la forma:

$$\rho T = 1 \quad (B1)$$

$$\nabla_i(\rho v_i) = 0 \quad (B2)$$

$$\nabla_i\{\rho v_i v_j - P_r T^n (\nabla_i v_j + \nabla_j v_i) + p' \delta_{ij}\} = 0 \quad (B3)$$

$$\nabla_i\{\rho v_i Z - T^n \nabla_i Z\} = 0 \quad (B4)$$

$$\nabla_i\{\rho v_i H - T^n \nabla_i H\} = 0 \quad (B5)$$

$$\nabla_i\{\rho v_i \hat{Y}_F - T^n \nabla_i \hat{Y}_F\} = -\mathcal{D} \hat{Y}_F \hat{Y}_o e^{T_a(T-T_e)/T_e T} \quad (B6)$$

$$Z = (S \hat{Y}_F + 1 - \hat{Y}_o)/(S+1); H = \hat{Y}_F + \hat{Y}_o + (T-T_e)/(T_e-1) \quad (B7)$$

donde aparece el número de Prandtl y los parámetros  $S$  y  $T_e > 1$ , junto con

$$\mathcal{D} = Ba^{-1} Y_{oo} \exp(-T_a/T_e) \quad \text{y} \quad T_a = EIRT_o \quad (B8)$$

número de Damköhler y temperatura de activación adimensional, respectivamente.

Estas ecuaciones han de integrarse utilizando como condiciones de contorno: En el lado del aire,  $y \rightarrow \infty$  (y también para  $y > 0, x \rightarrow -\infty$ )

$$\hat{Y}_F = \hat{Y}_o - 1 = T - 1 = 0, \quad u = v = p' = 0 \quad (B9)$$

En el lado del combustible,  $y \rightarrow -\infty$  (y también para  $y < 0, x \rightarrow -\infty$ )

$$\hat{Y}_F - 1 = \hat{Y}_o = T - 1 = 0, \quad v = u + y = p' = 0 \quad (B10)$$

En la pared

$$x < 0; y = 0: T = 1, u = v = 0, \partial \hat{Y}_F / \partial y = \partial \hat{Y}_o / \partial y = 0 \quad (B11)$$

(Si la placa separadora estuviese aislada térmicamente, la condición  $T = 1$  en la pared se substituiría por la condición  $\partial T / \partial y = 0$ , con lo cual  $H$  resultaría  $H = 0$ . Sin embargo, en el caso no adiabático  $H < 0$ , de orden unidad en la región de anclaje). Las sobrepresiones  $p'$  (que incluyen los esfuerzos de tipo presión asociados a la viscosidad volumétrica) se miden con  $\rho_o D_{To} a$ , y tienden a cero cuando nos alejamos de la región de Navier-Stokes.

Nótese que, si la placa separadora tuviese un espesor grande frente a  $\delta_N = \sqrt{D_{To}/a}$ , tamaño de la región de Navier-Stokes, el sistema de ecuaciones sería de aplicación a la región exterior al cuadrante  $x < 0, y > 0$ , ocupado por el sólido. A las condiciones de contorno (B11), en la superficie  $0 < x, y = 0$ , habría que añadir las condiciones

$$y > 0, x = 0: u = v = T - 1 = 0, \partial Y_F / \partial x = \partial Y_o / \partial x = 0 \quad (B11')$$

## B.2. Comportamiento asintótico de la solución

Nótese, también, que las distribuciones (10) y (11) son soluciones exactas del problema (para  $y < 0$  e  $y > 0$ , respectivamente) que, si bien cumplen las condiciones de contorno en la placa  $y = 0, x < 0$ , no tienen la regularidad necesaria en  $x > 0, y = 0$ . Si eliminamos los efectos viscosos y de difusión, responsables de la regularidad, las expresiones (B10) y (B11) nos dan la solución exacta al problema de Euler, solución que incluye una superficie ( $x > 0, y = 0$ ) de discontinuidad de concentraciones y esfuerzos viscosos.

Los efectos viscosos y de conducción juegan un papel esencial en la región de Navier-Stokes, donde  $x$  e  $y$  son de orden unidad, y en la capa límite viscosa y de mezcla, que llamamos de Goldstein<sup>80</sup>. Para valores grandes de  $x$ , la región de mezcla es una capa, situada en torno a la superficie  $y = 0$ , que aparece como delgada cuando se observa con la longitud  $x$ , pues su espesor crece como  $x^{1/3}$ . En esta capa, para  $x \gg 1$ , las distribuciones de temperatura y concentraciones están bien descritas por la forma simplificada de las ecuaciones correspondiente a la teoría de la capa límite. Además, si el número de Damköhler  $\mathcal{D}$ , característico de la región de Navier-Stokes, es de orden unidad, el número de Damköhler efectivo para la nueva región es,  $\mathcal{D} x^{2/3}$ , grande y, por lo tanto, en ella podemos utilizar la aproximación de Burke-Schumann; lo que haremos en lo

<sup>80</sup>Ver el trabajo, ya citado, de S. Goldstein.

que sigue.

La solución asintótica para valores de

$$x \gg 1, \eta = y/\sqrt[3]{x} = O(1) \quad (B12)$$

toma la forma límite

$$x^{-1/3} u = U(\eta), \quad x^{1/3} v = V(\eta), \quad Z = Z(\eta) \quad (B13)$$

siendo  $\rho$  y  $T$  también funciones de  $\eta$ . Las sobrepresiones que encontramos para  $x \gg 1$  decaen como  $x^{-2/3}$  y no intervienen en la determinación de las variables  $U, V, Z$ . Estas, a la vista de las ecuaciones (B2) a (B3) y del comportamiento asintótico (B13), vienen dadas por el sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias

$$\rho U - \eta(\rho U)_{\eta} + 3(\rho V)_{\eta} = 0 \quad (B14)$$

$$\rho U \{U - \eta U_{\eta}\} + 3\rho V U_{\eta} = 3P_r (T^n U_{\eta})_{\eta} \quad (B15)$$

$$\rho U \{-\eta Z_{\eta}\} + 3\rho V Z_{\eta} = 3(T^n Z_{\eta})_{\eta} \quad (B16)$$

En esta región,  $H$  es nula en primera aproximación; pues los efectos de la pérdida de calor hacia la placa separadora, que dan a  $H$  valores negativos de orden unidad en la región de Navier-Stokes, conducen a valores de  $H$  que para  $x \gg 1$  son de orden  $x^{-2/3}$ .

Por otra parte, el número de Damköhler efectivo para esta región (relación entre el tiempo de residencia,  $x/x^{1/3}$ , y el tiempo químico  $\mathcal{O}^{-1}$ ) es  $x^{2/3} \mathcal{O} \gg 1$  si suponemos que  $\mathcal{O}$  es de orden unidad. Como consecuencia, en esta capa de mezcla, para  $x \gg 1$  y  $\eta \sim 1$ , podemos escribir

$$H = \hat{Y}_F + \hat{Y}_O + (T - T_e)/(T_e - 1) = 0 \quad (B17)$$

junto con las condiciones de equilibrio de Burke-Schumann

$$\hat{Y}_F = 0 \text{ en } Z > Z_s; \quad \hat{Y}_O = 0 \text{ en } Z < Z_s = 1/(S+1) \quad (B18)$$

Así pues, (B17) y (B18) determinan  $T$  y  $\rho = 1/T$  como funciones de  $Z$ .

$$1/\rho = T = 1 + (T_e - 1)Z/Z_s, \text{ si } Z \leq Z_s \quad (B19a)$$

$$1/\rho = T = 1 + (T_e - 1)(1 - Z)/(1 - Z_s), \text{ si } Z \geq Z_s \quad (B19b)$$

Si llevamos estas relaciones (B19) al sistema (B14)-(B15) obtenemos un sistema de tres ecuaciones con tres incógnitas, que debemos integrar con las condiciones de contorno

$$\eta \rightarrow \infty : Z = U = 0 \quad (B20)$$

$$\eta \rightarrow -\infty : Z - 1 = U - \eta = V = 0 \quad (B21)$$

Nótese que, aunque suponemos que las perturbaciones de la velocidad en la corriente de combustible decaen a cero cuando  $-\eta = -y/x^{1/3}$  se hace grande frente a la unidad, no podemos pedir lo mismo a la pequeña velocidad transversal  $v$  en el lado del aire. Al resolver el sistema de ecuaciones (B14)-(B16) y (B19), con las condiciones (B20) y (B21), hemos de esperar encontrar un valor  $V_{\infty}$  (no nulo y posiblemente negativo), de  $V$  en  $\eta \rightarrow \infty$ ; de manera que  $-V_{\infty} x^{-1/3}$  es la velocidad de ingestión de aire por la capa de mezcla.

El movimiento producido en la zona del aire,  $y > 0$ , fuera de la región de Navier-Stokes y de la capa de mezcla, asociado a la ingestión de aire por la capa, es irrotacional; siendo la función de corriente

$$\psi = \sqrt{3} V_{\infty} r^{2/3} \text{sen}(2\theta/3) \quad (B22)$$

donde  $r^2 = (x^2 + y^2)$  y  $\theta = \text{arc tg}(y/x)$  es el ángulo del radio vector de posición con el eje ( $-x$ ). A partir de  $\psi$  podemos calcular las componentes de la velocidad, en la forma  $u = \psi_y, v = -\psi_x$ . Las sobrepresiones  $p'$  resultantes son, negativas, del orden de  $r^{-2/3}$ ; dadas por  $p' + (u^2 + v^2)/2 = 0$ .

La solución irrotacional da una velocidad de deslizamiento  $u = -(2V_{\infty}/\sqrt{3})(-x)^{-1/3}$  sobre la placa. Por ello, también encontramos una capa límite viscosa (de tipo Falkner-Skan), adyacente a la placa en el lado del aire, donde  $u$  debe caer al valor cero; su espesor varía como  $(-x)^{2/3}$ .

### B.3. Unicidad y multiplicidad de la solución

En la solución del problema matemático planteado por el sistema de ecuaciones (B1)-(B11), intervienen el número de Prandtl  $P_r$  (0,73 para el aire) y los parámetros termoquímicos  $T_e$  (temperatura de la llama adiabática, referida a la temperatura inicial de los reactantes) y  $S$  (que a veces llaman relación de equivalencia); además, intervienen los parámetros de carácter cinético  $\mathcal{D}$  (número de Damköhler) y  $\beta_e = T_a(T_e - 1)/T_e$  (número de Zel'dovich). No parecen tareas fáciles ni la demostración matemática de la existencia y unicidad del problema (B1)-(B11) ni su solución numérica.

Hago aquí la conjetura de que cuando el parámetro de Zel'dovich  $\beta_e$  es inferior a un valor crítico,  $\beta_e < \beta_{ec}$ , el problema tiene solución única para todo valor de  $\mathcal{D}$ . Sin embargo, si  $\beta_e > \beta_{ec}$  el problema tiene solución única para valores de  $\mathcal{D} < \mathcal{D}_L \sim (T_a/T_e)^3$ , existen tres soluciones en el intervalo  $\mathcal{D}_L < \mathcal{D} < \mathcal{D}_U$  y la solución también es única para valores  $\mathcal{D} < \mathcal{D}_U$ . Los valores extremos del intervalo de multiplicidad,  $\mathcal{D}_L$  y  $\mathcal{D}_U$ , dependen de  $\beta_e$ ,  $T_e$ ,  $S$  y  $P_r$ .

Para valores de  $\beta_e \gg 1$ , podemos ayudarnos de estimaciones de órdenes de magnitud para anticipar que si

$$\mathcal{D} \exp\{-T_a(T_e - 1)/T_e\} \gg 1 \quad (B23)$$

la reacción estará controlada por la difusión, de manera que la llama de difusión alcanza la placa, sin existencia de una zona de mezcla con la reacción congelada. En el caso límite opuesto

$$\mathcal{D} \ll 1 \quad (B24)$$

el origen de la llama de difusión se encontrará aguas abajo de la región de Navier-Stokes, donde  $x \gg 1$ .

Para valores intermedios de  $\mathcal{D}$  tales que  $T_c$  definido por<sup>81</sup>

$$(T_c/T_a)^3 \mathcal{D} \exp\{-T_a(T_e - T_c)/T_e T_c\} = 1 \quad (B25)$$

cumple la condición  $1 < T_c < T_e$ , existe una solución en la que encontramos una llama triple en la zona de Navier-Stokes, con el vértice tanto más próximo a la placa cuanto mayor sea  $T_c$ . Esta solución desaparece para  $\mathcal{D} < \mathcal{D}_L \sim (T_a/T_e)^3$ , cuando  $T_c$  supera al valor  $T_e$ . Para valores próximos a  $\mathcal{D}_L$  la solución anterior coexiste con otra solución intermedia, inestable, también de tipo llama triple; ésta última está situada, todavía en la región de Navier-Stokes, pero más lejos de la placa.

La solución intermedia, para valores de  $\mathcal{D} \gg \mathcal{D}_L$ , se sitúa donde la velocidad de propagación del frente de llama triple (que es del orden de la velocidad de la onda de deflagración en una mezcla estequiométrica) coincide en orden de magnitud con la velocidad típica en la capa de mezcla. Esta última es del orden de  $x^{1/3}$  y la del frente del orden de  $(\mathcal{D}/\beta_e^3)^{1/2}$ , cuando ambas se miden con la escala  $\sqrt{D_{TO} a}$ . Así pues, la llama triple se situará en  $x = x_T$ , dada en orden de magnitud, por

$$x_T = (\mathcal{D}/\beta_e^3)^{3/2} \quad (B26)$$

Por otra parte, para valores no muy grandes de  $\mathcal{D}$  existe otra solución en que la conducción de calor y la difusión aguas arriba no cuentan en una región inicial de extensión  $x_I \gg 1$ . En esta región los efectos de la reacción química, junto con los de convección y difusión transversal, terminan produciendo, como en el análisis ya citado de Liñán y Crespo (1976), la ignición "espontánea", después de un tiempo de residencia,  $x_I/x_I^{1/3}$ , igual, en orden de magnitud, al tiempo de explosión térmica  $T_a^{-1} \mathcal{D}^{-1} \exp\{T_a(T_e - 1)/T_e\}$  a la temperatura inicial.

$$x_I = \{T_a^{-1} \mathcal{D}^{-1} \exp\{T_a(T_e - 1)/T_e\}\}^{3/2} \quad (B27)$$

En  $x = x_I$  se produce un crecimiento brusco de la temperatura en un punto,  $\eta = \eta_I$ , de la capa de mezcla, dando origen a dos ondas de deflagración, que tienen velocidades de avance respecto al fluido del

<sup>81</sup>El primer factor en (B25) se incluye para tener en cuenta el orden de magnitud de las fracciones másicas en la zona de reacción y del espesor de la misma, ambos del orden de  $T_c/T_a$ .

orden de  $(\mathcal{D}/\beta_e^3)^{1/2}$ ; éstas deben ser, en ese punto de la capa de mezcla, inferiores a la velocidad local del fluido, que es del orden de  $x_1^{1/3}$ , para que la difusión longitudinal en  $x < x_1$  sea despreciable. Por ello, para que exista esta solución, correspondiente al régimen de ignición espontánea, debe verificarse, de acuerdo con (B27), que

$$\mathcal{D} < \mathcal{D}_U = \beta_e^{3/2} T_a^{-1/2} \exp\{T_a(1-1/T_e)/2\} \quad (B28)$$

En resumen, para valores de  $\mathcal{D}$  superiores a  $\mathcal{D}_U$  la solución de tipo ignición espontánea no existe. La llama triple aparecerá anclada en la zona de Navier-Stokes, o si  $\mathcal{D}$  cumple la condición (B23) la reacción estará controlada por la difusión en todas partes. Si  $\mathcal{D}_L < \mathcal{D} < \mathcal{D}_U$ , hay dos modos estables de combustión: uno con una llama triple anclada en la zona de Navier-Stokes y otro modo en que la llama triple se genera por ignición espontánea a una distancia  $x_1 \gg l$  de la placa. Sólo encontraremos el primer modo si hemos producido la ignición artificialmente, calentando localmente la capa de mezcla, por ejemplo, mediante una chispa; así iniciamos una onda de deflagración que extiende la combustión al resto de la capa. La chispa habrá de situarse en una posición  $x < x_1$ , aguas arriba de la posición del frente de llama en la solución (inestable) intermedia, dada por (B26), si queremos que, después del transitorio, la llama triple se ancle en la región de Navier-Stokes; de otro modo la onda de deflagración generada es barrida aguas abajo por la corriente.

#### B.4. Análisis del calentamiento del combustible en el inyector

Afortunadamente, no es difícil el análisis del transporte, aguas arriba, del calor recibido desde la llama por el inyector, si suponemos sus paredes delgadas. Por ser metálico el inyector, su coeficiente de conductividad calorífica  $k_s$  es muy superior al  $k_o$  correspondiente del gas; el calor que llega al inyector desde la llama se transmite eficazmente por las paredes metálicas del inyector de modo que su temperatura  $T_s$ , casi uniforme transversalmente a la pared, varía sólo con la distancia  $x_1 = -x$

al extremo del inyector. Esta temperatura es superior a la temperatura inicial  $T_o$  del combustible y del aire, por lo que la placa pierde calor hacia ambos; si bien, la mayor parte del calor va hacia el combustible, dado que éste tiene una velocidad muy superior a la del aire.

La corriente de combustible se calienta mediante este proceso en una capa térmica de espesor grande frente a la dimensión característica  $\delta_N$  de la región de anclaje. Por ello, el análisis de esta zona debe modificarse; pues ya no podemos escribir que es  $T_o$  la temperatura de la pared y de la corriente de combustible. Debemos escribir  $T = T_p = T_s(o)$ , tanto para la temperatura de la pared como para la temperatura en el lado del combustible (en  $x \rightarrow \infty$ ,  $y < 0$ , y también en  $y \rightarrow \infty$ ). La condición en el lado del aire se mantiene en la forma:  $T = T_o$  en  $y \rightarrow \infty$ ; pues al ser el movimiento, en esta zona, no forzado sino inducido, el calentamiento por la placa, cuando nos alejamos de la zona de anclaje, sólo afecta a una capa límite delgada, a través de la cual  $T$  pasa de  $T_s$  a  $T_o$ .

Para analizar el proceso de conducción de calor a lo largo del inyector, empezaremos escribiendo la ecuación de balance térmico para el inyector, admitiendo (lo que es fácilmente justificable) que su temperatura  $T_s$  es uniforme a través de la pared, función de  $x_1$  dada por la ecuación

$$\frac{d}{dx_1} \left[ k_s d_s \frac{dT_s}{dx_1} \right] - k_o \left[ \frac{\partial T}{\partial r} \right]_{r=a_1} = 0 \quad (B29)$$

que indica que la variación con  $x_1$  del flujo de calor en el inyector se debe al calor perdido, por unidad de superficie, hacia el combustible. En (B29),  $d_s$  es el espesor de la pared del inyector, que en adelante supondremos constante.

Para calcular este calor hemos de analizar el transporte de calor en el gas. Supondremos, al hacer este análisis, que la conductividad de calor  $k_o$  y el calor específico  $c_p$  del gas son constantes; también supondremos constante la densidad  $\rho_o$  de la corriente combustible. (Estas

aproximaciones están bien justificadas cuando el valor resultante de  $T_p - T_o$  es pequeño frente a  $T_o$ . La ecuación de la energía para la corriente de combustible en el inyector, de radio  $a_1$ , toma la forma

$$-2U_F \{1 - (r/a_1)^2\} \frac{\partial T}{\partial x_1} = D_{TO} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[ r \frac{\partial T}{\partial r} \right] \quad (B30)$$

donde suponemos un flujo de Poiseuille, con una velocidad media  $U_F$ ;  $D_{TO} = k_o / \rho_o c_p$  es la difusividad térmica.

La ecuación (B30) ha de resolverse, para  $0 < r < a_1$ ,  $x_1 > 0$ , con las condiciones de contorno

$$T = T_o \quad \text{en } x_1 \rightarrow \infty, \quad 0 < r < a_1 \quad (B31)$$

$$T = T_s(x_1) \quad \text{en } r = a_1 \quad (B32)$$

donde  $T_s(x_1)$  viene dada por la solución de (B29). Por último, debemos añadir la condición

$$\frac{\partial T}{\partial r} = 0 \quad \text{en } r = 0 \quad (B33)$$

para asegurar la regularidad de la temperatura en  $r=0$ .

La ecuación (B29) ha de ser acompañada por las condiciones

$$T_s = T_p \quad \text{en } x_1 = 0, \quad T_s = 0 \quad \text{en } x_1 \rightarrow \infty \quad (B34)$$

Supondremos, por el momento que  $T_p$  es dato. Una vez obtenida la solución del problema (B29)-(B34), podremos calcular

$$q_p = -k_s d_s \left[ \frac{\partial T_s}{\partial x_1} \right]_o \quad (B35)$$

que identificaremos con el calor  $q_{gp}$ , del orden de  $k_o(T_e - T_p)$ , que llega al inyector, por unidad de longitud del borde, desde la zona de anclaje. Así obtenemos una relación que nos permitirá calcular  $T_p$ .

El carácter lineal del problema, unido al carácter parabólico (en la dirección  $-x_1$ ) de (B30), nos indica que la dependencia de tanto  $(T_s - T_o)$  como de  $(T - T_o)$  con  $x_1$  es exponencial, de la forma

$$T_s - T_o = (T_p - T_o) \exp(-x_1/l_p) \quad (B36)$$

$$T - T_o = (T_p - T_o) \exp(-x_1/l_p) f(r_1) \quad (B37)$$

donde  $l_p$  es la longitud característica de penetración (aguas arriba) de los efectos de la conducción de calor. Esta longitud, al igual que la función  $f$  de la variable radial  $r_1 = r/a_1$ , ha de obtenerse como parte de la solución.

Si llevamos estas expresiones a las ecuaciones (B30) y (B29) obtenemos

$$\frac{2U_F a_1^2}{D_{TO} l_p} (1 - r_1^2) f = \frac{1}{r_1} \frac{d}{dr_1} \left[ r_1 \frac{df}{dr_1} \right] \quad (B38)$$

$$a_1 d_{sp}^{-2} (k_s/k_o) \cdot \left[ \frac{df}{dr_1} \right]_1 = 0 \quad (B39)$$

La ecuación (B38) ha de integrarse, para  $0 < r_1 < 1$ , con las condiciones

$$df/dr_1 = 0 \quad \text{en } r_1 = 0 \quad (B40)$$

$$f = 1, \quad df/dr_1 = f'_1 \quad \text{en } r_1 = 1 \quad (B41)$$

donde

$$a_1 d_{sp}^{-2} (k_s/k_o) = f'_1 \quad (B42)$$

La ecuación (B38) puede escribirse en la forma

$$\Omega \sqrt{f'_1} (1 - r_1^2) f = \frac{1}{r_1} \frac{d}{dr_1} \left[ r_1 \frac{df}{dr_1} \right] \quad (B43)$$

donde interviene el parámetro

$$\Omega = 2U_F a_1^2 / D_{TO} \sqrt{d_s a_1 k_s / k_o} \quad (B44)$$

En el problema (B43), (B40) y (B41) aparece el autovalor  $f'_1$  que debemos determinar como función de  $\Omega$ . El Profesor M. Rodríguez ha resuelto numéricamente este problema; en la Figura 6 está representada la función  $f'_1(\Omega)$  resultante. A partir de  $f'_1$  podemos calcular  $l_p$  con ayuda de (B42) y

a continuación

$$q_p = k_s d (T_p - T_o) / l = \sqrt{f_1'} (k_o k_s d / a_1)^{1/2} (T_p - T_o) \quad (B45)$$

En la mayor parte de los casos prácticos encontramos valores de  $\Omega \gg 1$ , para los cuales la capa térmica en el combustible es delgada, de espesor  $\delta a_1$  pequeño frente al radio  $a_1$  del inyector. Para resolver el problema anterior en el caso límite  $\Omega \gg 1$ , introducimos en (B40), (B41) y (B43) la nueva variable dependiente  $\eta$  definida por  $l-r=\eta\delta$ ; con lo que, anticipando que  $\delta \ll l$ , obtenemos el problema simplificado:

$$f_{\eta\eta} = \eta V \quad (B46)$$

$$f(0) = 1, \quad f(\infty) = 0 \quad (B47)$$

si definimos  $p = -f_{\eta}$  y hacemos cumplir las relaciones

$$\delta^3 2\Omega \sqrt{f_1'} = 1, \quad f_1' = (2\Omega)^{2/5} p^{6/5} \quad (B48)$$

La solución de la ecuación de Airy (B46) puede escribirse, si usamos las condiciones (B47), en la forma  $f = Ai(\eta)/Ai(o)$ . Con ello, obtenemos para  $p$  el valor 0.729; por lo que

$$f_1' = 0.903 \Omega^{2/5} \text{ para } \Omega \gg 1 \quad (B49)$$

En el caso límite opuesto  $\Omega \ll 1$ , podemos utilizar los desarrollos

$$f = 1 + \Omega^2 \varphi(r_1) + \dots, \quad f_1' = \Omega^2 \varphi_1' + \dots$$

en (B43), (B40) y (B41), para obtener la ecuación

$$\frac{1}{r_1} \frac{d}{dr_1} \left[ r_1 \frac{d\varphi}{dr_1} \right] = \sqrt{\varphi_1'} (1 - r_1^2) \quad (B50)$$

a resolver con las condiciones

$$d\varphi/dr_1 = 0 \text{ en } r_1 = 0 \quad (B51)$$

$$\varphi = 0, \quad d\varphi/dr_1 = \varphi_1' \text{ en } r_1 = 1 \quad (B52)$$

Una primera integración de (B50) nos proporciona

$$\frac{d\varphi}{dr} = \sqrt{\varphi_1'} (r_1/2 - r_1^3/4) \quad (B53)$$

con lo que, a la vista de (B52), obtenemos  $\sqrt{\varphi_1'} = 1/4$ . Así pues,

$$f_1' = \Omega^2/16 \text{ para } \Omega \ll 1 \quad (B54)$$

Por último, si escribimos el calor  $q_{gp}$  que llega al inyector desde la llama en la forma  $q_{gp} = v (T_e - T_p) k_o$ , donde  $v$  es de orden unidad, y lo identificamos con el valor  $q_p$ , dado por (B45), obtenemos la relación

$$(T_p - T_o)/(T_e - T_p) v = \sqrt{(k_o/k_s)(a_1/d_s)} \sqrt{f_1'} \quad (B55)$$

que permitiría calcular, si conociésemos  $v$  (o, en caso contrario, al menos estimar) el incremento de temperatura  $(T_p - T_o)$ ; éste, en la mayoría de los casos prácticos, resulta pequeño frente a  $(T_e - T_o)$ , por ser  $k_o/k_s \ll 1$ . El valor preciso de  $v$  resulta del análisis numérico del problema de la zona de anclaje.

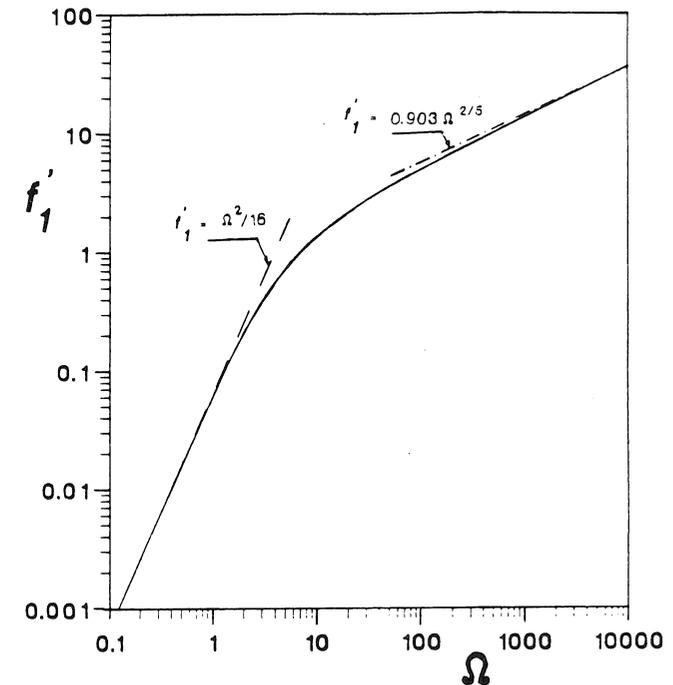


Fig. 6.-  $f_1'$  en función de  $\Omega$

DISCURSO DE CONTESTACION  
del  
EXCMO.SR. D. GREGORIO MILLAN BARBANY

Excelentísimo Sr. Presidente,  
Excelentísimos Sres. Académicos,  
Señoras y Señores :

He tenido el privilegio de conocer a Amable Liñán y la satisfacción de gozar de su amistad desde los primeros pasos de su brillante carrera académica a la que hoy rendimos homenaje en este acto de recepción que estamos celebrando.

Y deseo empezar dejando constancia de mi reconocimiento a la Academia por haberme designado para contestar al excelente discurso del beneficiario que acabamos de escuchar, sin duda en consideración a la proximidad de los campos de actividad donde ambos hemos trabajado y a los lazos de afecto que nos unen desde hace tanto tiempo, a los que evidentemente no son ajenas algunas de sus apreciaciones sobre mis trabajos.

En efecto; primero como alumno distinguido en la Cátedra de Mecánica de Fluidos donde años más tarde habría de sucederme; luego como investigador dedicado e imaginativo en el Grupo de combustión que habíamos formado en el INTA; finalmente, en mi condición de testigo complacido ante sus progresos, he vivido de cerca y con admiración creciente el infatigable esfuerzo de una ejemplar vocación académica sin fisuras, consagrada íntegramente y con gran aprovechamiento intelectual, durante treinta años, a las muy nobles tareas de la enseñanza superior y la investigación científica.

Porque, nada más titularse, en 1960, inició el Profesor Liñán ambas actividades; en la Escuela Técnica Superior de Ingenieros Aeronáuticos de Madrid, donde hoy desempeña la Cátedra de Mecánica de Fluidos y dirige el Departamento de Motopropulsión y Termofluidodinámica, y simultáneamente

en el Instituto Nacional de Técnica Aeroespacial Esteban Terradas, donde trabajó como Ingeniero Investigador durante 15 años, hasta que en 1975 decidió concentrar todas sus actividades en la Escuela.

Desde entonces ha extendido repetidamente sus actividades docentes e investigadoras a otros centros nacionales y extranjeros como la Universidad de Marsella, la Autónoma de Méjico y las de Michigan, California y Princeton en los Estados Unidos de América. Y como la Agencia Europea del Espacio, el Centro ARNOLD de Investigación y Desarrollo Aeronáutico y la Oficina de Investigación Científica de las Fuerzas Aéreas de los Estados Unidos de América, el Servicio Forestal del mismo país, o el Instituto de Estudios Nucleares del nuestro.

El fruto de su fecundo trabajo ha quedado reflejado en la excelente formación de las numerosas promociones que año tras año han desfilado por su cátedra, algunos de cuyos más brillantes alumnos, que él mismo cita, decidieron seguir las huellas de su maestro; en las más de 60 comunicaciones propias o en colaboración con otros científicos nacionales y extranjeros, publicadas en las más prestigiosas revistas de la especialidad, de todo el mundo, así como en una veintena de Informes científicos y en más de un centenar de Trabajos presentados en numerosos Congresos y Reuniones internacionales.

Todo lo cual hace que Amable Liñán sea desde hace tiempo una autoridad mundialmente reconocida y altamente considerada en su especialidad, cuya colaboración se busca y con quien es necesario contar al evaluar el estado de los conocimientos en ella así como las direcciones en que debe trabajarse para extenderlos.

Por ello, al felicitarle con la mayor efusión por su incorporación a la Real Academia de Ciencias de la que ya era miembro correspondiente desde 1984, así como de la Nacional de Ingeniería de Méjico desde dos años antes, creo que también debemos felicitarnos nosotros por lo que su presencia aporta a la Corporación.

Tanto más al considerar que el Profesor Liñán, a los 56 años de edad, está en la plenitud de sus capacidades y conociendo bien el rigor con que se obliga a sus deberes, resulta fácil augurar una espléndida y fecunda contribución del recipientario a las tareas de la Academia.

Me parece que esta brevísima síntesis de lo que es y representa científicamente Amable Liñán, contesta sobradamente a su perplejidad, cuando se cuestiona los motivos de la Academia para llamarle a su seno. Los cuales no están naturalmente, como él insinúa, en la comunidad aeronáutica con su predecesor en la medalla : el Profesor Lafita, que por cierto también poseía las especialidades naval e industrial y cultivó con éxito las tres ramas de la Ingeniería; sino en el plausible deseo de reunir, según suele hacer, a quienes por su saber y dedicación, como ocurre en el caso del Profesor Liñán, mejor puedan servir los fines de la Academia. Procurando cubrir, naturalmente, el más amplio espectro de conocimientos de las Ciencias Matemáticas, Físicoquímicas y Naturales y de sus aplicaciones.

Refiriéndose a mi Nota necrológica en esta Casa, cuando tuvimos la desgracia de perder al Profesor Lafita, Amable Liñán recuerda que, en mi opinión, "la Ciencia no era en sí misma el objeto de la preocupación de Felipe Lafita, salvo en la medida en que fundamenta el inteligente ejercicio y desarrollo de la Ingeniería".

Si esto fue así de Lafita, creo que de él, por el contrario, puede predicarse una actitud radicalmente opuesta. Porque entiendo que para Amable Liñán lo esencial es la comprensión científica del proceso que analiza; cómo actúan en él las leyes que lo gobiernan; cuales son los instrumentos teóricos y experimentales, hoy tan poderosos, que mejor permitirán esclarecerlo y qué consecuencias básicas se derivan de los resultados. Si bien todo ello referido, en general, a cuestiones de gran interés técnico para multitud de aplicaciones. Como son, por ejemplo, las que corresponden a los complejos procesos de la combustión. Los cuales

han ocupado predominantemente, pero no en exclusiva, como se comprueba al consultar sus referencias, la fecunda actividad investigadora que ha desarrollado y centran el contenido de la extensa y sugestiva disertación que acaba de presentarnos. Incluidas materias de tan acuciante actualidad como los incendios forestales; la combustión supersónica, de cuya viabilidad práctica dependen algunos de los más ambiciosos proyectos aeroespaciales; la microgravedad, uno de los más prometedores recursos que se contemplan para las futuras aplicaciones industriales del espacio, o la fusión nuclear en el campo de la energía.

Es decir, la actitud que típicamente corresponde al ejercicio de la Investigación Aplicada en su más pura manifestación.

El Discurso de Ingreso, algunos de cuyos fragmentos acabamos de escuchar, constituye una muestra plausible de cuanto acabamos de exponer.

Empezando por sus cualidades didácticas que aciertan a combinar del modo más sugestivo la claridad en la ilustración de los procesos y de sus causas profundas, al mismo tiempo que estimula el deseo de penetrar más profundamente en el conocimiento de los mismos. Inquietud de la que se nutre un aprendizaje eficaz y que en cierta medida desvela la doble clave del éxito científico y docente de Liñán.

El contenido propiamente científico del discurso puede organizarse en tres niveles de extensión decreciente, que corresponden respectivamente a la Mecánica de Fluidos en su sentido más amplio, aunque con un acento especial en los procesos reactivos; dentro de éstos, a los de combustión más específicamente y, por último, a las llamas de difusión, donde la contribución científica de Liñán ha sido singularmente relevante.

El primer nivel se manifiesta explícitamente en la excelente formulación de las Ecuaciones de la Mecánica de Fluidos Reactivos con que abre la segunda parte del discurso; en el análisis de sus condiciones de aplicabilidad y en el estudio y significación de los numerosos parámetros

adimensionales propios de estos fenómenos, que tan singular importancia tienen para la caracterización y el estudio de los mismos. Desde el clásico número de Reynolds, de habitual protagonismo, como el de Mach, en los procesos más familiares, hasta los menos frecuentes, pero esenciales en los procesos reactivos, entre los que destacan por ejemplo, los números de Damköhler y otros, cuyos intervalos de valores condicionan esencialmente las peculiaridades del fenómeno y las posibilidades de su tratamiento matemático. Es en torno a este punto, sobre el que también abunda de forma magistral en la primera sección de su discurso, donde gravita una gran parte de los planteamientos de Liñán.

Quien, al filo de la complejidad propia de los procesos de combustión, a la que consagra la primera parte del discurso, se extiende ampliamente sobre materias cruciales y de la mayor dificultad de la Mecánica de Fluidos, como son la Teoría de la Turbulencia y el cambio de perspectiva que ha introducido para su tratamiento el descubrimiento en 1971 de las estructuras coherentes, junto a la de la Estabilidad Fluidodinámica; así como sobre los instrumentos matemáticos que permiten investigar muchos de los procesos más complejos, entre los que subraya el fecundo método de los desarrollos asintóticos acoplados, del que tan hábil utilización ha sabido hacer uso en sus investigaciones.

Especial referencia merece en este contexto el difícil problema de la Turbulencia, que ha concertado desde hace un siglo el esfuerzo de las más preclaras inteligencias consagradas al estudio de la Mecánica de Fluidos, porque, como es bien sabido, la práctica totalidad de los procesos de combustión tiene lugar bajo las condiciones del régimen turbulento.

Hasta hace pocos años, los conocimientos que se tenían sobre la combustión turbulenta eran esencialmente empíricos o basados en primitivas modelizaciones de muy dudosa validez.

Más recientemente la combinación entre el mejor conocimiento de la

combustión laminar y de la estructura de la turbulencia está permitiendo avanzar en el estudio de las llamas turbulentas, como explica Liñán en su discurso e ilustra con algún ejemplo. Son trabajos en los que también participa activamente el grupo español de combustión y donde debe esperarse un esfuerzo persistente de investigación durante los próximos años.

A lo largo de la exposición vemos aparecer frecuentemente los nombres de otros investigadores españoles que dentro y fuera del país están contribuyendo con éxito al estudio de todo ello. Nombres que testimonian la existencia de una escuela española de la especialidad, modesta en su dimensión pero relevante en sus contribuciones científicas, a cuya formación y trabajos ha contribuido en forma destacada el Profesor Liñán.

Quien se lamenta en su discurso, creo que con bastante razón, de la insuficiente atención que merece a la comunidad científica española el campo de la Mecánica de Fluidos, contrariamente a lo que cabría esperar por la importancia intrínseca de la materia, tanto en el aspecto científico como en el de la ingente variedad de sus aplicaciones, en un Universo donde el estado fluido, en una u otra de sus manifestaciones, es abrumadoramente predominante.

Falta de atención que también se comprueba por la ausencia de programas nacionales de investigación dedicados a estas materias, en contraste con los que nuestros investigadores realizan para otras instituciones extranjeras o internacionales.

Pienso que esta situación está demandando desde hace tiempo una acción específica para potenciar la importante base ya existente, la cual aporta una de las dos condiciones exigibles para emprender un esfuerzo justificado en el Plan de Fomento de la Investigación española. La otra es la importancia y el interés del tema a lo que ya nos hemos referido.

Habiendo abdicado en cierta medida de esa responsabilidad hace años

el INTA, a quien de modo natural debiera corresponderle una parte muy sustantiva de ella, puesto que ninguna rama ha contribuido como la Aeroespacial a suscitar el interés por los problemas de la Mecánica de Fluidos y a darles soluciones, o el INTA debiera recuperar su función en este campo o debería crearse un Centro de la Especialidad, que polarice y promueva las investigaciones en el vasto dominio de la Mecánica de Fluidos.

El tercer nivel del discurso, el más personal de su exposición, se refiere a la teoría de las llamas de difusión. Tema predilecto de sus investigaciones desde el primer momento y de la mayor importancia tecnológica, puesto que generalmente los reactantes no suelen estar premezclados. A cuyo estudio sigue dedicando una especial atención, como lo acredita el que alguno de sus más recientes resultados salgan a la luz por primera vez en el texto del discurso que motiva estos comentarios.

Como él explica, durante nuestro breve tiempo de coincidencia en el Grupo de combustión del INTA, cuando yo orientaba ya mis actividades predominantemente en otra dirección y Amable Liñán iniciaba su camino, tuve la fortuna de proponerle como un tema original de investigación el estudio de la estructura interna de las llamas de difusión, al igual de lo que veníamos haciendo con mayor acierto para la llamas premezcladas.

El propósito estaba justificado porque la única teoría existente hasta el momento sobre las llamas de difusión era la clásica de Burke-Shumann, desarrollada 30 años antes, la cual ignora la estructura interna de la llama al simplificar el proceso mediante la hipótesis de reacción instantánea en el punto de encuentro del combustible y oxidante. Teoría muy valiosa que Liñán ha generalizado después, como ilustra en su discurso.

Amable Liñán se aplicó con afán al estudio del problema propuesto para el que obtuvo una solución satisfactoria y descubrió un filón inagotable, cuya inteligente explotación le ha convertido en una de las

primeras, si no en la primera autoridad en la materia. Consiguiendo una explicación satisfactoria de todos los fenómenos que concurren en el proceso : el encendido, la extinción, la llama triple, el anclaje y la levitación, el mecanismo fino de la combustión turbulenta, etc. Donde algunos de sus trabajos como el relativo a la Estructura asintótica de las llamas de difusión para energías de activación grandes, de 1974, se ha convertido en un clásico de obligada referencia para el estudio de los diversos regímenes que se producen en tales condiciones.

Y como lo ha de ser sin duda en el futuro este discurso de ingreso donde tan acertadamente nos ilustra, entre otros temas, sobre el estado de conocimientos en el campo de las llamas de difusión, que tan decisivamente está contribuyendo a desvelar.

Sea pues bienvenido a esta su Casa el Profesor Liñán y aporte a ella generosamente desde hoy y por muchos años cuanto de su singular ejecutoria e ilusionada disposición debe esperarse.

Muchas gracias por su atención.