

SIMULACIÓN DE ATOMIZACIÓN MEDIANTE EL MÉTODO VOLUMEN DE FLUIDO CON MALLA ADAPTATIVA

SIMULATION OF ATOMIZATION THROUGH THE VOLUME OF FLUID METHOD WITH ADAPTIVE MESH REFINEMENT

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

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

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

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

Palabras clave: Atomización, Turbulencia, Volumen de Fluido (VOF), Refinamiento Adaptativo de Malla (AMR), Simulación de Grandes Vórtices (LES), Basilisk

Resumen. La atomización es un flujo turbulento multifásico donde los efectos de tensión superficial son relevantes. Este fenómeno presenta un amplio espectro de escalas espaciales y temporales relacionadas al transporte de energía y a la deformación de la interfase. En este contexto, a fin de reducir su costo computacional, la simulación de atomización puede emplear herramientas que exploten el carácter local del fenómeno empleando mallas más refinadas en las regiones donde las escalas relevantes sean menores. En este trabajo, se presenta un solver de Volumen de Fluido (VOF) que utiliza Refinamiento de Malla Adaptativo (AMR) con criterios de refinamiento basados en Simulación Implícita de Grandes Vórtices (ILES), desarrollado en la suite Basilisk. Se reportan resultados relativos a atomización primaria en regímenes de transición turbulenta, relevantes para diversos problemas industriales (como inyección de combustible y pulverización de agroquímicos).

Keywords: Atomization, Turbulence, Volume of Fluid (VOF), Adaptive Mesh Refinement (AMR), Large Eddy Simulation (LES), Basilisk.

Abstract. The atomization process is a turbulent multiphase flow where surface tension effects are relevant. This phenomenon presents a wide range of spatial and temporal scales related energy transport and interface deformation. In this context, in order to reduce the computational cost, simulation toolkits for atomization can profit from the local character of the phenomenon applying mesh refinement in regions where the relevant scales are smaller. In this work, we present a Volume of Fluid (VOF) solver that uses Adaptive Mesh Refinement (AMR) with a criterion based on Implicit Large Eddy Simulation (ILES), developed in the Basilisk suite. Results are reported regarding primary atomization in turbulent transition regimes, relevant to various industrial problems (as fuel injection and agrochemical spraying).

1. INTRODUCCIÓN

La atomización es un fenómeno en el cual una geometría líquida se fragmenta hasta descomponerse en una gran cantidad de gotas pequeñas. Como se describe en los trabajos de [Marmottant y Villermaux \(2004\)](#); [Lefebvre y McDonell \(2017\)](#), este proceso se encuentra presente en diversas aplicaciones industriales donde se busca generar un aerosol o *spray* (una nube de gotas con determinadas propiedades) a partir de inyectar un chorro líquido a alta velocidad en un medio gaseoso.

En este contexto, la atomización ocurre en un régimen de flujo multifásico con números de Reynolds (Re) y Weber (We) elevados, desarrollando una evolución turbulenta y fuertemente inercial. A su vez, la dinámica general del *spray* también se ve afectada por fenómenos capilares debido al reducido diámetro de las gotas que finalmente lo componen. Así, la atomización desarrolla una amplia gama de escalas temporales y espaciales no sólo por la cascada de energía, producto de la turbulencia, sino también por la amplia gama de longitudes características presentes en las gotas y filamentos líquidos que se desprenden del chorro principal y se descomponen hasta formar el aerosol, como las observadas en los resultados [Ling et al. \(2015, 2017b\)](#); [Pairetti \(2019\)](#). Por lo tanto, la atomización es un problema computacionalmente costoso, sobre todo si se analiza Simulación Numérica Directa (DNS).

A pesar de esta problemática, la atomización de chorros se ha estudiado empleando DNS con diversos fines. Entre los casos más destacados pueden mencionarse los trabajos de [Ménard et al. \(2007\)](#), que simularon un chorro Diésel cilíndrico a baja velocidades con técnicas avanzadas de representación de interfase (CLSVOF) y a partir de los resultados estimaron el efecto de los fenómenos en las escalas sub-grilla [Chesnel et al. \(2011\)](#) y propusieron modelos algebraicos de atomización de bajo costo computacional en [Lebas et al. \(2009\)](#); [Anez et al. \(2019\)](#).

[Shinjo y Umemura \(2010\)](#), por otra parte, analizaron problemas con números de Reynolds y Weber aún menores para alcanzar mediante DNS una resolución casi completa del espectro de escalas turbulentas. Estos artículos describen la topología en la punta del chorro, los procesos de generación de vórtices y los efectos capilares en la fragmentación. A partir de estos resultados, [Umemura y Shinjo \(2018\)](#) han propuesto un modelo de atomización sub-grilla para LES.

[Desjardins et al. \(2010\)](#) analizaron la atomización de chorros planos en diversos regímenes de flujo con condiciones periódicas para observar el crecimiento de las inestabilidades hidrodinámicas en la interfase a partir de los efectos aerodinámicos. Profundizando esta línea de trabajo, [Jarrahbashi y Sirignano \(2014\)](#); [Jarrahbashi et al. \(2016\)](#); [Zandian et al. \(2017\)](#) analizaron la relación los modos de las inestabilidades hidrodinámicas y los vórtices desarrollados en la capa de mezcla para amplios rangos de Re y We , tanto en láminas planas como en chorros cilíndricos.

Si bien estos resultados han permitido conocer más en detalle los mecanismos físicos que rigen la atomización, desconocemos aún si el nivel de DNS alcanzado captura todas las escalas de flujo relevantes en los fenómenos de fragmentación. En este sentido, es fundamental desarrollar métodos que permitan reducir el costo de estas herramientas para aplicar mayores grados de refinamiento con los recursos computacionales actuales.

En este trabajo, presentamos una implementación en la librería de volúmenes finitos Basilisk [Popinet \(2014\)](#) que emplea el método de Volumen de Fluido (VOF) Lineal a trozos (PLIC) en mallas tipo octree, aplicando Refinamiento de Malla Adaptativo (AMR). El criterio de refinamiento apunta a acotar el error absoluto de la solución y asegurar una resolución de las escalas turbulentas consistente en todo el dominio. Finalmente, empleamos esta herramienta en un caso típico de atomización primaria para mostrar el efecto que la resolución de malla tiene sobre los

mecanismos de atomización.

2. MODELO Y MÉTODO NUMÉRICOS

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

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

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

Se emplea el método Volumen de Fluido (VOF) [Hirt y Nichols \(1981\)](#); [Rudman \(1998\)](#), con una Aproximación Lineal a Trozos (PLIC) de la interfase en cada celda cúbica [Scardovelli y Zaleski \(2000\)](#). En este contexto, la distribución de fases se describe mediante la fracción de volumen líquido en la celda \tilde{c} ,

$$\tilde{c} = (1/V) \int_V c dV \quad c(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1 & \text{fase 1 (líquida)} \\ 0 & \text{fase 2 (gaseosa)} \end{cases} \quad (2)$$

Esta variable, en el contexto incompresible, se transporta de forma conservativa,

$$\frac{\partial \tilde{c}}{\partial t} + \nabla \cdot (\tilde{c} \mathbf{u}) = 0 \quad (3)$$

A partir del campo \tilde{c} pueden calcularse las propiedades medias de flujo en cada celda:

$$\rho = \tilde{c} \rho_1 + (1 - \tilde{c}) \rho_2 \quad \mu = \tilde{c} \mu_1 + (1 - \tilde{c}) \mu_2 \quad (4)$$

Finalmente, definir el algoritmo de resolución para los campos $(\tilde{c}, \mathbf{u}, p)$ a partir de las ecuaciones diferenciales (1,3), con las propiedades físicas ρ y μ , requiere definir los esquemas numéricos de aproximación. La implementación que utilizamos, presente en Basilisk y descrita por [Popinet \(2014\)](#), se basa principalmente en el Método de Volúmenes Finitos (FVM) para mallas colocadas cartesianas y en el método segregado de proyección aproximada de [Chorin \(1968\)](#). Siguiendo la notación de [Popinet \(2009\)](#), el sistema de ecuaciones algebraicas a resolver es el siguiente:

$$\begin{aligned} \frac{c_{n+\frac{1}{2}} - c_{n-\frac{1}{2}}}{\Delta t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}_n c_n) &= 0 \\ \rho_{n+\frac{1}{2}} \left[\frac{\mathbf{u}_* - \mathbf{u}_n}{\Delta t} + \mathbf{u}_{n+\frac{1}{2}} \cdot (\nabla \mathbf{u}_{n+\frac{1}{2}}) \right] &= \nabla \cdot [\mu_{n+\frac{1}{2}} (\mathbf{D}_n + \mathbf{D}_*)] + (\sigma \kappa \delta_s \mathbf{n}_s)_{n+\frac{1}{2}} \\ \nabla \cdot \left(\frac{\Delta t}{\rho_{n+\frac{1}{2}}} \nabla p_{n+\frac{1}{2}} \right) &= \nabla \cdot (\mathbf{u}_*) \\ \mathbf{u}_{n+1} &= \mathbf{u}_* - \frac{\Delta t}{\rho_{n+\frac{1}{2}}} \nabla p_{n+\frac{1}{2}} \end{aligned} \quad (5)$$

donde los operadores diferenciales ∇ corresponden a aproximaciones discretas basadas en diferencias centradas. El transporte de \tilde{c} se realiza mediante el esquema de advección geométrico desarrollado por [Weymouth y Yue \(2010\)](#). Los esquemas de discretización empleados en la ecuación de momento son *momentum-conserving* y de segundo orden, como se describe más detalladamente en [Pairetti et al. \(2018\)](#).

La fuerza de tensión superficial de forma consistente con el gradiente de presión, minimizando corrientes parásitas como se explica en [Popinet \(2018\)](#). La curvatura de la interfase se calcula mediante aproximaciones de segundo orden basadas en funciones altura calculadas como se describe en [Scardovelli y Zaleski \(1999\)](#); [Popinet \(2009\)](#).

El método de refinamiento adaptativo disponible por defecto en Basilisk aproxima el error numérico local mediante wavelets de los campos (por ejemplo, wavelet de velocidad $w(\mathbf{u})$) y refina en las ubicaciones donde esta función supera un límite predefinido ([Popinet, 2015](#); [van Hooft et al., 2018](#)). De forma complementaria, para las simulaciones expuestas en este trabajo aplicamos un indicador de refinamiento basado en una estimación de la escala turbulenta local, empleándolo como un mecanismo de filtro adaptativo para LES. Una descripción más detallada de la metodología puede encontrarse en [Pairetti \(2019\)](#).

2.1. Indicador de resolución de escalas turbulentas: ILES adaptativo

La resolución de todas las escalas de flujo mediante DNS requiere emplear un paso de malla comparable con la escala de Kolmogorov. Esto es altamente costoso: dado que la relación entre las escalas integral y disipativa es proporcional a $Re^{3/4}$ la cantidad de celdas en una malla tridimensional uniforme para representar todas las escalas turbulentas crece con orden $\mathcal{O}(Re^{9/4})$, como menciona [Sagaut \(2013\)](#).

Por esta razón, usualmente se opta por una metodología LES, donde se modelan los efectos de las escalas sub-grilla (SGS) agregando un término difusivo turbulento [Agbaglah et al. \(2017\)](#). Las hipótesis de los modelos SGS explícitos, sin embargo, son válidas sólo para casos de turbulencia homogénea, según [Pope \(2001\)](#). Esta condición no se cumple en las capas de mezcla sobre la interfase, con lo cual los modelos SGS explícitos no tienen un buen desempeño cerca de la interfase. En este contexto, proponemos emplear LES Implícito (ILES), una metodología propuesta por [Boris et al. \(1992\)](#) y aplicada actualmente para estudiar flujos de alto Reynolds [Grinstein et al. \(2007\)](#); [Cadieux et al. \(2017\)](#); [Sun y Domaradzki \(2018\)](#).

En el contexto de Volúmenes Finitos, como el valor en celda corresponde al valor medio del campo en su volumen, una solución sub-resuelta DNS es teóricamente equivalente a emplear un filtro LES (sin modelo sub-grilla) con kernel G tipo caja:

$$\bar{\mathbf{u}} = \frac{1}{V} \int_V G(\mathbf{x}) \mathbf{u} dV \quad G(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1 & (\mathbf{x} \in V) \\ 0 & (\mathbf{x} \notin V) \end{cases} \quad (6)$$

Dado que a priori no es posible calcular el paso de malla para lograr esta condición, proponemos en este trabajo explotar la capacidad AMR de Basilisk para refinar la malla al punto de cumplir esta condición. Con este fin, se considera como indicador de refinamiento el cociente entre el paso de malla local $\Delta_G = h(\mathbf{x})$ y una escala local de turbulencia $\eta(\mathbf{x})$,

$$K(\mathbf{u}, \mathbf{x}) = \frac{h(\mathbf{x})}{\eta(\mathbf{x})} \quad \eta = \sqrt{\frac{\nu}{|\mathbf{D}|}} \quad \rightarrow \quad h(\mathbf{x}) \sqrt{\frac{|\mathbf{D}|(\mathbf{x})}{\nu}} < K_{\max}, \quad (7)$$

donde K_{\max} es el límite superior aceptado para el indicador.

De esta manera, no sólo se reduce el costo por la aproximación implícita de los efectos SGS, sino que se considera el carácter local de las estructuras de flujo refinando sólo aquellas regiones de el paso de malla sea mayor a la longitud característica de las estructuras de flujos consideradas relevantes. Es decir, el algoritmo AMR aplicará refinamiento en las regiones donde $K(\mathbf{u}, \mathbf{x}) > K_{\max}$.

3. RESULTADOS: ATOMIZACIÓN PRIMARIA DE CHORRO CILÍNDRICO

En esta sección exponemos algunos resultados orientados a estimar el costo computacional de resolver todas las escalas relevantes para los mecanismos de fragmentación en un proceso de atomización primaria empleando el algoritmo VOF-AMR-ILES descrito anteriormente.

3.1. Definición de caso de estudio

El problema analizado corresponde a un chorro cilíndrico de combustible Diésel inyectado a baja velocidad en una cámara de aire aproximadamente a 20 bares. Este problema académico, propuesto por Ménard et al. (2007) y Lebas et al. (2009), está definido por los parámetros en la Tabla 1, de acuerdo a la siguiente definición de los grupos adimensionales,

$$\text{Re}_g = \frac{\rho_g U_{inj} D_{inj}}{\mu_g} \quad \text{We}_g = \frac{\rho_g U_{inj}^2 D_{inj}}{\sigma}, \quad (8)$$

donde U_{inj} es la velocidad media de inyección y D_{inj} el diámetro del inyector ($100 \mu\text{m}$).

El dominio a simular consiste en un cubo de lado $L = 30D$ (Fig. 1), donde el chorro líquido de diámetro D ingresa con un perfil de velocidad uniforme, variable en el tiempo según la Ec. (9); la superficie restante de esta cara del cubo presenta condición de no deslizamiento. En todas las otras caras del dominio se aplica una condición de flujo libre a presión constante.

$$u_x = U_{inj} + \sin(2\pi ft) U_p \quad f = St \frac{U_{inj}}{D} \quad (9)$$

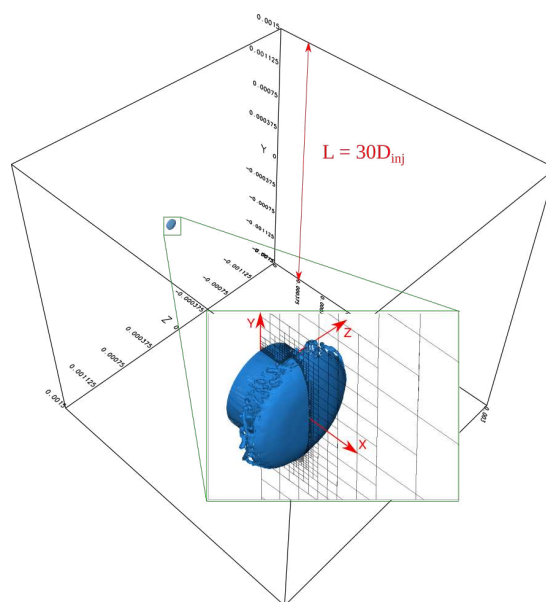


Figura 1: Vista isométrica: dominio y detalle de evolución inicial con refinamiento adaptativo

ρ_g	ρ_l	μ_g	μ_l	σ	U_{inj}	Re_g	We_g	ρ_l/ρ_g	μ_l/μ_g	U_p	St
25.	696.	10^{-5}	0,0012	0,06	100	5800	20000	27.8	120	5	1.3

Tabla 1: Definición de parámetros para el caso de atomización.

3.2. Criterios y niveles de refinamiento empleados

Las simulaciones en cuestión adoptan los siguientes criterios de refinamiento:

$$w_{\mathbf{u}}(\mathbf{x}) < 1m/s, \quad w_{\tilde{c}}(\mathbf{x}) < 10^{-3}, \quad K(\mathbf{x}) < 10.$$

donde la función w corresponde a la aproximación de error por *wavelet* de los campos \mathbf{u} y \tilde{c} , como describen van Hooff et al. (2018). La condición sobre K implica despreciar escalas inferiores a 10η , suponiendo que éstas tienen sólo efectos disipativos despreciables y no contribuyen a los procesos de fragmentación.

Para analizar el efecto de la resolución de malla, el problema en cuestión se resuelve empleando refinamientos con tres valores de refinamiento máximo, es decir de paso de malla mínimo: $h_{\min} = 1,42\mu\text{m}$, $0,71\mu\text{m}$, $0,48\mu\text{m}$. Cabe notar que los casos de referencia que resuelven DNS de atomización a números de Reynolds moderados en la bibliografía usualmente emplean pasos de malla entre $0,4\mu\text{m}$ Shinjo y Umemura (2010) y $3\mu\text{m}$ Salvador et al. (2017), considerando que estas resoluciones son suficientes para capturar la física del fenómeno.

3.3. Sumario de resultados

La Fig. 2 muestra la superficie libre para $t = 12\mu\text{s}$, donde se observa la distribución cualitativa de gotas y la velocidad del núcleo coherente. En este fotograma puede apreciarse cómo al desarrollarse las inestabilidades en la superficie del chorro se forman láminas y ligamentos que rápidamente reducen su velocidad antes de desprenderse del núcleo líquido. Este hecho implica que aún los mecanismos de atomización primaria se ven gobernados, en última instancia, por fenómenos capilares.

En cuanto al costo computacional, empleando un paso $h_{\min} = 0,48\mu\text{m}$, la malla correspondiente al fotograma tiene aproximadamente $3,9 \times 10^8$ celdas, mientras que una malla cartesiana uniforme con la misma resolución precisaría más de $2,16 \times 10^{11}$. Es decir, los grados de libertad del problema se reducen en un factor de 500 por el uso de AMR. Aún con esta herramienta, el costo computacional para alcanzar $t = 12\mu\text{s}$ es levemente superior a 60 000 horas-núcleo.

Aún en este contexto, la resolución empleada no es suficiente para capturar la geometría de toda la interfase dentro de niveles aceptables de error. La Fig. 3a muestra que las gotas tienen un radio de curvatura ($R_{\kappa} = 1/\kappa$) comparable al paso de malla, cuando una representación aceptable requeriría un $h_{\min} < R_{\kappa}/4$. Sin embargo, la superficie del núcleo coherente, en el corte superior de la misma figura, está resuelta casi en su totalidad con más de 10 celdas por radio de curvatura. Las zonas donde esto no se cumple es en las puntas de los ligamentos, donde ocurre el *breakup*. En síntesis: la resolución es satisfactoria en el núcleo coherente en general, perdiendo precisión en los puntos donde se fragmentan los ligamentos.

La Fig. 3b muestra sólo las gotas desprendidas del núcleo coherente. La identificación de cada gota se basa en una utilidad de Basilisk (<http://basilisk.fr/src/tag.h>) que implementa una búsqueda binaria de *vecindades* (celdas con $\tilde{c} > 0$ rodeadas de celdas $\tilde{c} = 0$) basado en la estructura multigrilla de *tree*. Definidas las vecindades, cada una de ellas tiene una única gota de la cual puede calcularse volumen, superficie y velocidad media a partir de los campos \tilde{c} y \mathbf{u} .

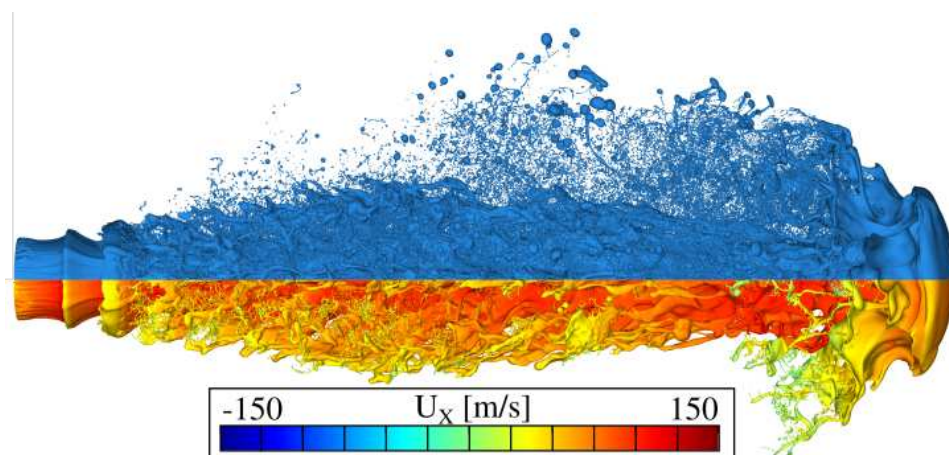


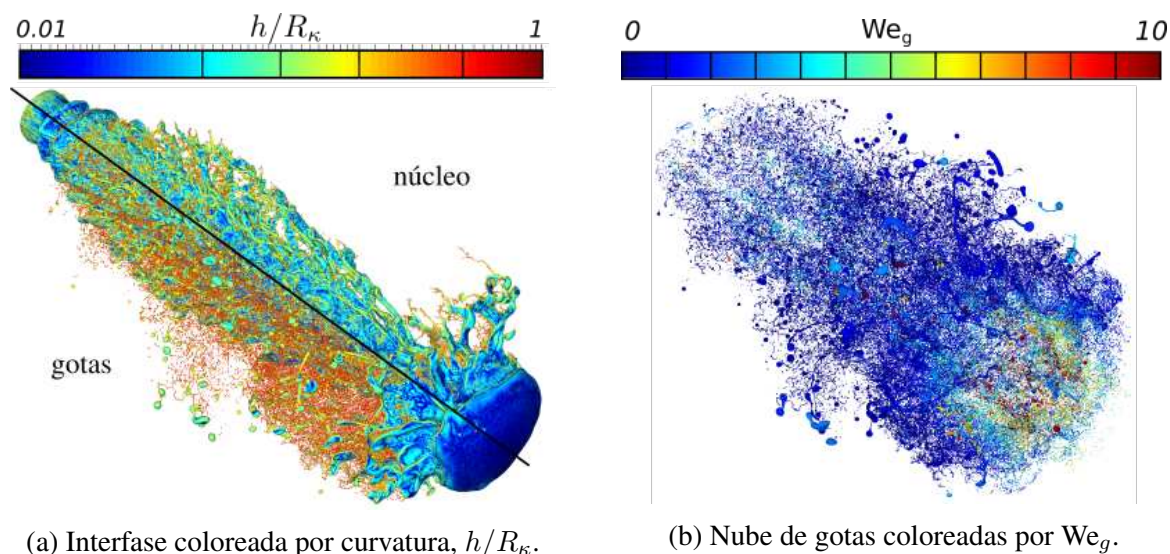
Figura 2: Representación de la interfase completa (arriba) y del núcleo (abajo) coloreado por componente axial de velocidad para $t = 12 \mu\text{s}$ ($h_{\min} = 0,48 \mu\text{m}$)

Con esta información es posible calcular el número de Weber de las gotas

$$\text{We}_g^D = \frac{\rho_g U_D^2 D_{30}}{\sigma} \quad D_{30} = \left(\frac{6V}{\pi} \right)^{1/3},$$

donde V es el volumen de la gota y U_D su velocidad. Así, la gran mayoría de las gotas son aerodinámicamente estables dado que, de acuerdo a [Guldemberger et al. \(2009\)](#), el We_g es considerablemente menor a 10, que es el valor crítico en flujos inerciales. En este contexto, la falta de resolución no debería afectar los fenómenos de atomización secundaria, ya que sólo las gotas de gran tamaño tienen un número de Weber próximo a los valores en los que se produce la fragmentación.

A fin de analizar el efecto del paso malla h_{\min} , la Fig. 4 compara los histogramas normalizados del diámetro de gotas (D_{30} según la Ec. 3.3) ajustados mediante Funciones Distribución de Probabilidad (PDF) tipo *log-normal*. De esta manera podemos observar que el diámetro de mayor frecuencia es aproximadamente $3 h_{\min}$ en todos los casos. Sin embargo, el histograma



(a) Interfase coloreada por curvatura, h/R_κ .

(b) Nube de gotas coloreadas por We_g .

Figura 3: Indicadores cualitativos de resolución de malla.

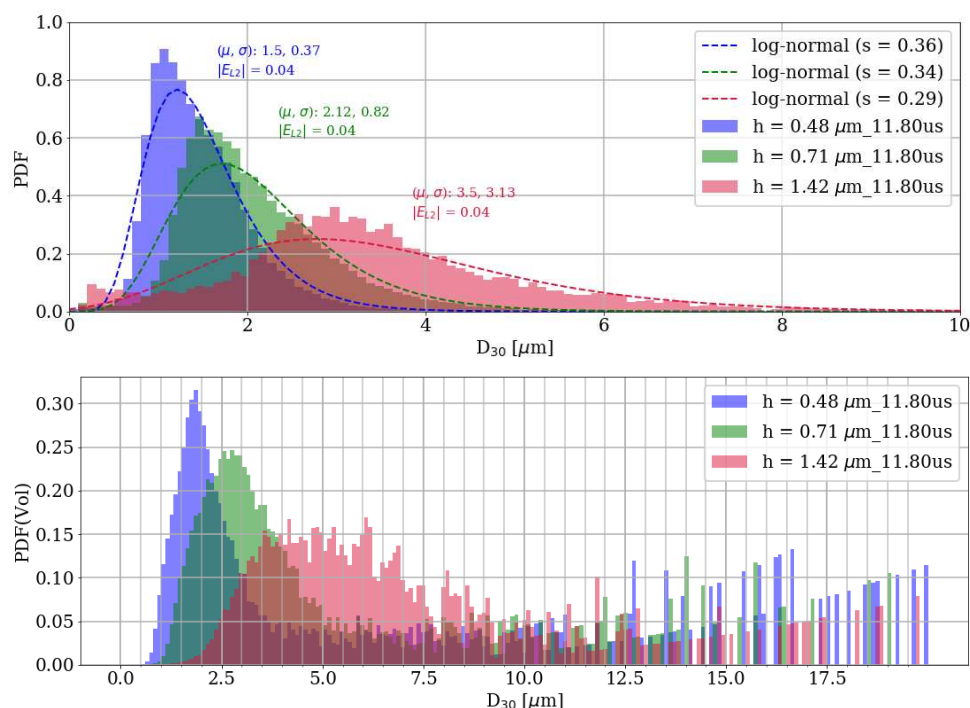


Figura 4: Histogramas normalizados y ajustes *log-normal*, para simulaciones con diferentes pasos de malla h_{\min} . Normalizado por cantidad de gotas (arriba) y ponderado por volumen.

ponderado por volumen muestra para las dos simulaciones de mayor refinamiento un comportamiento muy similar en diámetros superiores a $5\mu\text{m}$. Es decir, aunque la mayoría de las gotas se encuentran sub-resueltas la mecánica de fragmentación para las estructuras de gran tamaño parece haber alcanzado la independencia del paso de malla.

Profundizando este análisis, la Fig. 5 muestra la evolución en el tiempo de las proporciones en volumen para cada población de gotas (rangos de D_{30} de $2\mu\text{m}$) sobre el volumen total atomizado. Así, por ejemplo, luego de $12\mu\text{s}$ las gotas con $D_{30} < 2\mu\text{m}$ acumulan sólo el 20% del volumen. Más aún, la proporción de gotas sub-resueltas ($D_{30} < 4h_{\min}$) disminuye a medida que avanza la atomización, dando cuenta de que a medida que se desprenden las estructuras de mayor tamaño las gotas más pequeñas tienen una relevancia cada vez menor.

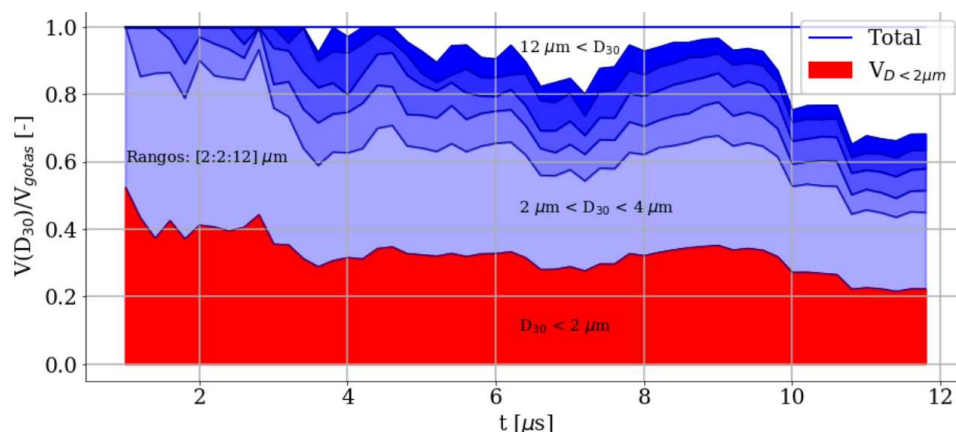


Figura 5: Evolución temporal del volumen atomizado correctamente resuelto ($\Delta_{\min} = 0,48\mu\text{m}$)

Ambas figuras denotan que si bien la cantidad de gotas sub-resueltas es varios ordenes de magnitud superior a las gotas de mayor diámetro, el volumen atomizado en gotas correctamente resueltas en el *spray* crece más rápidamente. Esto implica que el porcentaje en volumen de gotas no resueltas se torna cada vez más despreciable a medida que se desarrolla el flujo.

4. CONCLUSIONES

En este trabajo empleamos una estrategia VOF-AMR-ILES para resolver un problema académico de atomización primaria, comparando soluciones con diversos niveles de refinamiento. En primera instancia, observamos que aplicar AMR produce mallas con 500 veces menos celdas que respecto a una malla uniforme del mismo paso. Esto significa una reducción muy significativa de los requerimientos en memoria y el costo computacional para resolver este tipo de problemas.

Respecto a los resultados, a nivel cualitativo la simulación con mayor resolución de malla ($h_{\min} = 0,48 \mu\text{m}$) permite capturar los procesos de deformación en el núcleo coherente con más de 10 celdas por radio de curvatura (Fig. 3a). En contraste, la fragmentación siempre ocurre por efectos capilares en ligamentos a baja velocidad, generando gotas de diámetro del orden de 3 pasos de malla, es decir, sub-resueltas.

A nivel cuantitativo, hemos observado que la moda de la distribución normalizada de diámetros es, en todos los casos, del orden de 3 pasos de malla. Esto indica que los pasos de malla empleados no permiten aún capturar la PDF de diámetros física del problema. Sin embargo, la normalización por volumen de los histogramas muestra que las gotas de gran diámetro ($D_{30} > 8 h_{\min}$) mantienen un comportamiento similar (Fig. 4). Esto parece indicar que la mecánica de fragmentación que domina el desprendimiento de gotas de mayor tamaño sí ha sido reproducida con los refinamientos de malla empleados.

Más aún, la Fig. 5 muestra que a medida que se desarrolla la atomización, la proporción en volumen de gotas no resueltas se reduce significativamente. Cabe destacar que todas las estructuras sub-resueltas en la malla de h_{\min} son estables ($We_g < 10$) y por lo tanto no generarán gotas más pequeñas. En contraposición, es esperable que la tasa de generación de gotas de gran diámetro siga aumentando al menos hasta que la punta del chorro alcance la longitud de *breakup*.

De esta manera, los resultados reportados avalan el consenso de la comunidad respecto a que las estructuras de gran tamaño se encuentran correctamente representadas, y en proporciones que reproducen la física del problema, a pesar de que no se puedan capturar las gotas de menor diámetro. Más aún, hemos verificado que el volumen de gotas sub-resueltas se torna despreciable.

A futuro buscamos resolver problemas con datos experimentales más detallados y un costo computacional menor, a fin de analizar tiempos más extensos de atomización y profundizar estas conclusiones observando casos donde se alcance la longitud de *breakup*. A su vez, dado el alto costo que hemos observado aún aplicando DNS, estamos procurando implementar y validar modelos de atomización basados en un tratamiento LES más explícito.

REFERENCIAS

- Agbaglah G., Chiodi R., y Desjardins O. Numerical simulation of the initial destabilization of an air-blasted liquid layer. *Journal of Fluid Mechanics*, 812:1024–1038, 2017.
- Anez J., Puggelli S., Hecht N., Andreini A., Reveillon J., y Demoulin F. Liquid atomization modeling in openfoam (r). En *OpenFOAM(R)*, páginas 297–308. Springer, 2019.

- Boris J., Grinstein F., Oran E., y Kolbe R. New insights into large eddy simulation. *Fluid dynamics research*, 10(4-6):199–228, 1992.
- Brackbill J., Kothe D.B., y Zemach C. A continuum method for modeling surface tension. *Journal of computational physics*, 100(2):335–354, 1992.
- Cadieux F., Sun G., y Domaradzki J.A. Effects of numerical dissipation on the interpretation of simulation results in computational fluid dynamics. *Computers & Fluids*, 154:256–272, 2017.
- Chesnel J., Menard T., Reveillon J., y Demoulin F.X. Subgrid analysis of liquid jet atomization. *Atomization and Sprays*, 21(1), 2011.
- Chorin A.J. Numerical solution of the Navier-Stokes equations. *Mathematics of computation*, 22(104):745–762, 1968.
- Desjardins O., Pitsch H., et al. Detailed numerical investigation of turbulent atomization of liquid jets. *Atomization and Sprays*, 20(4):311, 2010.
- Grinstein F.F., Margolin L.G., y Rider W.J. *Implicit large eddy simulation: computing turbulent fluid dynamics*. Cambridge university press, 2007.
- Guildenbecher D., López-Rivera C., y Sojka P. Secondary atomization. *Experiments in Fluids*, 46(3):371, 2009.
- Hirt C.W. y Nichols B.D. Volume of fluid (vof) method for the dynamics of free boundaries. *Journal of computational physics*, 39(1):201–225, 1981.
- Jarrahbashi D. y Sirignano W. Vorticity dynamics for transient high-pressure liquid injection. *Physics of Fluids*, 26(10):73, 2014.
- Jarrahbashi D., Sirignano W., Popov P., y Hussain F. Early spray development at high gas density: hole, ligament and bridge formations. *Journal of Fluid Mechanics*, 792:186–231, 2016.
- Lebas R., Menard T., Beau P.A., Berlemont A., y Demoulin F.X. Numerical simulation of primary break-up and atomization: Dns and modelling study. *International Journal of Multiphase Flow*, 35(3):247–260, 2009.
- Lefebvre A.H. y McDonell V.G. *Atomization and sprays*. CRC press, 2017.
- Ling Y., Fuster D., Zaleski S., y Tryggvason G. Spray formation in a quasiplanar gas-liquid mixing layer at moderate density ratios: a numerical closeup. *Physical Review Fluids*, 2(1):014005, 2017a.
- Ling Y., Legros G., Popinet S., y Zaleski S. Direct numerical simulation of an atomizing bio-diesel jet: Impact of fuel properties on atomization characteristics. En *Ilass Europe. 28th european conference on Liquid Atomization and Spray Systems*, páginas 370–377. Editorial Universitat Politècnica de València, 2017b.
- Ling Y., Zaleski S., y Scardovelli R. Multiscale simulation of atomization with small droplets represented by a lagrangian point-particle model. *International Journal of Multiphase Flow*, 76:122–143, 2015.
- Marmottant P. y Villermaux E. On spray formation. *Journal of fluid mechanics*, 498:73–111, 2004.
- Ménard T., Tanguy S., y Berlemont A. Coupling level set/vof/ghost fluid methods: Validation and application to 3d simulation of the primary break-up of a liquid jet. *International Journal of Multiphase Flow*, 33(5):510–524, 2007.
- Pairetti C., Popinet S., Márquez Damián S., Nigro N., y Zaleski S. Bag mode breakup simulations of a single liquid droplet. En ECCOMAS, editor, *ECCM-ECFD 2018*. University of Glasgow, University of Edinburg, 2018.
- Pairetti C.I. *Modelización de flujos turbulentos multifásicos aplicada al diseño de sistemas*

- inyectores de nafta en motores de combustión interna*. Tesis de Doctorado, Universidad Nacional Rosario, Argentina, 2019.
- Pope S.B. Turbulent flows. 2001.
- Popinet S. An accurate adaptive solver for surface-tension-driven interfacial flows. *Journal of Computational Physics*, 228:5838-5866, 2009.
- Popinet S. The basilisk code: <http://basilisk.fr/>. 2014.
- Popinet S. A quadtree-adaptive multigrid solver for the serre–green–naghdi equations. *Journal of Computational Physics*, 302:336–358, 2015.
- Popinet S. Numerical models of surface tension. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 50:49–75, 2018.
- Rudman M. A volume-tracking method for incompressible multifluid flows with large density variations. *International Journal for numerical methods in fluids*, 28(2):357–378, 1998.
- Sagaut P. *Multiscale and multiresolution approaches in turbulence: LES, DES and hybrid RANS/LES methods: applications and guidelines*. World Scientific, 2013.
- Salvador F.J., Carreres M., Cialesi-Esposito M., y Plazas A.H. Determination of critical operating and geometrical parameters in diesel injectors through one dimensional modelling, design of experiments and an analysis of variance. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part D: Journal of Automobile Engineering*, página 0954407017735262, 2017.
- Scardovelli R. y Zaleski S. Direct numerical simulation of free-surface and interfacial flow. *Annual review of fluid mechanics*, 31(1):567–603, 1999.
- Scardovelli R. y Zaleski S. Analytical relations connecting linear interfaces and volume fractions in rectangular grids. *Journal of Computational Physics*, 164(1):228–237, 2000.
- Shinjo J. y Umemura A. Simulation of liquid jet primary breakup: Dynamics of ligament and droplet formation. *International Journal of Multiphase Flow*, 36(7):513–532, 2010.
- Sun G. y Domaradzki J.A. Implicit les using adaptive filtering. *Journal of Computational Physics*, 2018.
- Umemura A. y Shinjo J. Detailed sgs atomization model and its implementation to two-phase flow les. *Combustion and Flame*, 195:232–252, 2018.
- van Hoof J.A., Popinet S., van Heerwaarden C.C., van der Linden S.J., de Roode S.R., y van de Wiel B.J. Towards adaptive grids for atmospheric boundary-layer simulations. *Boundary-Layer Meteorology*, páginas 1–23, 2018.
- Weymouth G.D. y Yue D.K.P. Conservative volume-of-fluid method for free-surface simulations on cartesian-grids. *Journal of Computational Physics*, 229(8):2853–2865, 2010.
- Zandian A., Sirignano W., y Hussain F. Planar liquid jet: Early deformation and atomization cascades. *Physics of Fluids*, 29(6):062109, 2017.