



HAL
open science

Markov Process Applied to the Study of Turbulent Premixed Flames

Sergio Elaskar, Pascal Bruel, Marcelo Frias

► **To cite this version:**

Sergio Elaskar, Pascal Bruel, Marcelo Frias. Markov Process Applied to the Study of Turbulent Premixed Flames. ARGENCON 2024 - IEEE Biennial Congress of Argentina, Sep 2024, San Nicolás de los Arroyos, Argentina. pp.1-7, 10.1109/ARGENCON62399.2024.10735851 . hal-04778417

HAL Id: hal-04778417

<https://inria.hal.science/hal-04778417v1>

Submitted on 12 Nov 2024

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



Distributed under a Creative Commons Attribution 4.0 International License

Proceso de Markov aplicado al estudio de llamas premezcladas turbulentas

1st Sergio Elaskar

*Departamento de Ingeniería Aeroespacial, FCEfYN,
Universidad Nacional de Córdoba,
Instituto de Estudios Avanzados en Ingeniería y Tecnología,
CONICET y Universidad Nacional de Córdoba
Córdoba, Argentina
selaskar@unc.edu.ar*

2nd Pascal Bruel

*CNRS,
University Pau & Pays Adour, LMAP, Inria Cagire Team,
Pau, France
pascal.brue@univ-pau.fr*

3rd Marcelo Frías

*Instituto de Estudios Avanzados en Ingeniería y Tecnología,
CONICET y Universidad Nacional de Córdoba
Córdoba, Argentina
mjf.marcelo.javier@gmail.com*

Abstract—En el presente trabajo, se describe de forma detallada la derivación de la expresión de la tasa de reacción media en el marco de un modelo de llama para combustión turbulenta premezclada basado en las ecuaciones de Navier-Stokes promediadas por Reynolds (RANS). Esto representa el primer paso importante y necesario a partir del cual se llevará a cabo una futura actividad de desarrollo de metodologías destinadas a adaptar dicho modelo a un marco de simulación de grandes remolinos con filtrado en el tiempo. Para tal fin se utiliza el concepto de una magnitud escalar llamada c la cual permite describir el estado termodinámico fluctuante mediante una función distribución de probabilidad bimodal ($c = 0$ y $c = 1$). La evolución temporal de dicha variable escalar es representada por medio de una señal telegráfica aleatoria. Esta señal es una función aleatoria estacionaria que puede ser analizada como un proceso de Markov con sólo dos estados posibles. Además, previamente a la obtención de la frecuencia se deducen los tiempos de estancia en cada estado, las funciones probabilidad de cada estado, la función de auto-correlación, la densidad espectral y la escala integral de tiempo del proceso.

Index Terms—combustión, llama premezclada turbulenta, proceso de Markov

I. INTRODUCCIÓN

En gases cuando una mezcla reactiva es iniciada la reacción entre el oxidante y el combustible puede generarse de tres maneras en función de la velocidad de propagación del frente de llama [1]:

- Oxidación lenta, en la cual la liberación de calor por unidad de tiempo es sumamente baja y no se alcanza a apreciar la luminosidad característica del frente de llama.
- Deflagración, en la cual el frente de llama se mueve con velocidades subsónicas [2].
- Detonación, en la misma el frente de llama se desplaza con velocidades supersónicas [3]–[5]

Una llama premezclada es una onda de deflagración que se propaga en una mezcla de combustible y oxidante, por ejemplo gasolina y oxígeno en el aire [7]. Este es un fenómeno físico-químico muy complejo, sin embargo para describir su estructura puede utilizarse un modelo simplificado que involucra la ecuación de continuidad, las ecuaciones de Navier-Stokes (conservación de cantidad de movimiento) y una ecuación de balance para la variable que determina el progreso de la combustión [8], [9].

La esencia de la descripción de llamas turbulentas premezcladas por medio del concepto de llama laminar arrugada es que la estructura de la llama turbulenta consiste en un conjunto de llamas laminares. Esta descripción de la combustión turbulenta tiene varias características atractivas que incluyen, en particular, la capacidad de incorporar la cinética química con esquemas de complejidad arbitraria [10]. Sin embargo, la forma y área de superficie de las llamas laminares son difíciles de calcular. El modelo de llama turbulenta premezclada descrito en [11] evita esta dificultad mediante una función distribución de probabilidad bimodal del estado termodinámico fluctuante para una variable de progreso llamada c . Esta variable verifica $c = 0$ en los gases reactivos no quemados y $c = 1$ en los productos completamente quemados.

La variable escalar c se define como

$$c = \frac{T - T_f}{T_q - T_f} \quad (1)$$

siendo T la temperatura y los subíndices f y q indican mezcla fresca y quemada.

En este caso, la estadística de un sólo punto de cualquier variable escalar está determinada en gran medida por el tiempo que ocupa uno u otro de los estados uniformes (mezcla no quemada o gas completamente quemado) que están separados por esta delgada zona [12]. En la identificación de este comportamiento se asume, entre otras, que las reacciones

químicas se producen en tiempos pequeños en comparación con las principales escalas temporales relacionadas con el flujo y que, en consecuencia, los estados de iniciales (reactantes, $c = 0$) y finales (productos, $c = 1$) son mucho más extensos que las transiciones entre ellos. La frecuencia observada de estas transiciones, por otra parte, es una medida de la tasa de reacción media.

Por lo tanto la evolución de la variable escalar c está dada por una señal telegráfica aleatoria y la determinación de variables tales como la frecuencia de saltos entre los estados juega un rol importante porque la tasa de reacción media en llamas turbulentas premezcladas (o también tasa media de creación de productos) depende de dicha frecuencia [13]

$$\bar{w} = \nu w_f \quad (2)$$

donde w_f es la tasa media de creación de productos por cruce (posee unidades de densidad) y ν es la frecuencia, es decir, el número promedio de cruces de llamas por unidad de tiempo.

Una señal telegráfica aleatoria es una serie de tiempo cuyo valor $s(t)$ en el momento t adquiere uno de los dos únicos valores posibles. Muchos procesos, tales como reacciones químicas, canales iónicos en membranas celulares, ruido electrónico, etc., generan este tipo de señales. De forma habitual se han utilizado modelos de Markov para modelar y analizar dichos datos. Aquí se presenta el análisis de una señal telegráfica aleatoria de Markov aplicada al fenómeno de llamas turbulentas premezcladas.

Varios procesos aleatorios tienen una cantidad reducida de estados posibles diferentes y cambian entre éstos a medida que pasa el tiempo. Un sistema de este tipo producirá una señal de valor s_i cuando esté en el estado x_i en el momento t . Cuando el rango de la señal $s(t)$ consta de sólo dos valores, s_1 y s_2 , es una señal telegráfica aleatoria. Para la señal de Markov, las tasas de probabilidad de transiciones entre estados son constantes. Este supuesto significa que las tasas de transición dependen sólo del estado actual y no de cuánto tiempo ha transcurrido en dicho estado ni de los estados que precedieron al actual. Esta señal se llama "aleatoria" porque existe una probabilidad de que la transición del estado i a j ocurra en cada intervalo de tiempo Δt .

Complejas herramientas basadas en mecánica de los fluidos computacional se utilizan cada vez más en la simulación de fenómenos de combustión turbulenta con la finalidad de mejorar el diseño de motores de combustión interna para que sean más eficientes y menos contaminantes. Siendo este aspecto en la actualidad de suma relevancia para la aviación comercial. Dentro de este marco, existe la necesidad de beneficiarse de una metodología que ofrezca el mejor compromiso entre capacidades de predicción y costo computacional. El enfoque de simulación de grandes remolinos híbrido-temporal (HTLES) aparece como una alternativa eficiente para el diseño, desarrollo y estudio de diferentes configuraciones en motores de combustión interna [14]. Un primer paso en la dirección de elaboración de un esquema HTLES para la combustión turbulenta premezclada es el análisis detallado de la señal

telegráfica generada entre gases quemados que aparecen luego del proceso de combustión y gases premezclados previos.

II. PROCESO DE MARKOV

Un proceso de Markov continuo en el tiempo puede ocupar aleatoriamente un número finito o infinito de estados e_0, e_1, e_2, \dots . El estado del proceso en el instante t es igual al estado e_j que ocupa el proceso en ese momento [15]. Además, a partir de algún estado inicial en $t = 0$, el proceso cambia de estado aleatoriamente a medida que pasa el tiempo.

En el tema de estudio de este trabajo, la señal posee sólo dos estados $c = 1$ (gases quemados o productos) y $c = 0$ (gases previos a la combustión o reactantes). Las probabilidades de saltar desde un estado a otro durante un intervalo de tiempo Δt pueden ser escritas como

$$\begin{aligned} P\{c_{t+\Delta t} = 1 / c_t = 0\} \\ P\{c_{t+\Delta t} = 0 / c_t = 1\} \end{aligned} \quad (3)$$

donde / indica "tal que". La probabilidad $P\{c_{t+\Delta t}\}$ es independiente del comportamiento del proceso antes del instante t . Además, si es un proceso de Markov homogéneo, entonces la probabilidad de transición desde un estado hacia el otro no depende del instante inicial t sino que depende sólo del tiempo transcurrido Δt entre las transiciones [15].

Se denomina k_{01} a la probabilidad transición por unidad de tiempo del estado $c = 0$ al estado $c = 1$. La otra probabilidad transición por unidad de tiempo es k_{10} , que determina la probabilidad por unidad de tiempo de saltar desde $c = 1$ hasta $c = 0$. Se acepta que ambas tasas de probabilidad de transición son constantes y no dependen del historial del proceso (proceso de Markov homogéneo), entonces las ecs. (3) resultan

$$\begin{aligned} P\{c_{t+\Delta t} = 1 / c_t = 0\} &= k_{01} \Delta t \\ P\{c_{t+\Delta t} = 0 / c_t = 1\} &= k_{10} \Delta t \end{aligned} \quad (4)$$

Se destaca que el proceso aleatorio queda definido por dos constantes, k_{01} y k_{10} que son las tasas de probabilidad de transición.

Las relaciones recíprocas de las ecs. (3) son

$$\begin{aligned} P\{c_{t+\Delta t} = 0 / c_t = 0\} &= 1 - k_{01} \Delta t \\ P\{c_{t+\Delta t} = 1 / c_t = 1\} &= 1 - k_{10} \Delta t \end{aligned} \quad (5)$$

Estas ecuaciones representan las probabilidades de que durante un tiempo Δt el proceso no cambie de estado (no salte desde un estado hacia el otro).

III. ESTANCIA EN CADA UNO DE LOS DOS ESTADOS

Se deriva aquí la duración del tiempo de estadía en los estados $c = 0$ y $c = 1$. Para ello se asume que las transiciones entre ambos estados son instantáneas.

Sea $P\{c(t) = 0\}$ la probabilidad de que se verifique $c(t) = 0$, es decir, la probabilidad de que el flujo esté en la zona previa a la combustión (gases reactantes) para un tiempo t . Además, $P_{00}(t + \Delta t)$ es la probabilidad de que el proceso continúe en $c = 0$ durante una duración t , multiplicada por la probabilidad

condicional que el proceso no salte en el intervalo Δt dado que el estado $c = 0$ se ha mantenido durante la duración t . Entonces, se puede escribir

$$\begin{aligned} P_{00}(t + \Delta t) &= P\{c(t) = 0\} \\ &= P\{c \text{ no salte de } 0 \text{ a } 1 \text{ durante } \Delta t / c(t) = 0\} \\ &= P_{00}(t) (1 - k_{01} \Delta t) \end{aligned} \quad (6)$$

donde $k_{01} \Delta t$ es la probabilidad de que el proceso salte desde $c = 0$ hasta $c = 1$ durante un intervalo de tiempo Δt y $(1 - k_{01} \Delta t)$ es la probabilidad de que el proceso permanezca en $c = 0$ durante Δt .

Reorganizando la ec. (6) se obtiene

$$\frac{P_{00}(t + \Delta t) - P_{00}(t)}{P_{00}(t)} = -k_{01} \Delta t \quad (7)$$

Como se asume que el proceso de Markov es continuo (existe continuidad en la serie de datos), es posible tomar el límite $\Delta t \rightarrow 0$. Como resultado, la ecuación anterior que es de naturaleza discreta, se transforma en una ecuación diferencial ordinaria

$$\frac{d P_{00}(t)}{P_{00}(t)} = -k_{01} dt \quad (8)$$

Integrando esta ecuación se tiene

$$P_{00}(t) = e^{(-k_{01} t) \theta} \quad (9)$$

donde θ depende de la condición inicial considerada.

Si se asume como condición inicial $P_{00}(0) = 1$, se encuentra que $\theta = 1$, y la ec. (9) resulta

$$P_{00}(t) = e^{(-k_{01} t)} \quad (10)$$

La última ecuación establece que el tiempo en el estado $c = 0$ está distribuido exponencialmente.

La ecuación equivalente para el estado $c = 1$ ($P_{11}(t)$) se obtiene de manera similar, pero debe reemplazarse la tasa de probabilidad de transición k_{01} por k_{10} . Por lo tanto, ambas probabilidades verifican la Ley de Poisson

$$P\{c \text{ permanece en } 0 \text{ durante } dt\} = P_{00}(dt) = e^{-k_{01} dt} \quad (11)$$

$$P\{c \text{ permanece en } 1 \text{ durante } dt\} = P_{11}(dt) = e^{-k_{10} dt} \quad (12)$$

Es una característica de los procesos de Markov que tiempo de estancia (tiempo de espera en cualquier estado) tengan una distribución exponencial [15].

Note que desde la ec. (8) se puede evaluar la tasa de probabilidad de transición k_{01}

$$k_{01} = -\frac{d(\ln(P_{00}(t)))}{dt} \quad (13)$$

de forma similar puede encontrarse k_{10}

$$k_{10} = -\frac{d(\ln(P_{11}(t)))}{dt} \quad (14)$$

Estas dos últimas ecuaciones son útiles en caso que se tengan los valores del proceso y se desee determinar las tasa de probabilidad de transición.

Adicionalmente, desde las ecs. (11) y (12) se deducen las funciones densidad de probabilidad para el tiempo de estancia en los dos estados

$$f_{00}(t) = -\frac{d P_{00}(t)}{dt} = k_{01} e^{(-k_{01} t)} \quad (15)$$

$$f_{11}(t) = -\frac{d P_{11}(t)}{dt} = k_{10} e^{(-k_{10} t)} \quad (16)$$

IV. TIEMPO DE ESTANCIA MEDIO

Desde la ec. (15) es factible evaluar el tiempo de estancia medio para la fase $c = 0$

$$\bar{t}_r = \int_0^{\infty} t f_{00}(t) dt = \int_0^{\infty} t k_{01} e^{(-k_{01} t)} dt \quad (17)$$

donde \bar{t}_r es el tiempo de estancia medio para $c = 0$. Desde la ec. (17) se encuentra

$$\bar{t}_r = \frac{1}{k_{01}} \quad (18)$$

Es factible observar por medio de la ec. (12) que si \bar{t}_r aumenta, la probabilidad $P\{c \text{ permanece en } 0 \text{ durante } dt\}$ también se incrementa.

Si siguiendo un camino similar se encuentra desde la ec. (16) que

$$\bar{t}_p = \frac{1}{k_{10}} \quad (19)$$

siendo \bar{t}_p el tiempo de estancia medio para el estado $c = 1$.

V. PROBABILIDADES

Si se asume que durante todo el proceso las transiciones entre estados $c = 0 \rightleftharpoons c = 1$ son instantáneas, existen sólo dos posibilidades, que el proceso se encuentre para cada t en el estado $c = 1$ o en el estado $c = 0$.

La probabilidad de que el proceso se encuentre en $c = 1$ puede escribirse como

$$\begin{aligned} P_1(t + \Delta t) &= \\ &= P\{c(t) = 1\} \cdot P\{c \text{ permanece en } 1 \text{ durante } \Delta t\} + \\ &= P\{c(t) = 0\} \cdot P\{c \text{ salte de } 0 \text{ a } 1 \text{ durante } \Delta t\} \end{aligned} \quad (20)$$

donde $P_1(t + \Delta t)$ es la probabilidad que $c(t + \Delta t) = 1$ ($P\{c(t + \Delta t) = 1\}$). Por lo tanto, la ecuación anterior puede ser escrita como

$$\begin{aligned} P_1(t + \Delta t) &= P_1(t) \cdot P\{c \text{ permanece en } 1 \text{ durante } \Delta t\} + \\ &= (1 - P_1(t)) \cdot (1 - P\{c \text{ permanece en } 0 \text{ durante } \Delta t\}) \end{aligned} \quad (21)$$

donde se ha usado la siguiente notación

$$\begin{aligned} P_0(t) &= P\{c(t) = 0\}, \\ P_1(t) &= P\{c(t) = 1\}, \\ P_0(t) &= 1 - P_1(t), \\ P\{c \text{ salta de } 0 \text{ a } 1 \text{ durante } \Delta t\} &= \\ &= 1 - P\{c \text{ permanece en } 0 \text{ durante } \Delta t\} \end{aligned} \quad (22)$$

Introduciendo las ecs. (11) and (12) en la ec. (21) se obtiene

$$P_1(t + \Delta t) = P_1(t) \cdot e^{(-k_{10} \Delta t)} + (1 - P_1(t)) \cdot (1 - e^{(-k_{01} \Delta t)}) \quad (23)$$

Reorganizando la última ecuación

$$\frac{P_1(t+\Delta t)-P_1(t)}{\Delta t} = \frac{P_1(t) \left(e^{(-k_{10} \Delta t)} + e^{(-k_{01} \Delta t)} \right) - 2P_1(t) + 1 - e^{(-k_{01} \Delta t)}}{\Delta t} \quad (24)$$

Si se aplica $\lim_{\Delta t \rightarrow 0}$ en ambos miembros, se encuentra que el límite del segundo miembro es indeterminado. Para solucionar este problema se implementa la regla de L'Hôpital

$$\frac{dP_1(t)}{dt} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{-k_{01} e^{(-k_{01} \Delta t)} (P_1(t)-1) - k_{10} e^{(-k_{10} \Delta t)} P_1(t)}{1} \quad (25)$$

de esta forma se obtiene

$$\frac{dP_1(t)}{dt} = -(k_{10} + k_{01}) P_1(t) + k_{01} \quad (26)$$

cuya solución general resulta

$$P_1(t) = \frac{k_{01}}{k_{10} + k_{01}} + C e^{-(k_{10}+k_{01})t} \quad (27)$$

siendo C una constante que depende de la condición inicial $P_1(0)$

$$C = P_1(0) - \frac{k_{01}}{k_{10} + k_{01}} \quad (28)$$

La solución particular para una determinada condición inicial $P_1(0)$ es

$$P_1(t) = \frac{k_{01}}{k_{10} + k_{01}} (1 - e^{-(k_{10}+k_{01})t}) + P_1(0) e^{-(k_{10}+k_{01})t} \quad (29)$$

Si se asume que $P_1(0) = 1$, la ec. (29) puede ser escrita como

$$P_1(t) = \frac{k_{01}}{k_{10} + k_{01}} + \frac{k_{10}}{k_{10} + k_{01}} e^{-(k_{10}+k_{01})t} \quad (30)$$

Siguiendo un procedimiento similar es factible deducir la probabilidad para $P_0(t)$, es decir la probabilidad que para un tiempo t , la variable escalar verifique $c = 0$

$$P_0(t) = \frac{k_{10}}{k_{10} + k_{01}} (1 - e^{-(k_{10}+k_{01})t}) + P_0(0) e^{-(k_{10}+k_{01})t} \quad (31)$$

La utilización de la condición inicial $P_1(0) = 1$, implica que $P_0(0) = 0$. Por lo tanto, se tiene

$$P_0(t) = \frac{k_{10}}{k_{10} + k_{01}} (1 - e^{-(k_{10}+k_{01})t}) \quad (32)$$

Para $t \rightarrow \infty$, las probabilidades resultan

$$P_0(t \rightarrow \infty) = \frac{k_{10}}{k_{10} + k_{01}} \quad (33)$$

$$P_1(t \rightarrow \infty) = \frac{k_{01}}{k_{10} + k_{01}} \quad (34)$$

Si se introducen las ecs. (18) y (19) en estas expresiones, se obtiene

$$P_0(t \rightarrow \infty) = \frac{\bar{t}_r}{\bar{t}_r + \bar{t}_p} \quad (35)$$

$$P_1(t \rightarrow \infty) = \frac{\bar{t}_p}{\bar{t}_r + \bar{t}_p} \quad (36)$$

Note que la suma de las ecs. (29) y (31) verifica $P_0(t) + P_1(t) = 1$ (recuerde que $P_0(0) + P_1(0) = 1$)

A. Evaluación alternativa

En esta sección se desarrolla una forma alternativa de la deducción de las probabilidades $P_0(t)$ y $P_1(t)$. Para ello, se comienza desde la ec. (20)

$$P_1(t+dt) = P\{c(t) = 1\} \cdot P\{c \text{ permanezca en 1 durante } \Delta t\} + P\{c(t) = 0\} \cdot P\{c \text{ salte de 0 a 1 durante } \Delta t\} \quad (37)$$

donde

$$\begin{aligned} P_0(t) &= P\{c(t) = 0\}, \\ P_1(t) &= P\{c(t) = 1\}, \\ P_0(t) &= 1 - P_1(t), \\ P\{c \text{ permanezca en 1 durante } \Delta t\} &= e^{(-k_{10} \Delta t)}, \\ P\{c \text{ salte de 0 a 1 durante } \Delta t\} &= k_{01} \Delta t \end{aligned} \quad (38)$$

Por lo tanto la ec. (20) resulta

$$P_1(t + \Delta t) = P_1(t) e^{(-k_{10} \Delta t)} + (1 - P_1(t)) k_{01} \Delta t \quad (39)$$

Manipulando esta ecuación y tomando el límite $\lim_{\Delta t \rightarrow 0}$, se encuentra

$$\begin{aligned} \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left(\frac{P_1(t+\Delta t)-P_1(t)}{\Delta t} \right) &= \\ \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left(\frac{P_1(t) e^{(-k_{10} \Delta t)} + (1-P_1(t)) k_{01} \Delta t - P_1(t)}{\Delta t} \right) & \end{aligned} \quad (40)$$

De donde se obtiene

$$\frac{dP_1(t)}{dt} = -(k_{10} + k_{01}) P_1(t) + k_{01} \quad (41)$$

la cual es idéntica a la ec. (26).

Esta forma alternativa de deducción de la ec. (26) es más simple y directa que la previamente descrita.

VI. FUNCIÓN DE AUTO-CORRELACIÓN

La función de auto-correlación $R(t_1, t_2)$ de una señal $c(t)$ es al valor esperado del producto $c(t_1)c(t_2)$, siendo t_1 y t_2 dos instantes de tiempo [15]

$$R(t_1, t_2) = \overline{c(t_1)c(t_2)} = \sum_i \sum_j c_i c_j \{ \text{Probabilidad que } c(t_1) = c_i \} \cdot \{ \text{Probabilidad que } c(t_2) = c_j / c(t_1) = c_i \} \quad (42)$$

En una señal telegráfica, el producto $c(t_1)c(t_2)$ es diferente de cero solamente en el caso que $c(t_1) = c(t_2) = 1$. Por lo tanto, se puede re-escribir la ec. (42) como

$$R(t_1, t_2) = \overline{c(t_1)c(t_2)} = \frac{P\{c(t_1) = 1\}}{P\{c(t_2) = 1 / c(t_1) = 1\}} \quad (43)$$

donde / indica tal que.

Sin pérdida de generalidad se puede considerar $t_1 = t$ y $t_2 = t + \tau$. Entonces, la última ecuación puede ser expresada como

$$\begin{aligned} R(t, t + \tau) &= \overline{c(t)c(t + \tau)} = \\ P\{c(t) = 1\} \cdot P\{c(t + \tau) = 1 / c(t) = 1\} &= \\ P_1(t) \cdot P_1\{c(t + \tau)\} & \end{aligned} \quad (44)$$

donde la función $P_1(t)$ está dada por la ec. (30).

Se asume que el proceso de Markov es una función aleatoria estacionaria. Esto implica que $R(t, t + \tau) = R(\tau)$, es decir no depende de t [16], y es posible considerar un t muy grande

$$P_1\{t \rightarrow \infty\} \rightarrow \frac{k_{01}}{k_{10} + k_{01}} \quad (45)$$

además

$$P\{c(t + \tau) = 1 / c(t) = 1\} = P_1(\tau) / P_1(0) = 1 =$$

$$\frac{k_{01}}{k_{01} + k_{10}} (1 - e^{-(k_{01} + k_{10})t}) + e^{-(k_{01} + k_{10})t} \quad (46)$$

donde se han usado las ecs. (30) y (34).

De acuerdo a lo indicado, la función de auto-correlación está dada por

$$\begin{aligned} R(t, t + \tau) &= R(\tau) = \overline{c(t)c(t + \tau)} = \\ (k_{01} (k_{01} + k_{10} e^{-(k_{01} + k_{10})\tau})) & (k_{01} + k_{10})^{-2} \end{aligned} \quad (47)$$

En la ecuación anterior, se ha limitado implícitamente el análisis a valores positivos de tiempo $\tau \geq 0$. Sin embargo, también es factible analizar la probabilidad de que un evento "haya ocurrido" en el pasado. Evidentemente aquí todas las probabilidades presentan simetría con respecto al pasado y al futuro, por lo tanto $R(\tau) = R(-\tau)$ y la ecuación (47) es válida para todos los τ si se reemplaza τ por $|\tau|$ en su miembro derecho.

Cuando se considera $\tau = 0$, la función de auto-correlación resulta

$$\begin{aligned} R(t, t) &= R(0) = \overline{c(t)c(t)} = \\ \frac{k_{01}}{(k_{01} + k_{10})} &= \frac{1/\bar{t}_r}{(1/\bar{t}_r + 1/\bar{t}_p)} = \frac{\bar{t}_p}{(\bar{t}_r + \bar{t}_p)} \end{aligned} \quad (48)$$

y por medio de la ec. (34), se obtiene

$$R(t, t) = R(0) = P_1(t \rightarrow \infty) = \overline{c(t)} \quad (49)$$

siendo $\overline{c(t)}$ el valor medio de $c(t)$

$$\overline{c(t)} = \frac{\sum_{i=1}^N t_p}{\sum_{i=1}^N t_p + \sum_{i=1}^N t_r} = \frac{N \bar{t}_p}{N \bar{t}_p + N \bar{t}_r} = \frac{\bar{t}_p}{\bar{t}_p + \bar{t}_r} \quad (50)$$

donde N es el número total de ciclos $c = 1 + c = 0$. Tenga en cuenta que \bar{t}_r y \bar{t}_p se pueden calcular usando las ecs. (18) y (19) respectivamente, o por medio de

$$\bar{t}_r = \frac{\sum_{i=1}^N t_r}{N}, \quad \bar{t}_p = \frac{\sum_{i=1}^N t_p}{N} \quad (51)$$

Por otra parte, para $\tau \rightarrow \infty$ la función de auto-correlación resulta

$$\begin{aligned} R(\tau \rightarrow \infty) &= \left(\frac{k_{01}}{(k_{01} + k_{10})} \right)^2 = \\ P_1^2(t \rightarrow \infty) &= \left(\overline{c(t)} \right)^2 \end{aligned} \quad (52)$$

Es importante definir la función de auto-correlación adimensional

$$R^*(\tau) = \frac{\overline{c(t)c(t + \tau)} - \left(\overline{c(t)} \right)^2}{\overline{c(t)}(1 - \overline{c(t)})} = \frac{R(\tau) - \left(\overline{c(t)} \right)^2}{\overline{c(t)}(1 - \overline{c(t)})} \quad (53)$$

Por medio de las ecs. (49) y (52) se encuentra que la función de auto-correlación adimensional verifica:

$$R^*(0) = 1, \quad R^*(\tau \rightarrow \infty) \rightarrow 0 \quad (54)$$

VII. FUNCIÓN DE DENSIDAD ESPECTRAL

Una vez determinada la función de auto-correlación, se puede evaluar la densidad espectral utilizando el teorema de Wiener-Khinchin. Para dicha tarea se utiliza la metodología indicada en la referencia [17] y se implementa la transformada coseno de Fourier.

$$S(f) = \int_{-\infty}^{\infty} R(\tau) \cos(2\pi f \tau) d\tau \quad (55)$$

siendo $S(f)$ la función de densidad espectral y f la frecuencia. También, en este trabajo se utiliza la definición de $S(f)$ dada en <https://mathworld.wolfram.com/FourierTransform.html>.

Es importante destacar que se puede utilizar la ec. (55) porque la función de auto-correlación es simétrica respecto a valores positivos y negativos de τ , es decir la auto-correlación es una función par

$$E(\tau) = \frac{1}{2}(R(\tau) + R(-\tau)) = R(\tau) \quad (56)$$

Utilizando las ecs. (47) y (55) se encuentra la función de densidad espectral

$$S(f) = \frac{\left(\frac{k_{01}k_{10}(k_{01} + k_{10})(2/\pi)^{1/2}}{f^2 + (k_{01} + k_{10})^2} + k_{01}(2\pi)^{1/2}\delta(f) \right)}{(k_{01} + k_{10})^2} \quad (57)$$

También se puede escribir de la siguiente forma, donde se pone de relieve el término proporcional a la función delta de Dirac $\delta(f)$

$$\begin{aligned} S(f) &= \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{k_{10}k_{01}}{(k_{01} + k_{10})(f^2 + (k_{01} + k_{10})^2)} + \\ & \frac{\sqrt{(2\pi)}k_{01}^2\delta(f)}{(k_{01} + k_{10})^2} \end{aligned} \quad (58)$$

La función $\delta(f)$ proviene de la transformada de Fourier del término constante $\frac{k_{10}k_{01}}{(k_{01} + k_{10})^2}$ en la función de auto-correlación. Si no se considera el último término de la ec. (58), la densidad espectral se puede escribir como

$$S(f) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{k_{10}k_{01}}{(k_{01} + k_{10})(f^2 + (k_{01} + k_{10})^2)} \quad (59)$$

donde la dependencia de $S(f)$ en f^{-2} queda expuesta claramente.

En el caso particular que las tasas de probabilidad de transición sean iguales: $k_{01} = k_{10} = k$, la eq. (58) se reduce a [18]

$$S(f) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{k}{(f^2 + 2k^2)} + \frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{2}} \delta(f) \quad (60)$$

VIII. ESCALA INTEGRAL DE TIEMPO

Para determinar la tasa de reacción media \bar{w} es fundamental evaluar la escala integral de tiempo que posee la señal telegráfica.

La escala integral de tiempo depende de la función de auto-correlación adimensional $R^*(\tau)$ y se calcula mediante el siguiente integral

$$\hat{T} = \int_0^\infty R^*(\tau) d\tau \quad (61)$$

donde \hat{T} es escala integral de tiempo. Si se introduce la ec. (53) en ésta última, se obtiene

$$\hat{T} = \frac{1}{\overline{c(t)}(1 - \overline{c(t)})} \left(\int_0^\infty R(\tau) d\tau - \int_0^\infty \overline{c(t)}^2 d\tau \right) \quad (62)$$

Antes de continuar, la función de auto-correlación es expresada de otra forma. Para ello se comienza desde la frecuencia de una señal telegráfica de Markov

$$\nu = \frac{2}{\bar{t}_p + \bar{t}_r} \quad (63)$$

Si se introduce la relación entre los tiempos medios y las tasas de probabilidad transición, $\bar{t}_p = 1/k_{10}$ y $\bar{t}_r = 1/k_{01}$ en la ec. (63), se tiene

$$\nu = \frac{2k_{10}k_{01}}{k_{10} + k_{01}} \quad (64)$$

Desde esta última expresión se puede escribir

$$k_{10} + k_{01} = \frac{2k_{10}k_{01}}{\nu} = \frac{2k_{10}k_{01}}{\nu} \frac{(k_{10} + k_{01})^2}{(k_{10} + k_{01})^2} = \frac{2}{\nu} \overline{c(t)}(1 - \overline{c(t)}) (k_{10} + k_{01})^2 \quad (65)$$

donde se ha utilizado

$$\overline{c(t)} = \frac{\bar{t}_p}{\bar{t}_p + \bar{t}_r} = \frac{k_{01}}{k_{10} + k_{01}} \quad (66)$$

y

$$1 - \overline{c(t)} = \frac{k_{10}}{k_{10} + k_{01}} \quad (67)$$

Por otra parte, desde la ec. (65) se encuentra que

$$k_{10} + k_{01} = \frac{\nu}{2\overline{c(t)}(1 - \overline{c(t)})} \quad (68)$$

Si se relacionan las ecs. (47) and (68) se obtiene

$$R(t, t + \tau) = R(\tau) = \frac{1}{\overline{c(t)}^2 + \overline{c(t)}(1 - \overline{c(t)})} e^{\left(\frac{-0.5\nu\tau}{\overline{c(t)}(1 - \overline{c(t)})}\right)} \quad (69)$$

Además, en la ec. (69), se ha asumido que la función de auto-correlación no depende de t y que es solamente una

función del intervalo de tiempo $\tau = t_2 - t_1$, es decir es una función aleatoria estacionaria [16].

Por medio de la ec. (69), la integral de la función de auto-correlación resulta

$$\int_0^\infty R(\tau) d\tau = \frac{1}{\overline{c(t)}^2} \tau - \frac{\overline{c(t)}(1 - \overline{c(t)})}{\frac{0.5\nu}{\overline{c(t)}(1 - \overline{c(t)})}} e^{\left(\frac{-0.5\nu\tau}{\overline{c(t)}(1 - \overline{c(t)})}\right)} \Bigg|_0^\infty \quad (70)$$

Relacionando esta ecuación con la ec. (62), se obtiene

$$\hat{T} = -\frac{2\overline{c(t)}(1 - \overline{c(t)})}{\nu} e^{\left(\frac{-0.5\nu\tau}{\overline{c(t)}(1 - \overline{c(t)})}\right)} \Bigg|_0^\infty \quad (71)$$

Finalmente, la escala integral de tiempo puede escribirse como

$$\hat{T} = \frac{2\overline{c(t)}(1 - \overline{c(t)})}{\nu} \quad (72)$$

Esta ecuación introduce una relación entre la frecuencia ν y la escala integral de tiempo \hat{T} y el valor medio del escalar c

Ahora se está en condiciones de escribir la tasa de reacción media en llamas turbulentas premezcladas

$$\bar{w} = w_f \nu = w_f \frac{2\overline{c(t)}(1 - \overline{c(t)})}{\hat{T}} \quad (73)$$

Se destaca que el factor 2 en el numerador es una consecuencia directa de haber usado un proceso de Markov con tiempos de estadía descriptos por la Ley de Poisson dada en ecs. (11) y (12).

IX. CONCLUSIONES

Usando como base que el estado termodinámico fluctuante alrededor de llamas premezcladas turbulentas puede ser estudiado por medio una distribución de probabilidad bimodal de una variable escalar c que mide el progreso del proceso de combustión, en este trabajo se deducen de forma detallada los tiempos de estancia en cada estado, las funciones probabilidad de cada estado, la función de auto-correlación, la densidad espectral y la escala integral de tiempo del proceso. Finalmente se obtiene la frecuencia de pasaje, la cual se utiliza en la determinación de la tasa de reacción media o tasa media de creación de productos.

La variable c solamente puede adquirir dos valores $c = 0$ para los reactantes cuando la combustión no ha comenzado y $c = 1$ en los productos cuando el proceso de combustión ha finalizado. En este caso, la evolución del progreso de la combustión se reduce al análisis de una serie telegráfica aleatoria, la cual se estudia con un proceso de Markov que posee sólo dos estados. Dicho proceso es descripto mediante una función aleatoria estacionaria $X(t)$ para la cual las características probabilísticas de la función aleatoria $X(t + \Delta t)$, cualquiera sea el Δt considerado, coinciden idénticamente con las características correspondientes de la $X(t)$.

Como resultado de este estudio se encuentra una expresión para la tasa de reacción media que depende de la escala integral de tiempo y el valor medio de la variable progreso de la combustión c .

Esta investigación es un primer paso para tratar de encontrar un modelo de simulación de la turbulencia HTLES para llamas premezcladas. El trabajo futuro se concentrará en responder la siguiente pregunta: ¿Hasta qué punto las expresiones derivadas en un contexto RANS, que implican un filtrado en el tiempo considerando un intervalo infinito, siguen siendo válidas cuando se emplea un filtrado de tiempo que utilice un ancho de filtro finito? Para ello se considerará el recurso de la generación y procesamiento de señales telegráficas sintéticas que imiten señales reales extraídas de la literatura.

AGRADECIMIENTOS

Esta investigación ha sido financiada por CONICET, la Universidad Nacional de Córdoba. Además, CNRS e INRIA financiaron las estadías del Dr. Elaskar en la Universidad de Pau & Pays Adour y la del Dr. Bruel en Córdoba respectivamente.

Nuestro agradecimiento Laboratorio de Matemática Aplicada de la Universidad de Pau & Pays Adour y al Departamento de Ingeniería Aeroespacial de la Universidad Nacional de Córdoba por respaldar esta investigación.

El primer autor desea expresar el reconocimiento al Dr. José Tamagno, fallecido el año pasado, por sus valiosas enseñanzas y reflexiones.

REFERENCES

- [1] E. Brizuela, C. Dopazo, S. Elaskar, A. Fuentes, G. Hauke, J. Tamagno, C. Treviño, *Combustión. Teoría, Aplicaciones e Introducción al Cálculo*, Valletta Ediciones, Buenos Aires, 2016.
- [2] P. Nguyen, P. Bruel, S. Reichstadt, "An experimental database for benchmarking simulations of turbulent premixed reacting flows: lean extinction limits and velocity field measurements in a dump combustor," *Flow, Turbulence and Combustion*, vol. 82, pp. 155–183, 2009.
- [3] L. Gutiérrez Marcantoni, J. Tamagno, S. Elaskar, "rhoCentralRfFoam: An OpenFOAM solver for high speed chemically active flows – Simulation of planar detonations –", *Computer Physics Communications*, vol. 219, pp. 209–222, 2017.
- [4] L. Gutiérrez Marcantoni, J. Tamagno, S. Elaskar, "Two-dimensional numerical simulations of detonation cellular structures in H_2O_2Ar mixtures with OpenFOAM®", *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 42(41), pp. 26102–26113, 2017.
- [5] L. Gutiérrez Marcantoni, J. Tamagno, S. Elaskar, "A numerical study on the impact of chemical modeling on simulating methane-air detonations", *Fuel*, vol. 240, pp. 289–298, 2019.
- [6] G. Millán Barbany, *Aerothermochemistry*, Universidad Politécnica de Madrid, 2009.
- [7] F. Williams, *Combustion Theory*, Benjamin/Cummings, 2nd edition. Menlo Park, 1985.
- [8] A. Lipatnikov, *Fundamentals of Premixed Turbulent Combustion*, CRC Press, Boca Raton, 2012.
- [9] N. Peters, *Turbulent Combustion*, Cambridge University Press, Cambridge, 2004.
- [10] K. Bray, "The interaction between turbulence and combustion", *Seventeenth Symposium International on Combustion*, The Combustion Institute, Pittsburgh, 1979, pp. 223–233.
- [11] K. Bray, J. Moss, "A unified statistical model of the premixed turbulent flame", *Acta Astronautica*, vol. 4, pp. 291–319, 1977.
- [12] A. Libby, K. Bray, "Implications of the Laminar Flamelet Model in Premixed Turbulent Combustion", *Combustion and Flame*, vol. 39, pp. 33–41, 1980.
- [13] K. Bray, M. Champion, A. Libby, "Mean reaction rates in premixed turbulent flames", *Twenty-Second Symposium International on Combustion*, The Combustion Institute, 1988, pp. 763–769.

- [14] A. Afailal, J. Galpin, A. Velghe, R. Manceau, "Development and validation of a hybrid temporal LES model in the perspective of applications to internal combustion engines", *Oil & Gas Science and Technology - Rev. IFP Energies Nouvelles*, vol. 74, pp. 1–16, 2019.
- [15] A. Papoulis, S. Unnikrishna Pillai, *Probability, Random Variables, and Stochastic Processes*, 4rd ed. McGraw-Hill, Boston, 2002.
- [16] V. Pugachev, *Introducción a la Teoría de las Probabilidades*. Ed. Mir, Moscu, 1973.
- [17] N. Van Kampen, *Stochastic Porcesses in Physic and Chemistry*. Third Edition. North-Holland, 1984.
- [18] S. Machlup, "Noise in semiconductors: Spectrum of a two-parameter random signal", *Journal of Applied Physics*, vol. 25, pp. 341–343, 1954.

IEEE conference templates contain guidance text for composing and formatting conference papers. Please ensure that all template text is removed from your conference paper prior to submission to the conference. Failure to remove the template text from your paper may result in your paper not being published.