

0058 2  
14  
25



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA  
DE MEXICO

FACULTAD DE QUIMICA  
DIVISION DE ESTUDIOS DE POSGRADO

25 9483

**T E S I S**

APLICACION DE LA DINAMICA DE FLUIDOS  
COMPUTACIONAL AL ESTUDIO DE  
GASES REACTIVOS

P R E S E N T A

M. en C. JOSE ANTONIO RAMON MUÑOZ LEDO CARRANZA

PARA OBTENER EL GRADO DE

DOCTOR EN CIENCIAS QUIMICAS

( F I S I C O Q U I M I C A )

ASESOR: DR. MARCOS LEY KOO  
COASESOR: DR. AUSTER VALDERRAMA CANO



MEXICO, D. F.

CIUDAD UNIVERSITARIA

1998



Universidad Nacional  
Autónoma de México



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

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

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

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

# APLICACION DE LA DINAMICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL AL ESTUDIO DE GASES REACTIVOS.

## ABSTRACT

A computational package to analyze the combustion of liquid atomized light hydrocarbons has been developed and integrated in this work. Such analysis leads to, among others, an estimate of the composition of combustion products, at different stages of the process, as a function of the various parameters as the air - fuel ratio, the chemical composition of the fuel, the initial sizes and velocity distributions of fuel drops.

The package includes a set of computer programs to solve the differential equations that describing the evolution of the liquid atomized fuel as well as the dynamics of the air - fuel mixture, including the chemical kinetics; it is assumed, for computational purposes, a locally homogeneous flow in a cylindrical duct. A first approximation is obtained by assuming that the evolution of the spray and dynamics of the air - fuel mixture are independent processes; the approximate solution together with the change in time of the air - fuel mixture fraction allow the coupling of the processes and, thus, the modelling of the full combustion processes.

Concentration and temperature profiles, as functions of distance from the atomizer, have been obtained in this work for several fuel rates, drop size and velocity distributions assuming n-heptane.

## RESUMEN CONDENSADO

En este trabajo se desarrolla e integra un paquete computacional, para analizar la combustión de hidrocarburos ligeros, líquidos y atomizados; dicho análisis permite, entre otras cosas, estimar la composición de los productos en las distintas etapas del proceso, como función de diferentes parámetros como pueden ser la razón aire - combustible, la composición química del combustible, la distribución inicial de tamaños y la velocidades de gotas de combustible.

El paquete incluye un conjunto de programas de cómputo para resolver las ecuaciones diferenciales que describen la evolución del combustible líquido atomizado así como la dinámica de la mezcla aire - combustible, incluyendo la cinética química; para propósitos de cálculo se supone un ducto de geometría cilíndrica y un flujo localmente homogéneo. Para obtener la primera aproximación de la solución se propone una cantidad de combustible, a partir de esto se calcula el aire estequiométrico, la velocidad de flujo, densidad y se supone una distribución de temperaturas en el ducto. Con esta información se resuelven de forma independiente la evolución de la mezcla aire - combustible y la cinética química de reacción de la mezcla aire-combustible con el modelo que se propone en este trabajo, en la etapa posterior incluye como condiciones iniciales los resultados de la primera aproximación, los cuales en conjunto con la fracción mezcla y una diferencial de tiempo, permiten acoplar y modelar el sistema de combustión completo, para las condiciones dadas de mezcla aire - combustible.

En este trabajo se considero n-heptano como combustible, se proponen el gasto de combustible, las distribuciones de velocidades y tamaños de gotas; con lo cual se obtienen los perfiles de concentración de los productos de combustión y de temperaturas con respecto a la distancia del atomizador.

AL 'MAISTRO' QUE SIEMPRE  
DESEO QUE HICIERA ESTO,  
LASTIMA QUE SEA  
DEMASIADO TARDE.

RML >

¡Desdichado por mi juventud  
y por mi vejez detestable :  
por esta porque ha llegado;  
por aquélla, porque se ha ido!  
Teogonis (527 A.C.)

## AGRADECIMIENTOS

A mi esposa (MARY), y mis hijas (JANIS y BERE), por el tiempo que les quite y la paciencia que me han tenido.

A mi Madre (Doña Chole), mis hermanos (Guile, Lupe, Lita, Balta con sus familias) y sobrinos (Diana, Tony, Agus, Guile, Balta, etc.) que siempre me apoyaron y alentaron a continuar.

A mi familia política cuñados, concuños, sobrinos y especialmente a mis suegros (Sr. Eliseo y Sra. Soledad) por su ayuda incondicional.

A mis asesores y comite tutorial :

Dr. Marcos Ley Koo.  
Dr. Auster Balderrama Cano.  
Dr. Juan Rubén Varela Ham.  
Dr. Jesús Gracia Fadrique.

Por sus consejos, enseñanzas y paciencia que me tuvieron en el desarrollo de este trabajo.

A mis sinodales :

Dr. Jorge Ramírez Solis.  
Dr. Roberto Best Brown.  
Dr. Carlos Amador Bedolla.  
Dr. Luis Vicente Hinestroza.  
Dr. Federico Méndez Lavielle.  
Dr. Isaac Pilatowsky Figueroa.  
Dr. Sergio Trejo Martínez.  
Dra. Rina Guadalupe Aguirre.  
Dr. Luis Gerardo Ruiz Suarez.  
Dra. Ma. Teresa de la Selva.

Por las acertadas correcciones que hicieron en el documento final.

A los compañeros de trabajo en el IIE, en especial al 'PIRRUS' que es experto en mejorar la presentación de las figuras.

Como Instituciones agradezco al INSTITUTO DE INVESTIGACIONES ELECTRICAS, que me dio tiempo, facilidades y apoyo en la realización de este trabajo.

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT), que medio la cátedra patrimonial durante 30 meses.

## INDICE

PAGINA

ABSTRACT	
RESUMEN CONDENSADO	
RESUMEN	
NOMENCLATURA	
1.- INTRODUCCION	1
2.- HERRAMIENTAS DE DINAMICA DE FLUIDOS.	7
2.0 Fluidos.	7
2.1 Aproximación matemática del movimiento de un fluido.	8
2.2 Mezclas de fluidos.	9
2.2.1 Fluidos heterogéneos.	9
2.2.2 Fluidos homogéneos.	10
2.2.2.1 Formulación matemática de los modelos 'LHF'.	12
2.2.2.2 Aproximación LHF para una mezcla de fluidos.	12
2.2.2.3 Aproximación LHF para dos fluidos acoplados.	17
2.2.2.4 Flamas de gases con aproximación LHF.	25
2.3 Características del modelo 'LHF' aplicado.	33
3.- EVOLUCION DE LA MEZCLA AIRE - COMBUSTIBLE	38
3.1 Caracterización de sprays.	39
3.2 Historia por etapas de la vida de una gota.	43
3.2.1 Distribución de tamaños y velocidades de gotas.	43
3.2.2 Evaporación de gotas en un medio gaseoso.	48
3.2.2.1 Calculos termodinámicos en equilibrio.	48
3.2.2.2 Calculos termofísicos.	51
3.3 Fuerzas de arrastre de las gotas.	53
3.4 Dinámica de movimiento de las gotas.	54
3.5 Proposiciones para modelar un spray.	55
3.5.1 Parámetros de atomización.	55
3.5.2 Gasto de aire.	55
3.5.3 Perfiles de temperatura contra distancia.	56
3.5.4 Evaporación de gotas en el 'LHF'.	56
3.5.5 Evaporación calculada.	57
3.6 Modelación del spray.	61
3.6.1 Criterios para determinar un estado pseudo - estacionario.	61
3.6.2 Malla de distribución.	65
3.6.3 Diámetro medio Sauter (SMD).	65
3.6.4 Tiempo de residencia (gotas, por celda).	66
3.6.5 Tiempo de vida de las gotas.	66

	PAGINA
4.- CINETICA QUIMICA DE LA MEZCLA AIRE - COMBUSTIBLE.	67
4.1 Mecanismos cinéticos de reacción para hidrocarburos.	71
4.2 Representación numérica de la cinética química.	72
4.3 Métodos de solución de EDO.	73
4.4 Planteamiento del problema.	74
4.5 Resultados.	78
5.- PROPUESTA DEL MODELO DE COMBUSTION.	90
5.1.- Algoritmo Numérico (Diagramas y Procedimientos).	91
5.2.- Aproximación de la turbulencia (SSF).	93
5.3.- Resultados.	99
6.- DISCUSION DE RESULTADOS.	123
7.- CONCLUSIONES.	130
BIBLIOGRAFIA.	
APENDICE A ECUACIONES GENERALES DE BALANCE.	
APENDICE B MECANISMO PARA COMBUSTION DE HEPTANO.	
APENDICE C TEMPERATURA ADIABATICA	

## ABSTRACT

A computational package to analyze the combustion of liquid atomized light hydrocarbons has been developed and integrated in this work. Such analysis leads to, among others, an estimate of the composition of combustion products, at different stages of the process, as a function of the various parameters as the air - fuel ratio, the chemical composition of the fuel, the initial sizes and velocity distributions of fuel drops.

The package includes a set of computer programs to solve the differential equations that describing the evolution of the liquid atomized fuel as well as the dynamics of the air - fuel mixture, including the chemical kinetics; it is assumed, for computational purposes, a locally homogeneous flow in a cylindrical duct. A first approximation is obtained by assuming that the evolution of the spray and dynamics of the air - fuel mixture are independent processes; the approximate solution together with the change in time of the air - fuel mixture fraction allow the coupling of the processes and, thus, the modelling of the full combustion processes.

Concentration and temperature profiles, as functions of distance from the atomizer, have been obtained in this work for several fuel rates, drop size and velocity distributions assuming n-heptane.

## RESUMEN CONDENSADO

En este trabajo se desarrolla e integra un paquete computacional, para analizar la combustión de hidrocarburos ligeros, líquidos y atomizados; dicho análisis permite, entre otras cosas, estimar la composición de los productos en las distintas etapas del proceso, como función de diferentes parámetros como pueden ser la razón aire - combustible, la composición química del combustible, la distribución inicial de tamaños y la velocidades de gotas de combustible.

El paquete incluye un conjunto de programas de cómputo para resolver las ecuaciones diferenciales que describen la evolución del combustible líquido atomizado así como la dinámica de la mezcla aire - combustible, incluyendo la cinética química; para propósitos de cálculo se supone un ducto de geometría cilíndrica y un flujo localmente homogéneo. Para obtener la primera aproximación de la solución se propone una cantidad de combustible, a partir de esto se calcula el aire estequiométrico, la velocidad de flujo, densidad y se supone una distribución de temperaturas en el ducto. Con esta información se resuelven de forma independiente la evolución de la mezcla aire - combustible y la cinética química de reacción de la mezcla aire-combustible con el modelo que se propone en este trabajo, en la etapa posterior incluye como condiciones iniciales los resultados de la primera aproximación, los cuales en conjunto con la fracción mezcla y una diferencial de tiempo, permiten acoplar y modelar el sistema de combustión completo, para las condiciones dadas de mezcla aire - combustible.

En este trabajo se considero n-heptano como combustible, se proponen el gasto de combustible, las distribuciones de velocidades y tamaños de gotas; con lo cual se obtienen los perfiles de concentración de los productos de combustión y de temperaturas con respecto a la distancia del atomizador.

## RESUMEN

En este trabajo se estudia el proceso de la combustión de hidrocarburos ligeros, (de 1 a 10 carbonos), con el propósito de rastrear los cambios que sufren las especies químicas durante el proceso. Esto permitirá conocer de manera detallada, la cantidad y la calidad de las especies que se emiten, con lo cual podrían sugerirse las mezclas aire - combustible para obtener, la mayor eficiencia en la transformación de energía o reducir el número y la cantidad de especies contaminantes.

Para estudiar el proceso de combustión, cuando se utiliza un combustible líquido mezclado con aire, se separa el mismo en tres grandes subprocesos:

i.- Evolución del combustible líquido fraccionado en gotas e inyectado en el flujo de aire (spray).

ii.- Dinámica de la mezcla aire-combustible.

iii.- Cinética química de reacción.

Cada subproceso se representa con un grupo de variables, las cuales al interactuar entre si permiten dar una descripción aproximada del proceso de combustión.

Para desarrollar este trabajo primeramente se busco información en la literatura, encontrando que autores como Spalding (57, 58, 59), Faeth (18) y Kuo (39); presentan problemas en donde modelan la evolución de mezclas de fluidos; para desarrollar su trabajo estos autores hacen suposiciones, acotaciones y proponen condiciones para determinar las velocidades axial y radial de diferentes mezclas de fluidos; tomando como base los resultados de combustión de propano y pentano presentados por Faeth (18) y Kuo (39), se calculan para este trabajo las velocidades axiales y radiales de la mezcla aire-combustible.

El modelo del spray, parte de suponer que se puede describir el mismo mediante las distribuciones de tamaños y velocidades de gotas. En la evolución o avance del 'spray', se consideran las velocidades axial y radial de la mezcla aire-combustible, calculadas por similaridad a partir de los trabajos de Faeth (18) y Kuo (39). Habrá que hacer notar que la distribución de temperatura y los valores velocidad intervienen directamente en los subprocesos de evaporación y evolución temporal de la mezcla aire - combustible; en los resultados se puede observar la dependencia del tamaño de gota con la evaporación, el tiempo de vida de las gotas, así como la trayectoria y velocidad de las gotas.

La parte cinética del proceso de combustión, se simula mediante el mecanismo cinético de reacción propuesto por Sarv et. al. (51) para aire - n-heptano en donde se especifican las especies y reacciones químicas, que toman parte. Se determina la evolución en cantidad y número de las especies con las variables de dinámica de fluidos, lo cual incide directamente en las concentraciones de especies y la temperatura que se genera en la combustión; los cálculos se hacen suponiendo que el proceso es adiabático.

Para integrar las Ecuaciones Diferenciales Ordinarias (EDO) que simulan el mecanismo cinético de reacción, se considera inicialmente un intervalo de tiempo de  $1 \times 10^{-15}$  segundos, con el cual se calculan las concentraciones, tolerancia y precisión; sin embargo si se obtienen concentraciones negativas (sin significado físico), tolerancia fuera de rango o alguna otra inconsistencia, entonces se reinicializa el programa ajustando el paso de integración. Se encontró que para mezclas aire - n-heptano, con fracción mezcla entre 0.03 y 0.25, el tiempo de reacción es menor a 0.001 segundos (ver figura 4.9).

Finalmente se acoplan la evolución del spray con las variables dinámicas del fluido y la cinética química de reacción, considerando que los tres grupos de actividades anteriores se desarrollan simultáneamente en la mezcla aire - combustible, determinándose de esta la distribución aire, combustible, y especies reactivas con respecto a la distancia del difusor en donde se inyecta la mezcla aire - combustible.

En este trabajo se obtuvieron los programas de cómputo para SIMULAR LA EVOLUCION DEL SPRAY y resolver los MECANISMOS CINETICOS DE REACCION. Esto permite modelar el proceso de combustión de hidrocarburos líquidos con aire. Los programas de cómputo elaborados, se utilizaron para modelar el proceso de combustión de n-heptano con aire, en este caso, se le limitaron las variables de entrada en los siguientes rangos :

a).- Gasto de combustible entre 1 y 50 gramos por segundo, estequiométricamente se calcula el gasto de aire.

b).- Las distribuciones de tamaños y velocidades de gotas, se especifican indicando el número de gotas, y las frecuencias de tamaños y velocidades.

c).- Se determina el alcance máximo del spray, dando los diámetros del difusor, el atomizador y la velocidad del flujo de aire; para un gasto de combustible específico, al trazar la evaporación y evolución de las gotas se determina la distancia máxima en que se encuentran presentes.

d).- Se inician los procesos de evaporación y combustión con un perfil de temperaturas contra distancia propuesto, una vez que el sistema evoluciona hasta un estado pseudo-estacionario, el perfil de temperaturas se va recalculando.

e).- En el presente trabajo solo se incluyen los resultados del mecanismo cinético de reacción para aire - n-heptano, pero de forma alterna, mediante la utilización del GENERador de CODigo (GENCOD), (70) se han resuelto los mecanismos cinéticos de reacción para METANO, PROPANO, BUTANO y PENTANO.

## NOMENCLATURA

- $a_g$  aceleración de la gravedad.
- $\vec{a}$  aceleración.
- $a_x$  aceleración de la gota en dirección 'x'.
- $a_y$  aceleración de la gota en dirección 'y'.
- B número de transferencia. ec (4.5).
- c capacidad calorífica del vapor.
- $C_D$  coeficiente de arrastre.
- $C_{DM}$  coeficiente de arrastre con transferencia de masa.
- $C_\mu$  constante turbulenta a viscosidad absoluta.
- $C_\epsilon$  constante turbulenta para la fracción de flujo.
- $C_g$  constante turbulenta para la fase gaseosa.
- d diámetro de la gota.
- d() derivada.
- D() derivada substancial.
- dA diferencial de Area superficial de la gota.
- $dV_l$  diferencial del volumen del liquido.
- $dV_v$  diferencial del volumen del vapor.
- DSF flujos separados determinísticamente
- $dW^{rev}$  intercambio de trabajo reversible.
- e energía interna.
- $\bar{f}$  fracción mezcla promediada en el tiempo.
- $f_k$  fuerza externa por unidad de masa sobre la especie k'esima.
- F fuerza.
- $F_x$  fuerzas de Stokes en dirección x, ec. (5.2).
- $F_y$  fuerzas de Stokes en dirección y, ec. (5.3).
- H calor de combustión.
- $J_i$  rapidez de cambio de masa en la reacción i por unidad de volumen.
- k conductividad térmica del vapor.
- $K(j)$  constante de velocidad de reacción de la reacción j.
- LHF aproximación de flujo localmente homogéneo.
- $M_{ox}$  concentración de oxígeno.
- $m_i$  masa del i'esimo componente.
- $m_o$  masa inicial de la gota liquida.
- $\dot{m}$  masa de liquido evaporada en un periodo de tiempo.
- $M_A$  peso molecular del elemento 'A'.
- $N_c$  número de componentes.
- $n_e$  número de especies.
- $n_r$  número de reacciones.

## II APLICACION DE LA DINAMICA DE FLUIDOS...

$p$  presión.

$Q$  calor latente a la Temperatura de ebullición del liquido.

$\vec{q}$  vector de flujo de calor (difusión, conducción, Dufour<sup>(37)</sup>).

$\dot{Q}$  calor de combustión.

$r_0$  es el radio inicial del flujo, conocido al fijar el 'LHF'.

$r$  coordenada radial.

$r$  distancia radial.

$r_{\min}$  radio mínimo.

$r_{\max}$  radio máximo.

$R_E$  número de Reynolds.

$S_\phi$  termino fuente.

$\phi = 1$  ; masa.

$\phi = \bar{u}$  ; velocidad axial.

$\phi = \bar{v}$  ; velocidad radial.

$\phi = \bar{w}$  ; velocidad tangencial.

$\phi = \bar{f}$  ; fracción mezcla.

$\phi = k$  ; energía cinética turbulenta.

$\phi = \epsilon$  ; velocidad de disipación energía cinética turbulenta.

$\phi = g$  ; fluctuaciones de concentración.

$\phi = H$  ; entalpia total de mezclado.

$\phi = \bar{Y}_i$  ; concentración de especies.

$\bar{\phi}$  cantidades promediadas en el tiempo.

SSF flujos separados estocasticamente

SMD diámetro Medio Sauter.

$t$  tiempo.

$t_r$  tiempo de residencia.

$T_a$  temperatura de la atmósfera.

$T_b$  temperatura de ebullición del combustible liquido.

$u_c$  velocidad en la dirección axial.

$\bar{u}_c$  velocidad axial promediada en el tiempo.

$u_0$  velocidad inicial del flujo, se fija con el 'LHF'.

$\bar{u}$  velocidad del flujo gaseoso (aire - combustible).

$u_x$  componente de velocidad en dirección x.

$u_y$  componente de velocidad en dirección y.

$u_z$  componente de velocidad en dirección z.

$u'$  velocidad por esfuerzo de Reynolds en dirección x.

$v$  velocidad local.

$\bar{v}^0$  velocidad radial pesada, promediada en tiempo.

$\bar{V}_k$  velocidad de difusión de masa de la k'esima especie.

$V_x$  velocidad de desplazamiento del fluido en dirección x.

$v_x$  velocidad de la gota en dirección x.

$v_y$  velocidad de la gota en dirección y.

$v_{x0}$  velocidad inicial de la gota en dirección 'x'.

$v_{y0}$  velocidad inicial de la gota en dirección 'y'.

$v'$  velocidad por esfuerzo de Reynolds en dirección 'y'.

$\bar{V}_l$  volumen molar del liquido.

$\bar{V}_v$  volumen molar del vapor.

x distancia axial.

$x_0$  posición inicial de la gota en dirección 'x'.

$x_f$  posición final de la gota en dirección 'x'.

y distancia perpendicular al punto del esfuerzo de corte.

$y_0$  posición inicial de la gota en dirección 'y'.

$y_f$  posición final de la gota en dirección 'y'.

$Y_k$  fracción masa de la k'esima especie.

z coordenada espacial.

$\theta$  ángulo de salida del combustible liquido.

$\rho$  densidad.

$\rho_A$  densidad del elemento A.

$\bar{\rho}$  densidad promedio en el tiempo.

$\rho_\infty$  densidad en las condiciones del SPRAY.

$\mu$  viscosidad dinámica.

#### IV APLICACION DE LA DINAMICA DE FLUIDOS...

$\mu'$  viscosidad volumetrica.

$\mu_t$  viscosidad turbulenta.

$\nu$  viscosidad cinematica.

$\tau$  tensor de esfuerzos de corte.

$\phi$  disipación por esfuerzos viscosos.

$\sigma$  esfuerzo de corte.

$\sigma$  desviación estándar.

$\sigma$  tensión superficial.

$\sigma_k$  relación PRANDTL/SCHMIDT (energía cinética turbulenta).

$\sigma_\epsilon$  relación PRANDTL/SCHMIDT (disipación de energía cinética turbulenta).

$\sigma_f$  relación PRANDTL/SCHMIDT (fracción mezcla).

$\sigma_g$  relación PRANDTL/SCHMIDT (concentración de fluctuaciones).

$\sigma_{\bar{u}}$  relación PRANDTL/SCHMIDT a la velocidad axial promediada en el tiempo.

$\sigma_{\bar{f}}$  relación PRANDTL/SCHMIDT a la fracción mezcla promediada en el tiempo.

$\nabla$  divergencia.

$\nu$  razón estequiométrica oxidante/combustible.

$\Delta t$  diferencial de tiempo.

## 1.- INTRODUCCION.

Uno de los procesos que mayormente se usa en la actualidad para la obtención de energía es la combustión de hidrocarburos.

Los estudios de combustión son complejos y costosos, debido a que las instalaciones para realizar experimentos y los instrumentos asociados, tienen un elevado costo. Por otro lado, los adelantos en computación permiten que cada vez más, los sistemas biológicos, sociales, químicos, físicos, ... , etc., puedan ser estudiados mediante modelación matemática (3), que es una herramienta que aplicada sistemáticamente, permite estudiar el comportamiento idealizado de los procesos que se dan en este tipo de sistemas.

Para describir el proceso de combustión mediante un modelo matemático se necesitan especificar las condiciones del proceso de combustión, entre las que destacan: el tipo de combustible, la cantidad de aire para oxidarlo y la temperatura a la que se lleven a cabo las reacciones químicas, que a su vez generarán, por un lado, una cantidad de energía y, por otro, una mezcla de gases, con una composición que estará determinada por las condiciones en que se lleven a cabo las reacciones (69).

Básicamente el proceso de combustión de hidrocarburos se puede dar con dos tipos de combustible :

i).- Si el combustible es gaseoso, la etapa en que se mezcla el aire con el combustible y se oxida, no presenta mayor problema desde el punto de vista del proceso mismo; sin embargo, su descripción, para propósito de modelación, pudiera complicarse puesto que tendrían que especificarse mediante diferentes ecuaciones las características del combustible gaseoso y del aire de manera tal que, dependiendo de las condiciones dinámicas (32) se establecieran las condiciones de la mezcla aire - combustible.

ii).- Si el combustible es líquido entonces la mezcla aire - combustible que precede a la oxidación se logra a través de una atomización que consiste en la producción de partículas o gotas muy finas de combustible líquido en el flujo de aire (spray).

En el caso de los combustibles líquidos, la atomización (41) generalmente se realiza mediante dispositivos mecánicos, aprovechando las condiciones dinámicas del aire de combustión para modificar la distribución de tamaños de gotas que proporciona un equipo dado. Una vez que el spray se ha producido, las condiciones dinámicas y termodinámicas en que este está inmerso, influyen en el tamaño de las gotas debido a la evaporación de combustible en las mismas (17), lo cual da origen a una mezcla gaseosa (aire - combustible) con gotas de combustible líquido. Esto sugiere que, desde el punto de vista de modelación, es más simple proponer un modelo de una sola fase para estudiar la evolución, tanto temporal como espacial del spray; que desarrollar un modelo

## 2 APLICACION DE LA DINAMICA DE FLUIDOS...

en que se describa la dinámica de mezclado aire - combustible gaseoso con sus respectivas ecuaciones como si fueran dos fases diferentes.

El proceso de evaporación del combustible líquido depende de la temperatura, la cual genera una mayor o menor cantidad de combustible gaseoso, que al combinarse con el flujo de aire presenta dos posible efectos :

i).- Distribución de gotas de líquido con diferentes tamaños que son arrastradas en la dirección del flujo.

ii).- Si las condiciones son apropiadas se llevaran a cabo las reacciones químicas. Al proceso químico se le denomina cinética de combustión. Es claro que la dinámica del flujo aire-combustible y los procesos de transporte serán determinantes en la eficiencia del proceso de combustión, por lo cual un modelo matemático que caracterice al mismo debe de incluir los fenómenos de evaporación de las gotas, transferencia de momentum y energía (26, 43, 55).

Una vez que se cuenta con la mezcla aire - combustible, es importante conocer sus composición de manera tal que se establezcan las posibles reacciones que podrán llevarse a cabo (9). Esto determina las características del medio en el cual evoluciona el spray. Conviene señalar que el detalle con el que se conozca la composición de la mezcla determinará el grado de precisión con la que pueda describirse la evolución espacio - temporal del spray. En efecto, si solo se conoce la composición elemental del combustible, se obtendrá información sobre la composición final de los productos, con lo cual no es posible hacer una descripción cinética completa del proceso; sin embargo, si la composición de la mezcla aire - combustible se proporciona en términos de todos los compuestos químicos posibles de acuerdo con el mecanismo cinético de reacción, será posible analizar las reacciones (4, 21) de disociación, oxidación, etc. de manera tal que la evolución temporal de la composición química del medio circundante al spray puede modelarse. Para este propósito conviene introducir el concepto de mecanismo cinético de reacción, el cual involucra las reacciones que pueden ocurrir entre reactivos y productos intermedios antes de obtener los productos de combustión finales como son dióxido de carbono  $\text{CO}_2$ , agua  $\text{H}_2\text{O}$ , nitrógeno  $\text{N}_2$ , monóxido de carbono  $\text{CO}$  y aire ó combustible remanentes; es importante hacer notar, que no todas las reacciones que se presentan en los mecanismo cinéticos de reacción están determinadas para un intervalo de tiempo. En consecuencia, se hace necesario contar con procedimientos que permiten probar diferentes mecanismos cinéticos de reacción (70) para un combustible dado.

El objetivo general de este trabajo es simular la combustión de hidrocarburos ligeros, tratándolos como un flujo reactivo y obtener con ello una herramienta que nos permita el análisis del proceso de combustión.

Físicamente el problema se puede describir como un ducto concéntrico y axisimétrico por donde se inyectan combustible líquido y aire a presión;

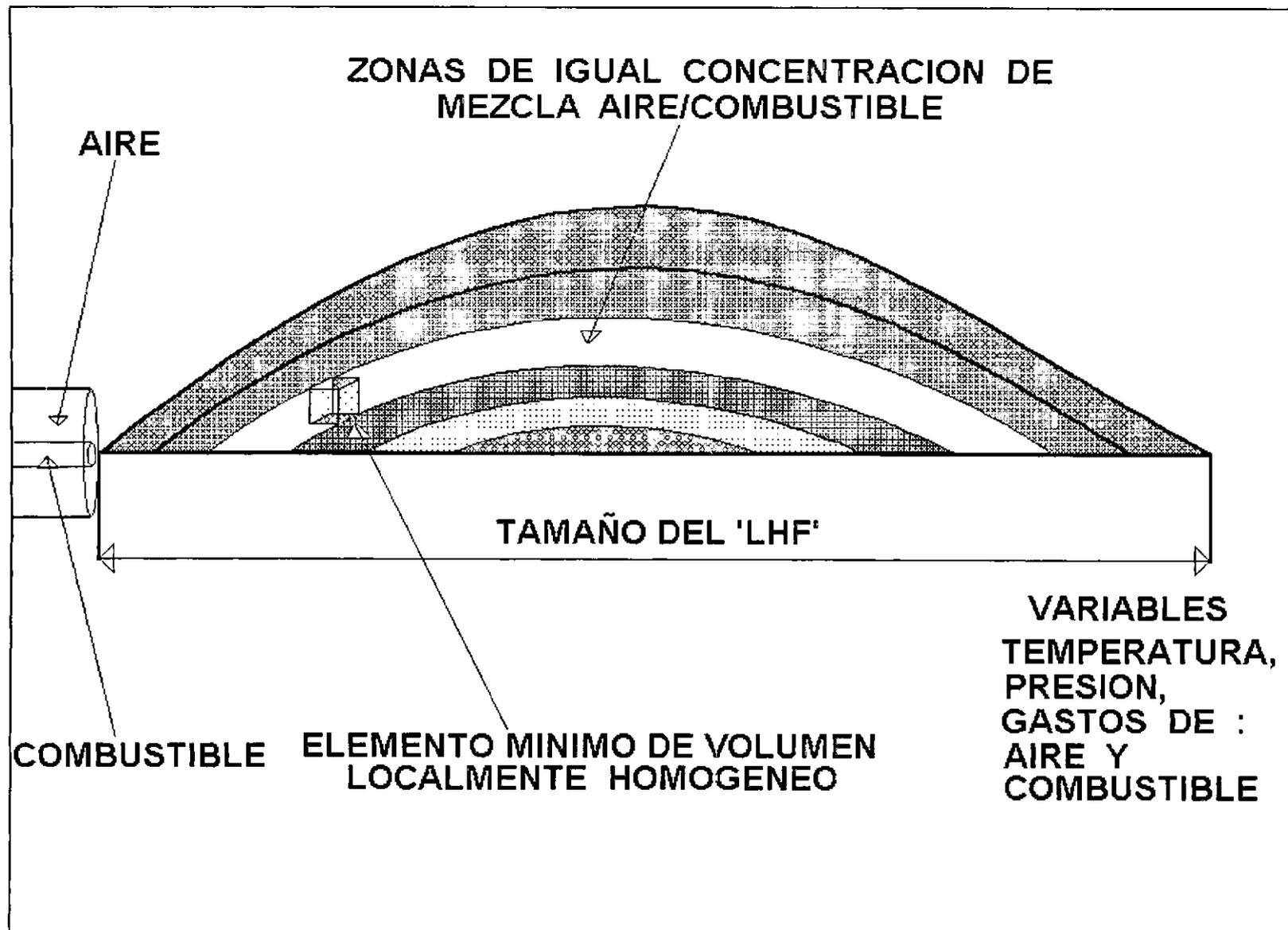


Figura 1 Descripción del problema físico en la combustión de una mezcla aire - combustible líquido.

#### 4 APLICACION DE LA DINAMICA DE FLUIDOS...

el combustible líquido se fracciona en gotas las cuales al sumergirse en el flujo de aire se integran totalmente al mismo, para lo cual se considera que se forma un flujo homogéneo, que se desplaza en la dirección del flujo de aire y formando algunas zonas de igual concentración de mezcla aire - combustible; los parámetros que intervienen en el proceso y su evolución se pueden observar en la figura # 1.

En el presente trabajo se propone estudiar la combustión a partir de los siguientes grupos de actividades :

1.- La evolución del flujo gaseoso, formado por aire y combustible, la cual se describe a través de la DINAMICA DE FLUIDOS.

2.- El fraccionamiento de una película de combustible líquido en pequeñas gotas (atomización), aumenta el área de contacto del combustible líquido con la atmósfera gaseosa, disminuyendo la tensión superficial del líquido e incrementando la evaporación; a la incorporación del combustible atomizado al flujo gaseoso se le denomina proceso de FORMACION DEL SPRAY.

3.- Las reacciones químicas que se llevan a cabo en la mezcla aire - combustible, las cuales estarán contempladas en los MECANISMOS CINETICOS.

Las ecuaciones de transporte para las partículas de líquido (gotas) son incluidas mediante Ecuaciones Diferenciales Parciales 'EDP' similares en forma a las del fluido, según la aproximación que propone Faeth (18). Una revisión bibliográfica de la forma como se estudia la cinética química de reacción en el proceso de combustión, nos indica que existen dos maneras generales de abordar el problema :

1.- Mediante mecanismos cinéticos de reacción globales (9, 20, 21, 23, 53, 61, 74, 75), en donde con 4 ó 5 especies y menos de 10 reacciones, se expresa la parte química de la combustión.

2.- Con el uso de mecanismos cinéticos de reacción detallados (12, 16, 28, 51, 56, 68, 71), en donde existen un número variable de especies y reacciones químicas para representar la parte química de la combustión.

El estudio de la cinética química detallada de la combustión es una tarea aún no concluida y presenta uno de los principales problemas en este tipo de estudios y es justamente una propuesta en esta dirección lo que se esta desarrollando y acoplado en este trabajo.

Los resultados más relevantes de este trabajo corresponden a la cinética química que se incorpora al estudio que se hace del proceso de combustión. Los mecanismos cinéticos de reacción reportados en la literatura fueron representados mediante ecuaciones diferenciales ordinarias (EDO) que resultan de la cinética química involucrada, además de que implemento un método numérico para resolver el sistema en EDO.

En la realización de este trabajo se modela el proceso de combustión de n-

heptano con aire, para lo cual se propone el diagrama general del proceso que se puede observar en la figura # 2.

El diagrama general del proceso de combustión muestra tres grupos de actividades principales, (SPRAY - DINAMICA DE FLUIDOS - MECANISMOS CINETICOS), en la parte superior. En orden descendente se tiene la desagregación de actividades; actividades con ligas múltiples, (dinámica de fluidos, la fracción mezcla e intervalo de tiempo), presentan la dependencia e interacción (acoplamiento) entre las secciones propuestas para estudiar la combustión de n-heptano con aire.

El diagrama general que se propuso para modelar la combustión tiene una estructura cíclica, por lo tanto si alguna variación se da, en cualquiera de las actividades, esta incidirá en las variables restantes del sistema y generará modificaciones recurrentes hasta alcanzar un estado pseudo-estacionario.

En resumen, el estudio del proceso de combustión de combustibles líquidos involucra la descripción y evolución de la mezcla aire - combustible, (spray), en términos de las condiciones físicas del medio circundante; las características de la evaporación de gotas para establecer las especies químicas; los mecanismos cinético químicos en los cuales pueden intervenir dichas especies y las condiciones termodinámicas y químicas del medio que se genera en la evolución del spray; haciéndose notar que la dinámica del medio jugará un papel importante.

En el presente documento se describe la forma en que las secciones del diagrama de la figura 2, así como su interacción, conforman el modelo del proceso de combustión propuesto.

En este documento el capítulo 1, introduce el problema de combustión, describe las herramientas utilizadas y justifica el planteamiento y la solución que se obtiene.

El capítulo 2, contiene la descripción de las herramientas de dinámica de fluidos con que se modelaran la evolución espacio - temporal de la mezcla aire - combustible y la cinética química de reacción.

En el capítulo 3, se encuentran las suposiciones, condiciones y resultados de la evolución espacio - temporal de la mezcla aire - combustible, sin considerar la presencia de reacciones químicas.

El capítulo 4, presenta el desarrollo de la cinética química con la dinámica de fluidos, sin tomar en cuenta la evolución de la mezcla aire combustible.

El capítulo 5, muestra los resultados de acoplar la evolución espacio temporal de la mezcla aire - combustible con la cinética química de reacción a través de la dinámica de fluidos y considerando la teoría estadística de la turbulencia.

En los capítulos 6 y 7 están la discusión de resultados y las conclusiones respectivamente, mientras que en los apéndices se encuentran las herramientas que se usaron y los principales resultados.

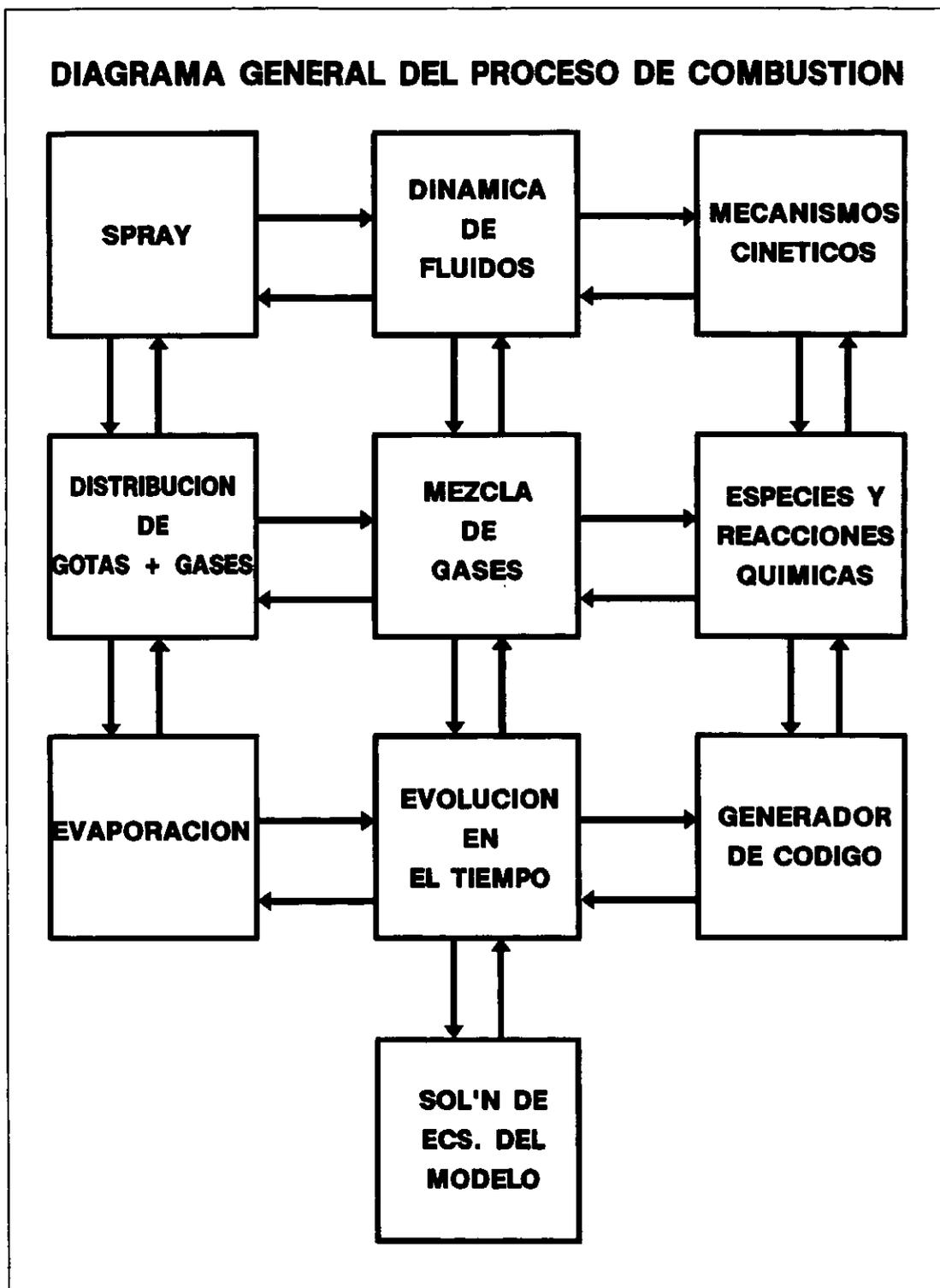


Figura 2 Diagrama propuesto para modelar el proceso de combustión de una mezcla aire - n-heptano.

## 2.- HERRAMIENTAS DE DINAMICA DE FLUIDOS.

En este capítulo se describen lo que es un fluido, también algunos problemas de la dinámica de fluidos encontrados en la literatura (18, 19, 39, 57, 58, 59). De las condiciones y suposiciones que se hacen en estos trabajos se obtiene la información necesaria para desarrollar la dinámica de fluidos en el problema que nos interesa modelar. Después de la definición de un fluido, se incluyen aproximaciones y modelos propuestos para representar el movimiento de los fluidos y sus mezclas.

### 2.0 Fluidos.

Un fluido se define como un material que sufre una continua deformación en presencia de esfuerzos de corte, los fluidos son estudiados a partir de las leyes de movimiento de Newton (33):

$$\vec{F} = m\vec{a} \quad 2.1$$

Una forma alternativa de expresar el mismo efecto pero como un componente del tensor de esfuerzos de corte es :

$$\tau_{yx} = -\mu \frac{dv_x}{dy} \quad 2.2$$

En el estudio del movimiento de los fluidos, estos se consideran como un conjunto de partículas con las propiedades promedio del grupo y una trayectoria libre media muy pequeña, en comparación con las dimensiones del problema. Como el fluido está en movimiento en un punto dado del sistema, el grupo se renueva constantemente, a esta distribución del fluido se le denomina 'continuum' (33).

En la dinámica de fluidos, si la observación del 'continuum' se realiza en un punto de coordenadas fijo, y a medida que en éste punto de observación se renueva el 'continuum' como una función del tiempo, se dice que se hace una descripción EULERIANA, y se considera la mejor forma para estudiar el movimiento del fluido, ya que puede proporcionarnos patrones de flujo, campos de concentración, etc.

En caso contrario, si la observación se hace sobre una sección del fluido y esta se mueve a través del sistema coordinado con el paso del tiempo, esta descripción se conoce como LAGRANGIANA, esta descripción es la menos usada en el estudio de flujo de fluidos, ya que su interés es principalmente en

## 8 APLICACION DE LA DINAMICA DE FLUIDOS...

la historia y tiempo de vida de partículas de fluido, como lo es el caso de este trabajo, en que se traza el movimiento de gotas líquidas de combustible inmersas en un flujo de aire.

### 2.1 Aproximación matemática del movimiento de un fluido.

Para estudiar un fluido en movimiento, se recurre al principio universal conocido como balance en el cual se examina para un espacio o volumen determinado, la entrada, salida, generación y acumulación de masa, movimiento y energía. Estas leyes básicas dan lugar a las denominadas 'ECUACIONES DE BALANCE' y son las siguientes :

- 1).- Ecuación de conservación de masa (2.3).
- 2).- Ecuación de conservación de cantidad de movimiento (2.4).

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -(\nabla \cdot \rho \mathbf{u}). \quad 2.3$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho \mathbf{u} = -(\nabla \cdot \rho \mathbf{u} \mathbf{u}) - \nabla p - (\nabla \cdot \boldsymbol{\tau}) + \rho \mathbf{a}_g \quad 2.4$$

- 3).- Ecuación de conservación de energía (2.5).

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{1}{2} \rho u^2 \right) = -(\nabla \cdot \frac{1}{2} \rho u^2 \mathbf{u}) - (\nabla \cdot p \mathbf{u}) - \rho (-\nabla \cdot \mathbf{u}) - (\nabla \cdot [\boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{u}]) - (-\boldsymbol{\tau} : \nabla \mathbf{u}) + \rho (\mathbf{u} \cdot \mathbf{a}_g) \quad 2.5$$

Las representación de las ecuaciones de balance que se utilizan en este trabajo, se puede consultar en el APENDICE A. La descripción realizada corresponde a un sistema en una sola fase y un solo componente, si el fluido contiene más de un componente o más de una fase, aunque las leyes o principios básicos sean los mismos, se incrementará el número de ecuaciones ya que estas mismas ecuaciones se aplicaran también a las nuevas fases o nuevos componentes.

De las ecuaciones anteriores se puede observar que para describir el movimiento de un fluido, se necesitan al menos cinco ecuaciones independientes, normalmente, estas son : tres ecuaciones de conservación de cantidad de movimiento (una para cada componente del vector de velocidad  $u_x$ ,  $u_y$ ,  $u_z$ ), la ecuación de conservación de masa y la ecuación de conservación de energía. A menudo se introduce de forma adicional, una ecuación de estado para asegurar que la ecuación de conservación de energía quede en función de la temperatura, densidad y presión, en este caso, el sistema se describe con

seis ecuaciones y seis incógnitas ( $u_x, u_y, u_z, \rho, T$  y  $p$ ).

Para un fluido incomprensible de densidad conocida no es necesaria la ecuación de energía, por lo tanto si se conoce el cambio de presión con la velocidad se puede describir completamente el flujo del fluido (39), esto significa que la densidad se mantiene constante  $\rho = cte.$  en la ecuación A.1 y por lo tanto la divergencia de la velocidad es igual a cero.

$$(\nabla \cdot \vec{v}) = 0. \quad 2.6$$

Si en la ecuación de cantidad de movimiento además de la densidad, se considera constante la viscosidad  $\mu = cte.$ , la ecuación A.2 en donde se incluye la ecuación 2.6 se reduce a la ecuación de Navier Stokes (8):

$$\rho \frac{D\vec{v}}{Dt} = -\nabla p + \mu \nabla^2 \vec{v} + \vec{a}_g \rho. \quad 2.7$$

y si no se tiene movimiento por transporte viscoso  $[\nabla \cdot \tau] = 0$ , es decir el tensor de esfuerzos es cero, la ecuación de cantidad de movimiento se reduce a la ecuación de Euler :

$$\rho \frac{D\vec{v}}{Dt} = -\nabla p + \vec{a}_g \rho. \quad 2.8$$

En general para obtener una solución aproximada de las ecuaciones de balance en un fluido no viscoso e incomprensible (8), solo se necesitan las ecuaciones de conservación de masa y conservación de cantidad de movimiento. Un fluido en estas condiciones es ideal, o sea que no se encuentra en la naturaleza.

## 2.2 Mezclas de fluidos.

En una mezcla de dos fluidos en el que uno de ellos es gas y el otro es liquido, se pueden tener dos posibilidades bien definidas:

### 2.2.1 Fluidos Heterogéneos.

Si los dos fluidos no se mezclan y tienen características físicas muy distintas

## 10 APLICACION DE LA DINAMICA DE FLUIDOS...

uno de otro, se tendrán diferentes fases y para su dinámica, se tendrán que usar las ecuaciones de balance con unos parámetros para líquidos y otros parámetros para gases. Las ecuaciones del modelo estarán acopladas entre sí, y en este caso se encuentran las siguientes aproximaciones para el acoplamiento (18):

Aproximación de Flujos Separados Determinísticamente (Deterministic Separated Flow, 'DSF'), donde los pequeños efectos de transporte entre las dos fases son considerados; en estos modelos generalmente se utilizan resultados de experimentos efectuados con la finalidad de determinar las relaciones de velocidad y fracción mezcla en el centro del flujo, pero divididas entre los valores originales de las mismas variables, esto permite normalizar los parámetros de velocidad y fracción mezcla con respecto al valor central, estos parámetros adimensionales se utilizan como coeficientes de las ecuaciones de balance que representan el sistema.

Aproximación de Flujos Separados Estocasticamente (Stochastic Separated Flow, 'SSF'), en donde la interacción de la fase dispersa con la turbulencia se supone mediante un número aleatorio que representa el producto de los vectores de velocidad " $\vec{U}$ " y " $\vec{V}$ ", promediados en el tiempo.

### 2.2.2 Fluidos Homogéneos.

Si la fase líquida es diluida en la gaseosa y se considera que hay suficiente velocidad de mezclado para considerar una sola fase (aunque sea en pequeñas regiones), se podrá en este caso aplicar un modelo de dinámica de fluidos único, en el que se considerará que la densidad y la velocidad solo dependen de la posición y el tiempo, pero son las mismas para todo el elemento de volumen; esta aproximación es conocida como Flujo Localmente Homogéneo (Locally Homogeneous Flow, 'LHF'). Se caracteriza porque las fases gaseosa y líquida se asumen dinámica y termodinámicamente en equilibrio; es decir, que en cada punto, el flujo de las 2 fases esta a la misma velocidad y temperatura, como si fuera una sola fase en equilibrio. En forma práctica, un fluido gaseoso con gotas de menos de 20 micras (69), se considera un 'LHF' en donde los cambios que se dan en la mezcla de fluidos son infinitamente rápidos, por lo cual se consideran instantáneos, la figura 2.1 muestra un diagrama de la aproximación 'LHF' que se propone utilizar en este trabajo, así mismo se señalan las posiciones en que se analizará la información del modelo propuesto y la sección de  $x/d \leq 20$ , en donde debido a las condiciones de altas presiones, fraccionamiento de la gota, etc. no se puede aplicar la aproximación 'LHF'

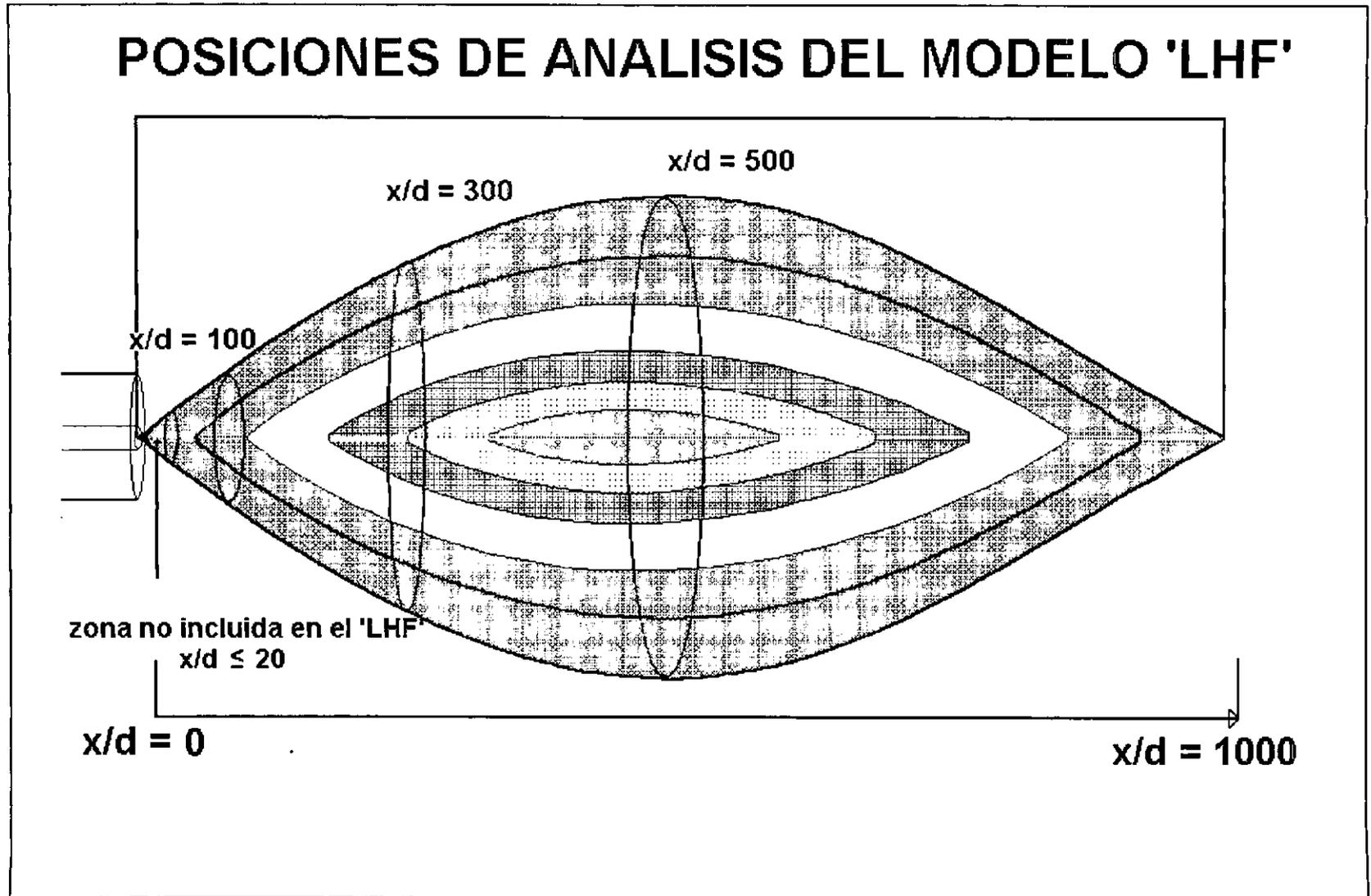


Figura 2.1 Representación esquemática del modelo de flujo localmente homogéneo 'LHF'.

## 12 APLICACION DE LA DINAMICA DE FLUIDOS...

### 2.2.2.1 Formulación matemática de los modelos 'LHF'.

En el desarrollo de un modelo teórico para describir Flujos Localmente Homogéneos 'LHF', se requiere de una ecuación de estado, ecuaciones de conservación, ecuaciones de transporte turbulento, condiciones límite, así como de constantes y correlaciones físicas. Básicamente se supone :

- 1).- Los coeficientes de transporte de calor y especies son constantes.
- 2).- El proceso de combustión es adiabático.
- 3.- Los términos para radiación, disipación viscosa y energía cinética se consideran despreciables.
- 4.- Las reacciones químicas y los cambios moleculares de concentración son lo suficientemente rápidos como para que se mantenga el equilibrio termodinámico.
- 5.- El flujo medio es estacionario y axisimétrico.

Mediante estas suposiciones, el estado local de la mezcla (líquido - gas) se puede especificar a partir de la presión, velocidad, la relación en peso del combustible entre el peso total de la mezcla (fracción mezcla) y temperatura, en caso de no contar con esta última, directamente se puede referir a la entalpía.

### 2.2.2.2 Aproximación LHF para una mezcla de fluidos.

Una mezcla de combustión (aire - combustible líquido), puede considerarse un fluido uniforme, a temperatura y presión constantes; para representar el movimiento de este fluido uniforme en un ducto cilíndrico axisimétrico se utilizan las ecuaciones A.24 y A.25 del APENDICE A y que aquí se expresan como ecuaciones 2.9 y 2.10:

$$\frac{\partial}{\partial x}(\bar{\rho}\bar{u}) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r\bar{\rho}\bar{v}^0) = 0, \quad 2.9$$

$$\frac{\partial}{\partial x}(\bar{\rho}\bar{u}^2) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r\bar{\rho}\bar{v}^0\bar{u}) = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{\mu_t r}{\sigma_{\bar{u}}} \frac{\partial \bar{u}}{\partial r} \right) \pm a_g(\rho_{\infty} - \bar{\rho}) \quad 2.10$$

Si el fluido es incompresible no es necesaria la ecuación de energía porque la densidad es conocida y con solo el cambio de presión con la velocidad se puede describir el flujo completamente (8).

Si el fluido además de incompresible, es isotérmico, el modelo de aproximación 'LHF', se puede plantear con la ecuación general A.24, de donde

(A.27). En la solución del modelo 'LHF' que representa este problema se definen primeramente los parámetros adimensionales ' $x/d$ ' que es el valor normalizado de la distancia ' $x$ ' en la dirección de flujo entre el diámetro del difusor ' $d$ ' y que tendrá un valor entre 20 y 1000 de acuerdo con la figura 2.1, ' $r/x$ ' que se define por la relación del radio ' $r$ ' del cono de combustible atomizado entre ' $x$ ', el cual tendrá un radio máximo de 0.2  $x/d$  y cualquier valor mayor a este se considera como infinito en las condiciones límite. A partir de las condiciones límite para un radio cero, las variables ( $\Phi$ ) de velocidad, fracción mezcla, etc. no tendrán variación, mientras que en un radio muy grande estas mismas variables no tendrán valor :

$$r=0, \quad \frac{\partial \Phi}{\partial r} = 0,$$

$$r=\infty, \quad \Phi=0.$$

En el trabajo de FAETH et al (18) presenta un problema en donde se utiliza aire caliente como fluido incompresible e isotérmico. La aproximación con que se modela el problema, se muestra en las figuras 2.2 - 2.4, en donde los símbolos indican los datos experimentales, las líneas la aproximación teórica y se tiene que la  $u_0$  es la velocidad inicial al salir del atomizador,  $u_c$  es la velocidad en el centro del ducto y ' $u$ ' es la velocidad determinada en cualquier posición del ducto.

En la figura 2.2 podemos observar que para este fluido la relación de velocidades ' $u_c/u_0$ ' solo se determinó entre 4 y 30 veces el diámetro del difusor, lo cual no indica que sea el único intervalo de trabajo, solo que de acuerdo con los valores que se presentan en la figura 2.1 los valores de ' $x/d$ ' mayores a 30 darán una relación de velocidades ' $u_c/u_0$ ' menor a 0.1. Para utilizar esta información se parte de que se conoce la velocidad ' $u_0$ ', por lo tanto al fijar el valor de ' $x/d$ ' se puede conocer el valor de ' $u_c$ ' que es un parámetro de entrada en la figura 2.3.

En la figura 2.3 se muestra la relación de la velocidad ' $u$ ' con respecto a la velocidad central ' $u_c$ ' para la coordenada adimensional ' $r/x$ ', la limitante es que el valor de la velocidad central ' $u_c$ ' depende del valor que se asigne a ' $x/d$ ', por lo cual los resultados llevan especificado este valor.

La figura 2.4 presenta el producto de la variación de las velocidades en dos direcciones, pero normalizadas con respecto a la velocidad central ' $u_c$ ', denominados esfuerzos de Reynolds y en este caso se presenta su variación con la coordenada adimensional ' $r/x$ ', en este caso igual que en el de la figura

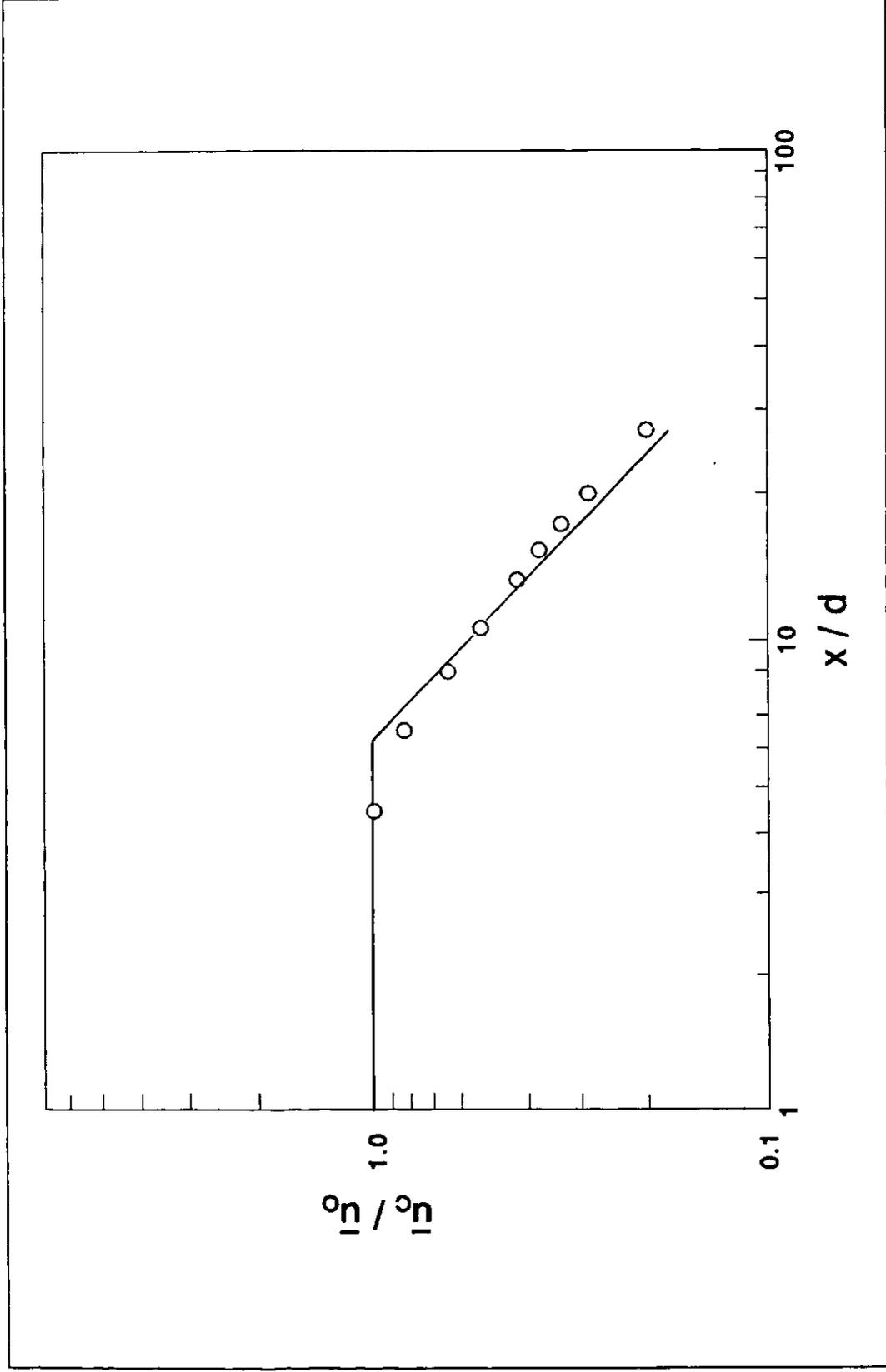


Figura 2.2. Variación de la velocidad central con respecto a la velocidad original en función de la relación axial 'x/d', para un fluido incompresible e isotérmico, Faeth (18).

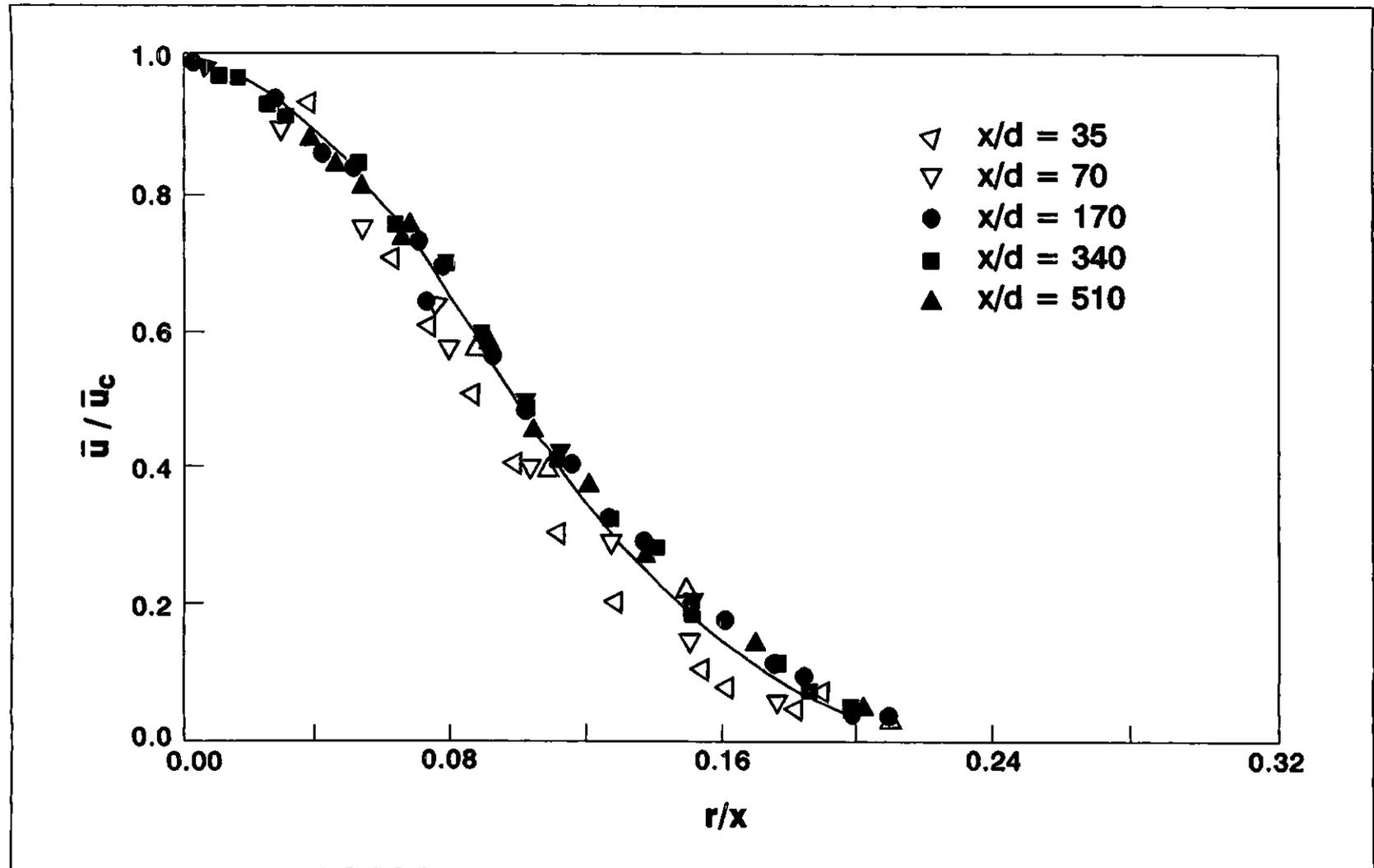


Figura 2.3. Variación de la velocidad con respecto a la velocidad central en función de la relación radial  $r/x$ , para un fluido incompresible e isotérmico, Faeth (18).

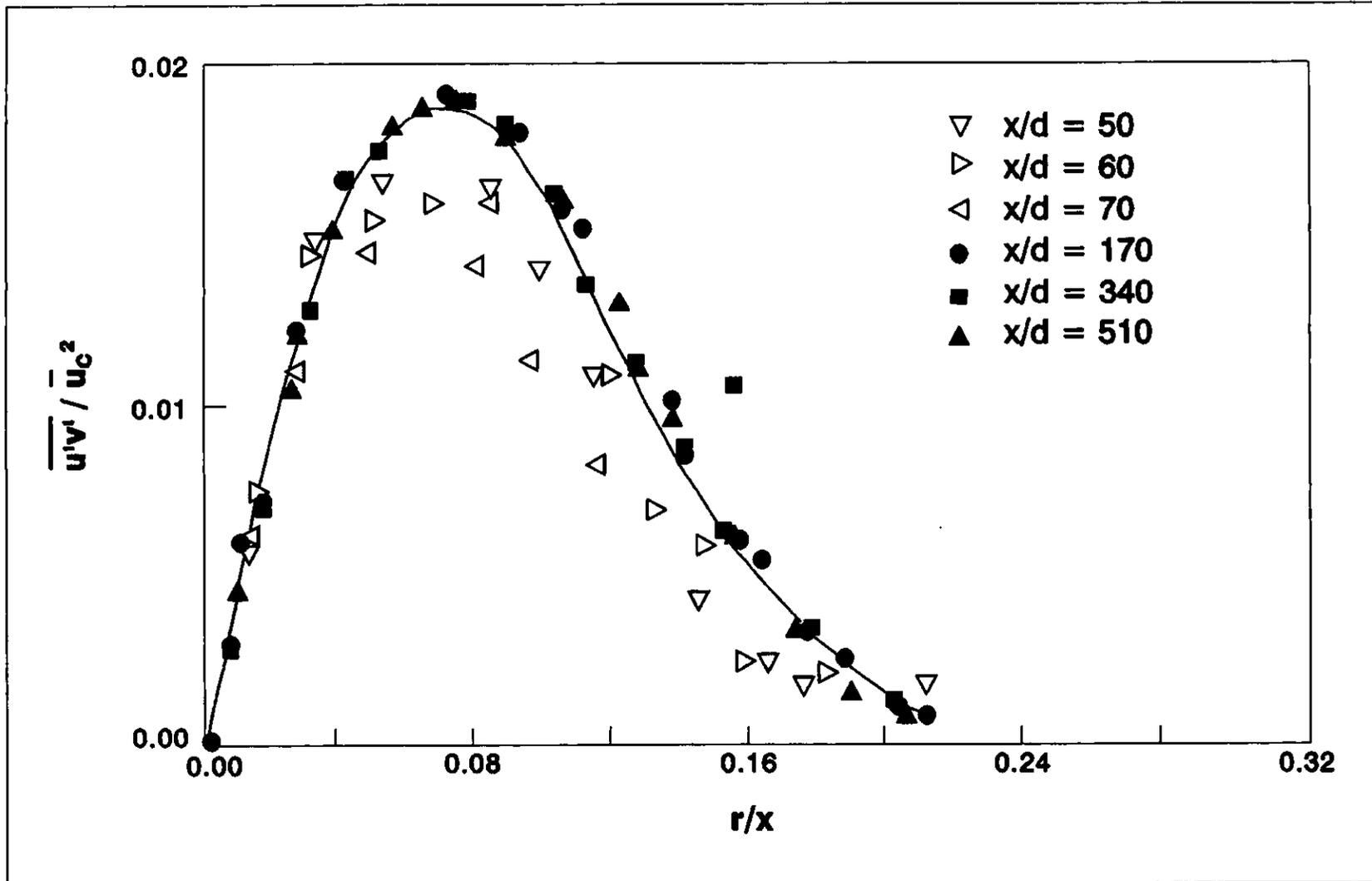


Figura 2.4. Variación de los esfuerzos de Reynolds  $\overline{u'v'}/\bar{u}_c^2$  con respecto a la relación radial ' $r/x$ ', para un fluido incompresible e isotérmico, Faeth (18).

2.3 los resultados se especifican en función del valor de 'x/d'.

En el problema que presenta Faeth (18) para la aproximación 'LHF', en donde utiliza aire caliente a una velocidad inicial promedio  $\bar{u}_0$ , se calcula la velocidad en el centro  $\bar{u}_c$  del flujo a partir de la figura 2.2 y con este valor en la figura 2.3 se obtiene la velocidad y los esfuerzos de Reynolds en la figura 2.4 ambas en función de la distancia radial 'r/x'. Esta información permite calcular la distribución, cantidad y velocidad de aire caliente para el sistema.

### 2.2.2.3 Aproximación LHF para dos fluidos acoplados.

El comportamiento de dos gases que se mezclan homogéneamente, a temperatura, presión y velocidad constantes, teniendo la máxima velocidad en el eje de simetría y decayendo la misma gradualmente en la dirección radial, puede aproximarse numéricamente mediante las siguientes suposiciones (39) :

- 1).- En el sistema de inyección de la mezcla aire/combustible, el diámetro total del difusor de aire incluye en forma concéntrica el difusor de combustible.
- 2).- No se consideran reacciones químicas.
- 3).- La densidad, viscosidad y otras propiedades de los gases son uniformes en toda la evolución del flujo.
- 4).- El flujo es estacionario.
- 5).- No se considera efecto de turbulencia.
- 6).- La presión del fluido se mantiene uniforme en todo el ducto.
- 7).- La difusión de masa, conducción de calor y efectos viscosos en la dirección axial son despreciables.
- 8).- No tienen valor los números turbulentos (Schmidt y Prandtl)  $Sc = Pr = 1$ .

En estas condiciones la ecuación 2.9 representa la conservación de masa, y la ecuación 2.10 de cantidad de movimiento se reduce a:

$$\frac{\partial}{\partial x}(\bar{\rho}\bar{u}^2) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r\bar{\rho}\bar{v}^0\bar{u}) = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r\mu_t \frac{\partial u}{\partial r}) \quad 2.11$$

Si se toma la aproximación de SHVAB-ZELD'OVICH descrita en el APENDICE A, la ecuación de conservación de especies en función de la fracción mezcla queda como :

$$\frac{\partial}{\partial x}(\bar{\rho}\bar{u}\bar{f}) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r\bar{\rho}\bar{v}^0\bar{f}) = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r \frac{\mu_t}{\sigma_f} \frac{\partial \bar{f}}{\partial r}) \quad 2.12$$

## 18 APLICACION DE LA DINAMICA DE FLUIDOS...

Considerando las simplificaciones propuestas para un flujo localmente homogéneo, las ecuaciones de masa (2.10), movimiento (2.11) y especies (2.12) se reducen a :

$$\frac{\partial \bar{u}}{\partial x} + \frac{\partial \bar{v}^0}{\partial r} + \frac{\bar{v}^0}{r} = 0 \quad 2.13$$

$$\bar{u} \frac{\partial u}{\partial x} + \bar{v}^0 \frac{\partial u}{\partial r} = \frac{v}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial u}{\partial r} \right) \quad 2.14$$

$$\bar{u} \frac{\partial f}{\partial x} + \bar{v}^0 \frac{\partial f}{\partial r} = \frac{v}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial f}{\partial r} \right) \quad 2.15$$

En el caso de un problema particular de dos fluidos acoplados en un inyector, sin reacciones químicas, con un flujo permanente, propiedades del flujo uniformes (densidad, viscosidad, etc.), sin turbulencia, se definen para este dispositivo los invariantes de 'momentum' y especies (58, 59) en función del radio y la velocidad inicial como sigue :

$$\frac{1}{v} \int_0^{\infty} \bar{u}^2 r dr = \frac{1}{v} \left( \frac{1}{2} \bar{u}_0^2 r_0^2 \right), \quad 2.16$$

$$\frac{1}{v} \int_0^{\infty} \bar{u} \bar{f} r dr = \frac{1}{v} \left( \frac{1}{2} \bar{u}_0 r_0^2 \right). \quad 2.17$$

Tomando la misma geometría que en la aproximación 'LHF' para una mezcla de fluidos (sección 2.2.2.2), se obtienen los invariantes para calcular las velocidades (dirección 'x' y 'y') y la fracción mezcla contra los parámetros adimensionales 'x/d' y 'r/x', con lo cual se podrán comparar los resultados en diferentes planos.

Para determinar las condiciones de frontera se debe de indicar que  $r_0$  es el radio del difusor y  $f$  es la fracción mezcla de combustible líquido, por lo tanto en el plano de entrada o sea donde se inyecta el combustible la distancia es cero, la velocidad del fluido 'u' es la velocidad inicial del fluido ' $u_0$ ' y 'f' es la unidad.

$$x = 0 \text{ y } r \leq r_0; u = u_0; f = 1;$$

En el plano de entrada para un punto fuera del difusor se tiene :  $x = 0$  y  $r > r_0$ ;  $u = 0$  ;  $f = 0$ ;

En un plano cualquiera para un punto con un radio muy grande (mayor a  $0.2x/d$ ) se tiene:

$$r \rightarrow \infty ; u = 0 ; f = 0.$$

La solución al modelo propuesto para dos fluidos acoplados que se representa con las ecuaciones diferenciales parciales 2.13, 2.14 y 2.15, de acuerdo con SPALDING (58, 59), se satisfacen a través de los invariantes con las condiciones de frontera, las velocidades, las relaciones de estas velocidades y la fracción mezcla, que se muestran en las ecuaciones 2.18 - 2.22.

$$\bar{u} = \frac{3}{8xv} (\bar{u}_0^2 r_0^2) \left(1 + \frac{\xi^2}{4}\right)^{-2} \quad 2.18$$

$$\frac{u}{u_0} = \frac{3}{32} \left[ \frac{Re_{d_0} d_0}{x} \right] \left(1 + \frac{\xi^2}{4}\right)^{-2} \quad 2.19$$

$$v = \left( \frac{3}{16} \bar{u}_0^2 r_0^2 \right)^{\frac{1}{2}} \frac{\xi}{x} \left(1 - \frac{\xi^2}{4}\right) \left(1 + \frac{\xi^2}{4}\right)^{-2} \quad 2.20$$

$$\frac{v}{u_0} = \frac{\sqrt{3}}{8} \frac{d_0}{x} \left( \xi - \frac{\xi^3}{4} \right) \left(1 + \frac{\xi^2}{4}\right)^{-2} \quad 2.21$$

$$\bar{f} = \frac{3\bar{u}_0 r_0^2}{8xv} \left(1 + \frac{\xi^2}{4}\right)^{-2} \quad 2.22$$

En donde de acuerdo a lo que propone Spalding (58, 59) :

$$\xi = \frac{\sqrt{3}}{8} \left( \frac{r}{d_0} \right) \left[ \frac{Re_{d_0} d_0}{x} \right] \quad 2.23$$

## 20 APLICACION DE LA DINAMICA DE FLUIDOS...

Los valores centrales de velocidad y concentración dependen de la relación 'r/x' y se representan con las ecuaciones 2.22 y 2.23:

$$\bar{u}_c X = \frac{3}{8\nu} (\bar{u}_0^2 r_0^2) \quad 2.24$$

$$\bar{f}_c X = \frac{3}{8\nu} (\bar{u}_0 r_0^2) \quad 2.25$$

En tanto que los valores normalizados de la velocidad axial y la fracción mezcla con respecto a su valor central son :

$$\frac{\bar{u}}{\bar{u}_c} = \frac{1}{\left(1 + \frac{\xi^2}{4}\right)^2} \quad 2.26$$

$$\frac{\bar{f}}{\bar{f}_c} = \frac{1}{\left(1 + \frac{\xi^2}{4}\right)^2} \quad 2.27$$

Un problema de dos fluidos acoplados que no reaccionan químicamente entre si, pero que tienen propiedades uniformes, a una temperatura y flujo constante, es propuesta y resuelta en FAETH et al (18), los resultados experimentales se expresan con símbolos y las líneas representan la aproximación teórica y se pueden observar en las figuras 2.5 a 2.8.

En la figura 2.5 podemos observar que para estos fluidos acoplados, experimentalmente se obtuvieron datos de la relación de velocidades 'u<sub>c</sub>/u<sub>0</sub>', entre 50 y 500 'x/d', de igual forma, que para el modelo de un fluido isotérmico e incompresible al determinar el valor de la velocidad 'u<sub>0</sub>', se puede calcular la velocidad 'u<sub>c</sub>' en función de la coordenada axial 'x/d'.

En la figura 2.6 se muestra la relación de la velocidad 'u' con respecto a la velocidad en el centro del ducto 'u<sub>c</sub>' fija para la coordenada adimensional 'x/d', en el centro del ducto tendrá velocidad máxima, el cual disminuirá como se muestra en la figura al aumentar el valor de 'r/x'.

La figura 2.7 presenta los esfuerzos de Reynolds en función de la coordenada adimensional 'r/x', en este caso igual que en las figuras 2.3 y 2.6,

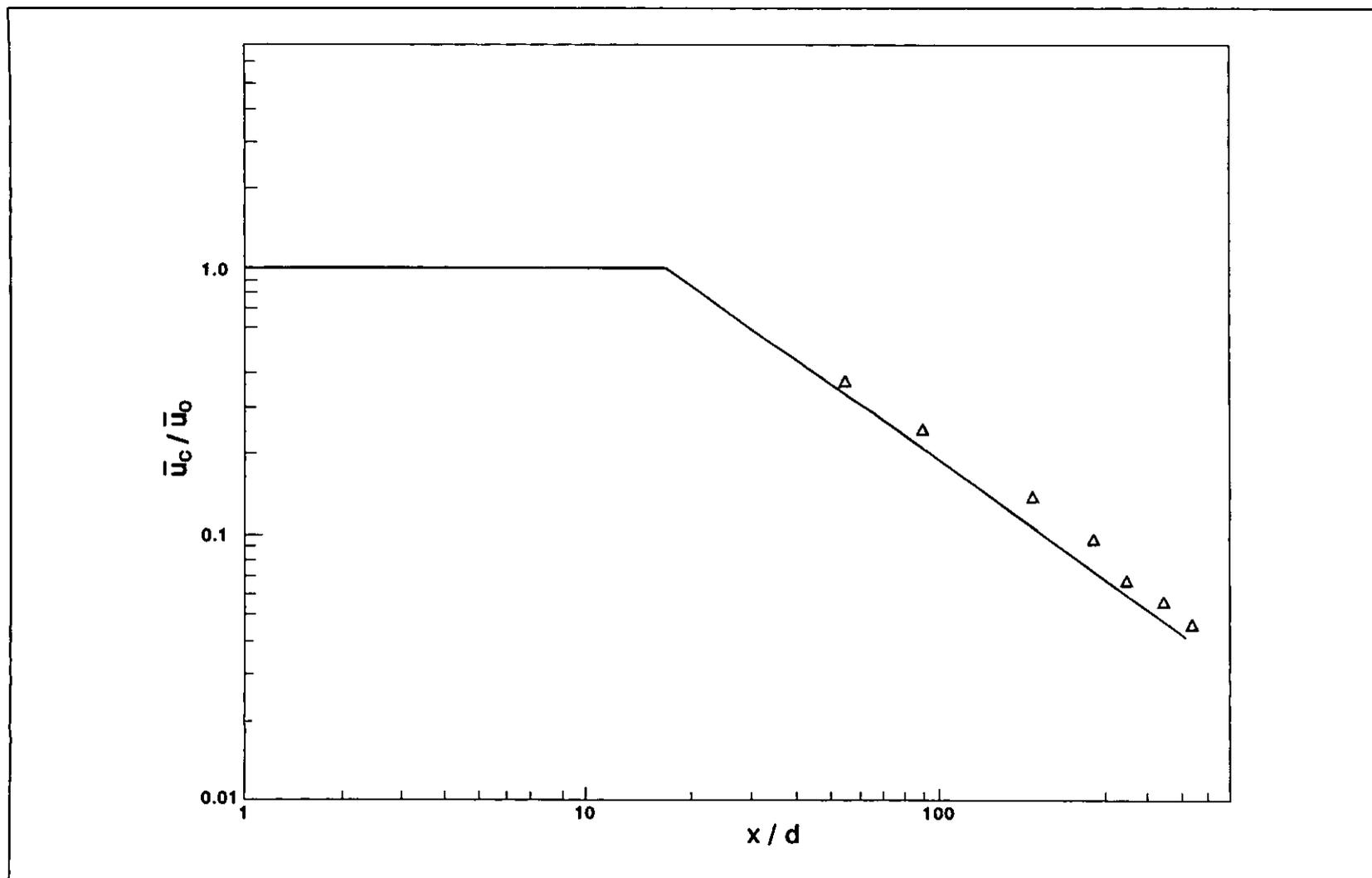


Figura 2.5. Variación de la velocidad central con respecto a la velocidad original, para dos fluidos acoplados y la relación axial 'x/d' Kuan-Yun (39).

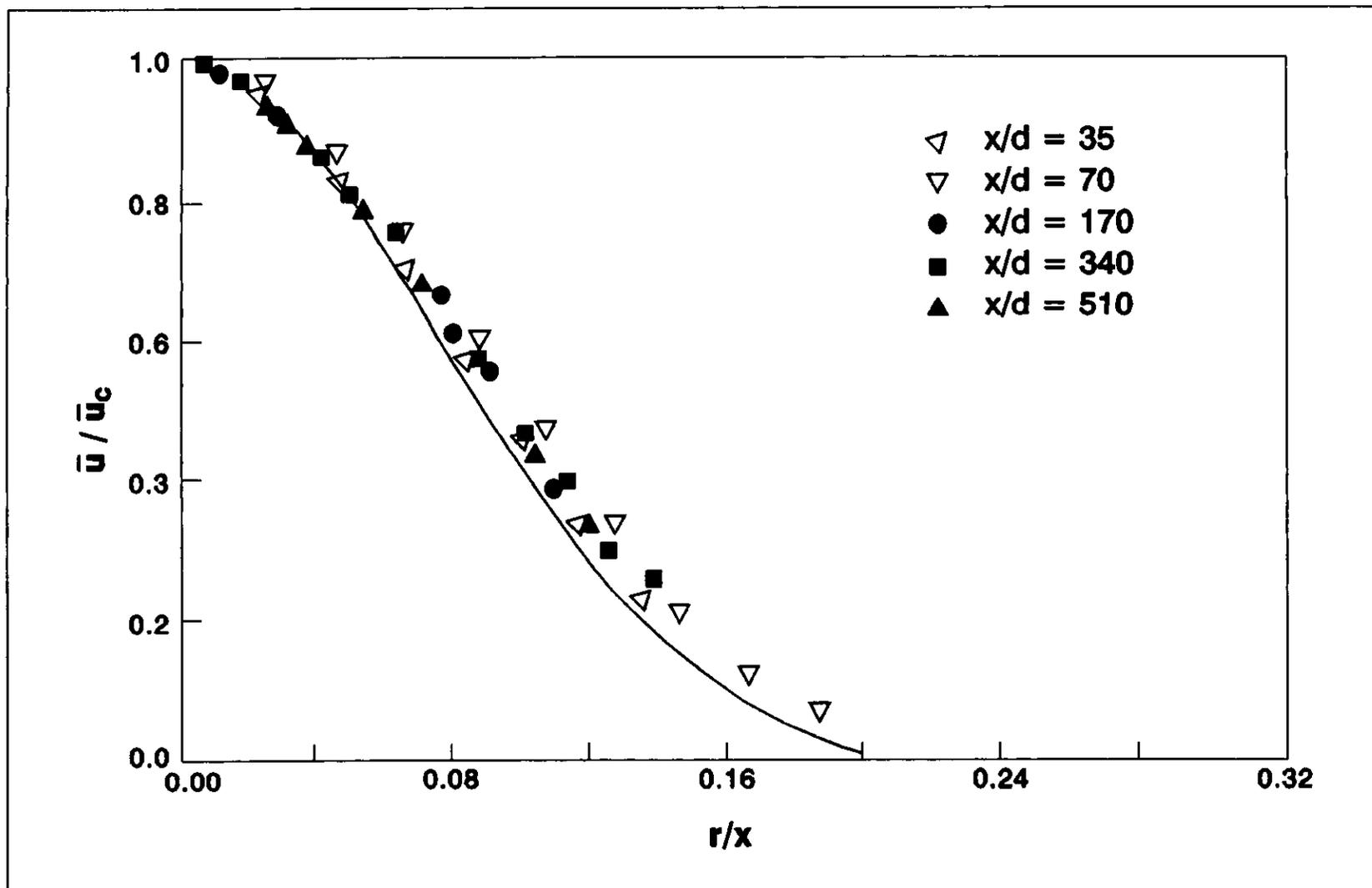


Figura 2.6. Variación de la velocidad con respecto a la velocidad central en función de la relación radial ' $r/x$ ', para dos fluidos acoplados Kuan-Yun (39).

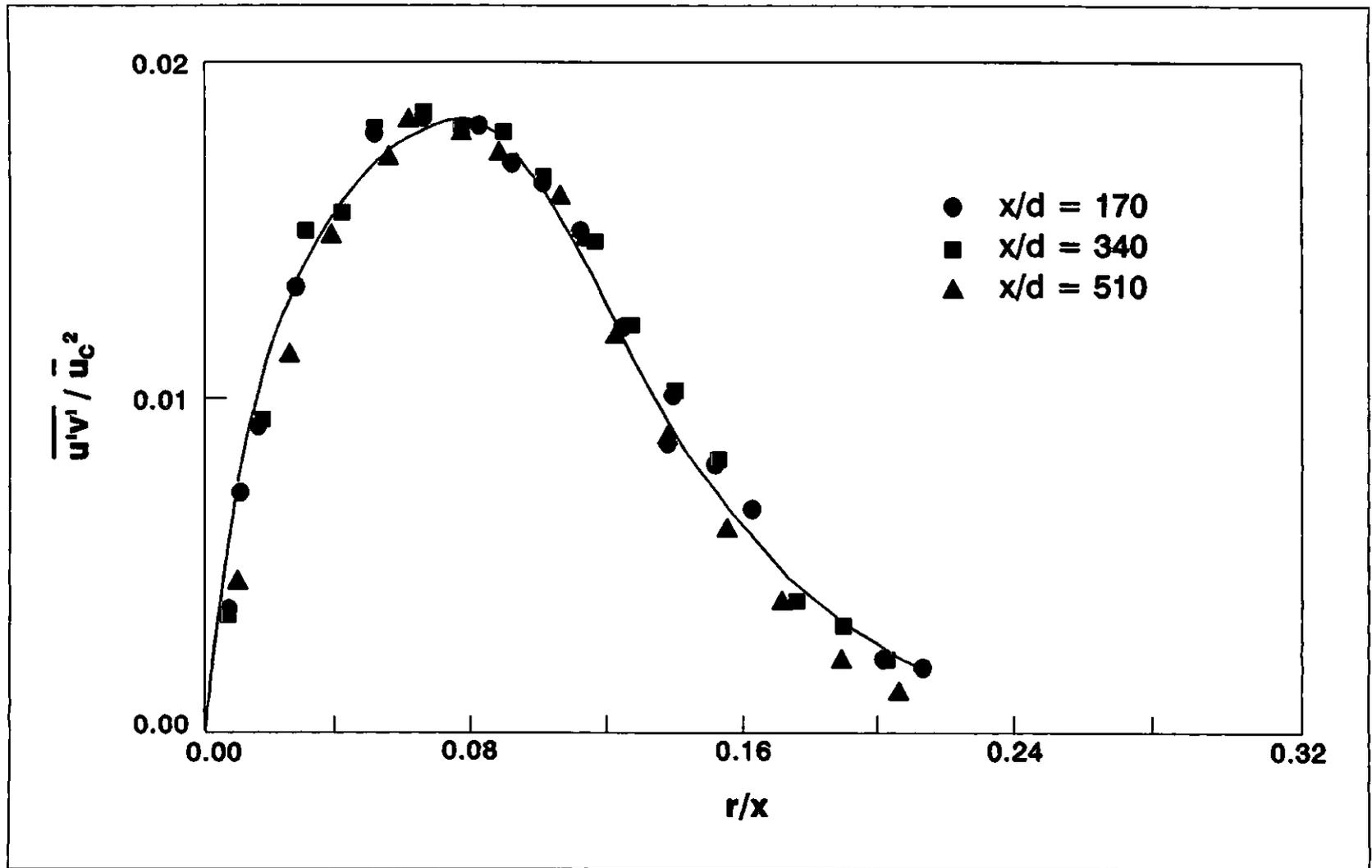


Figura 2.7. Variación de los esfuerzos de Reynolds  $u'v'/u_c^2$  con respecto a la velocidad central al cuadrado y la coordenada radial ' $r/x$ ', para dos fluidos acoplados Kuan-Yun (39).

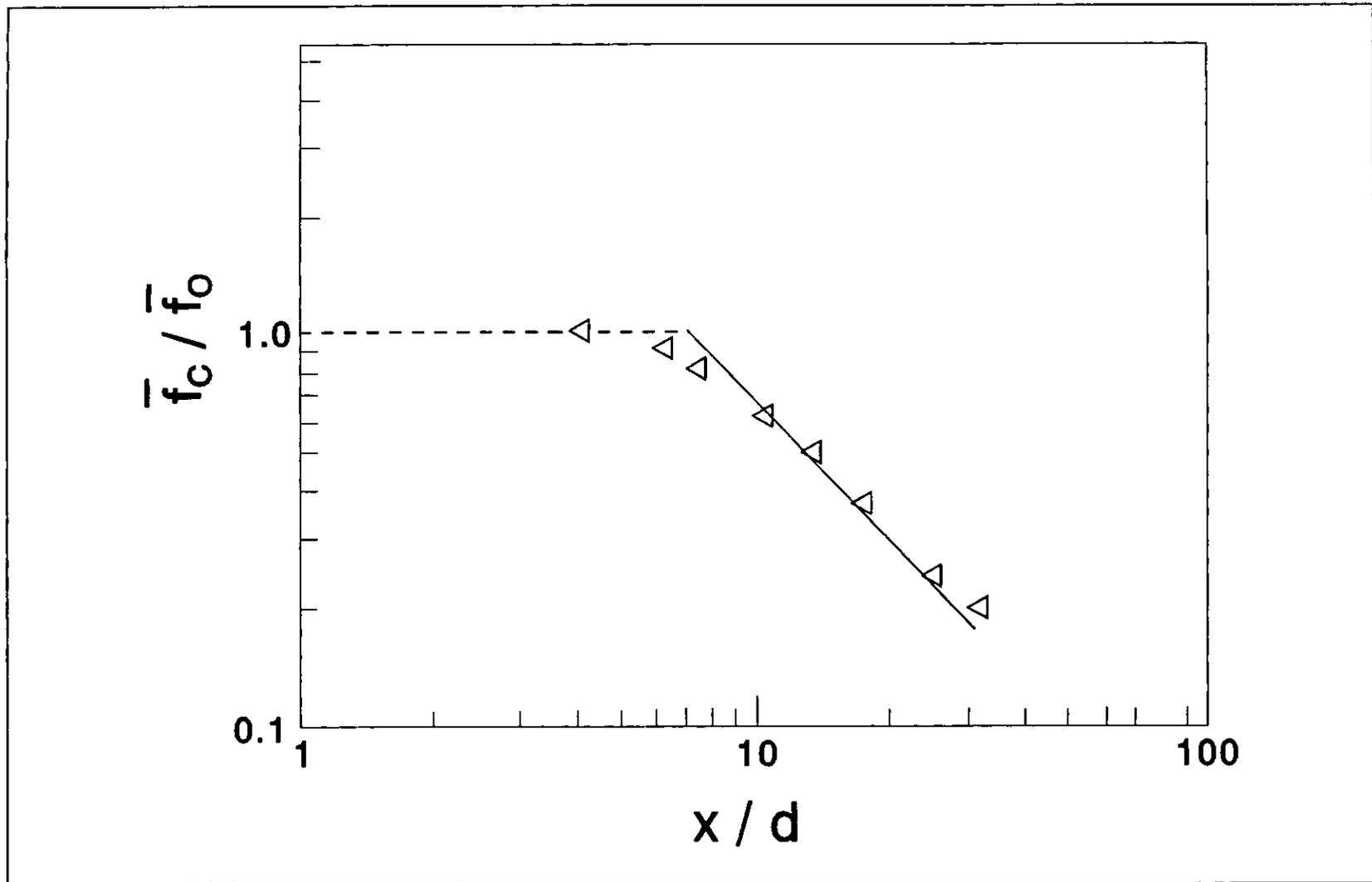


Figura 2.8. Variación de la fracción mezcla central con respecto a la fracción mezcla original en función la relación axial ' $x/d$ ', para dos fluidos acoplados Kuan-Yun (39).

los resultados se especifican en función de la distancia ' $x/d$ '.

La figura 2.8 muestra la variación de la fracción mezcla central ' $f_c$ ' entre la fracción mezcla original ' $f_o$ ' con que se inyectan los dos fluidos acoplados, a lo largo de la coordenada adimensional ' $x/d$ '.

Para dos fluidos acoplados de los cuales se conoce la velocidad inicial promedio  $\bar{u}_o$  con que se inyectan, se calcula la velocidad central  $\bar{u}_c$  del flujo a partir de la figura 2.5. Con la velocidad central y la figura 2.6 se pueden obtener la velocidad y los esfuerzos de Reynolds (figura 2.7), en cualquier punto del sistema. La fracción mezcla se obtiene de la figura 2.8. A partir de los valores iniciales de velocidad con que se inyectan los fluidos acoplados se pueden calcular la distribución, cantidad y velocidad de los fluidos para cada punto del sistema.

#### 2.2.2.4 Flamas de gases con aproximación LHF.

En muchos procesos industriales se tienen flamas que resultan de la inyección de gases combustibles dentro de una atmósfera oxidante. Con el fin de proponer un modelo simplificado de una mezcla de fluidos que incluya combustión (39), se hacen las siguientes consideraciones :

1).- Los coeficientes de transporte de calor y especies químicas son constantes.

2).- El proceso de combustión es adiabático.

3.- Los términos para radiación, disipación viscosa y energía cinética se consideran despreciables.

4.- Las reacciones químicas y los cambios moleculares de concentración son lo suficientemente rápidos como para que se mantenga el equilibrio termodinámico.

5.- El flujo medio es estacionario.

6.- Velocidades de flujo menores a 50 m/s.

7.- Las Reacciones químicas son instantáneas.

8.- La Presión es constante.

9.- No se consideran los efectos de recirculación del flujo.

10.- Ducto axisimétrico.

El modelo matemático que se propone para representar una flama de gas, es una aproximación 'LHF', para lo cual se utilizan :

1.- Ec. 2.9 para conservación de masa.

2.- Ec. 2.11 para conservación de cantidad de movimiento.

3.- Ec. 2.12 para conservación de fracción mezcla combustible - oxidante.

4.- Ec. 2.28 para conservación de energía.

$$\frac{\partial}{\partial x}(\bar{\rho}\bar{u}\bar{H}) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r\bar{\rho}\bar{v}^0\bar{H}) = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r\mu_r \frac{\partial \bar{H}}{\partial r}) \quad 2.28$$

Si consideramos, que cuando el radio de flujo de la mezcla combustible - aire 'r' tiende a ser muy grande, la fracción mezcla de combustible y la velocidad de flujo tienden a cero, mientras que la entalpía es igual a la del medio ambiente, entonces tenemos las siguientes condiciones de frontera :

$$r \rightarrow \infty ; u = 0 ;$$

$$r \rightarrow \infty ; f = 0 ;$$

$$r \rightarrow \infty ; h = h_{\infty} .$$

La aproximación para representar una mezcla de combustible-aire reaccionando mediante las ecuaciones 2.9, 2.11, 2.12 y 2.28, tiene una solución de acuerdo con los invariantes propuestos por SPALDING (58, 59) en las ecuaciones 2.16 y 2.17. El cálculo de las velocidades, las relaciones de las velocidades y la fracción mezcla se pueden obtener con las ecuaciones 2.18 - 2.22; el valor de la entalpía total se obtiene con la ecuación 2.29.

$$\bar{H} = \frac{3\bar{u}_0(H_0 - H_{\infty})r_0^2}{8xv(1 + \frac{\xi^2}{4})^2} + \bar{H}_{\infty} \quad 2.29$$

La solución de las ecuaciones 2.9, 2.11, 2.12 y 2.28 que representan un flujo LHF de Propano - Aire con combustión, el cual cumple con las condiciones límite anteriormente enumeradas, es presentada por FAETH et al (18). Los resultados experimentales se expresan con símbolos y las líneas representan la aproximación teórica.

En la figura 2.9 podemos observar que para estos fluidos acoplados la relación de velocidades 'u<sub>c</sub>/u<sub>o</sub>', experimentalmente se obtuvieron datos entre 40 y 500 'x/d', de igual forma que para los dos modelos anteriores, el valor de la velocidad 'u<sub>o</sub>', se puede calcular a partir de la velocidad 'u<sub>c</sub>' en función de la coordenada axial 'x/d'.

En la figura 2.10 se muestran las relaciones de velocidad 'u' con respecto a la velocidad en el centro del ducto 'u<sub>c</sub>' fija para cuatro diferentes valores de 'x/d'. Se pueden observar en las figuras que los resultados para los diferentes valores de 'x/d' no son muy diferentes y que para los cálculos teóricos se podría proponer una sola ecuación para calcular la relación 'u/u<sub>c</sub>' sin introducir con ello un error mayor a un cinco por ciento.

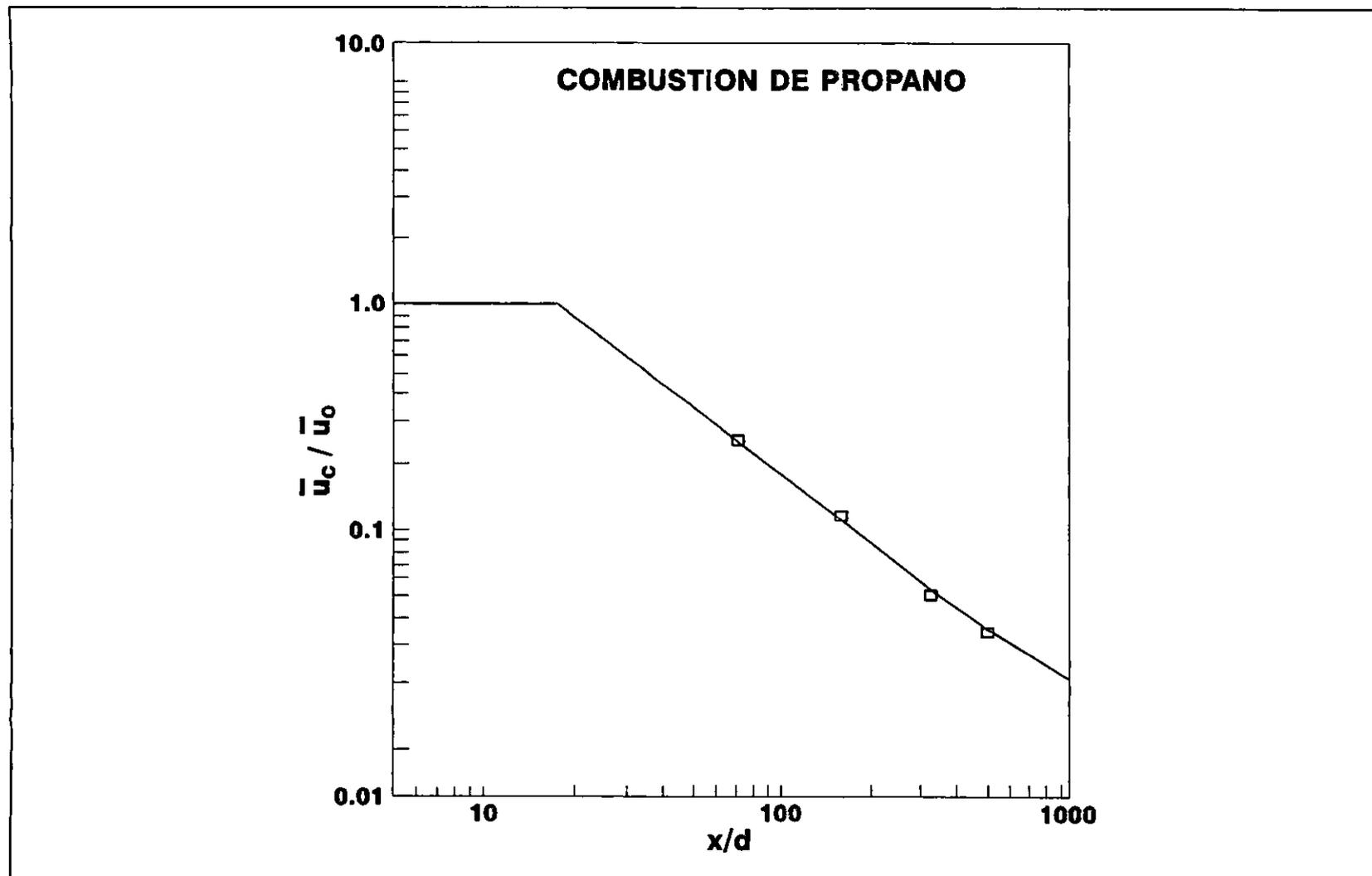


Figura 2.9. Variación de la velocidad central con respecto a la velocidad original en función la relación axial ' $x/d$ ', para una mezcla Propano con aire quemándose Faeth (18).

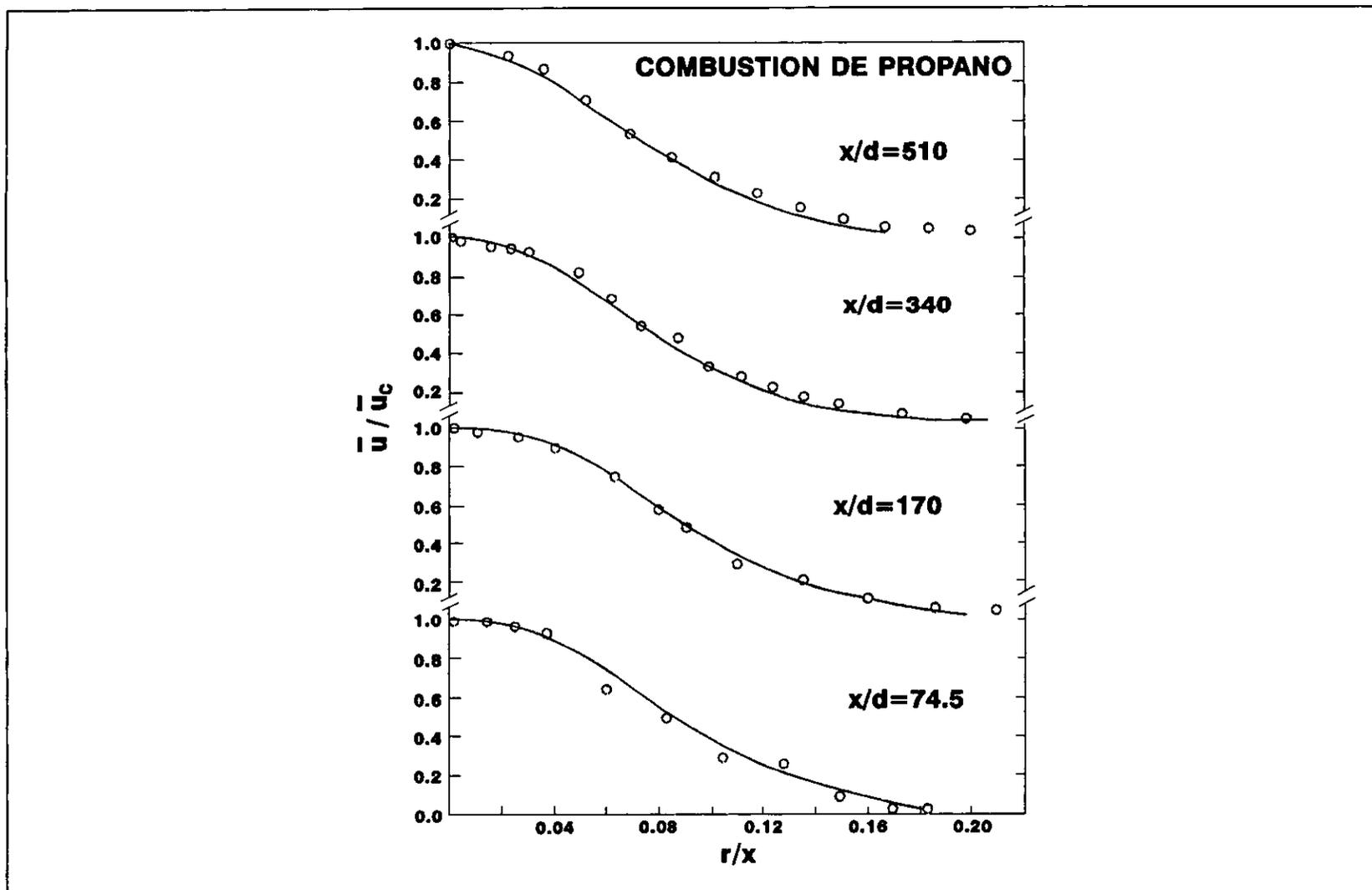


Figura 2.10. Variación de la velocidad con respecto a la velocidad central en función de la relación radial ' $r/x$ ', para una mezcla Propano con aire quemándose, para cuatro distintas distancias ' $x/d$ ', Faeth (18).

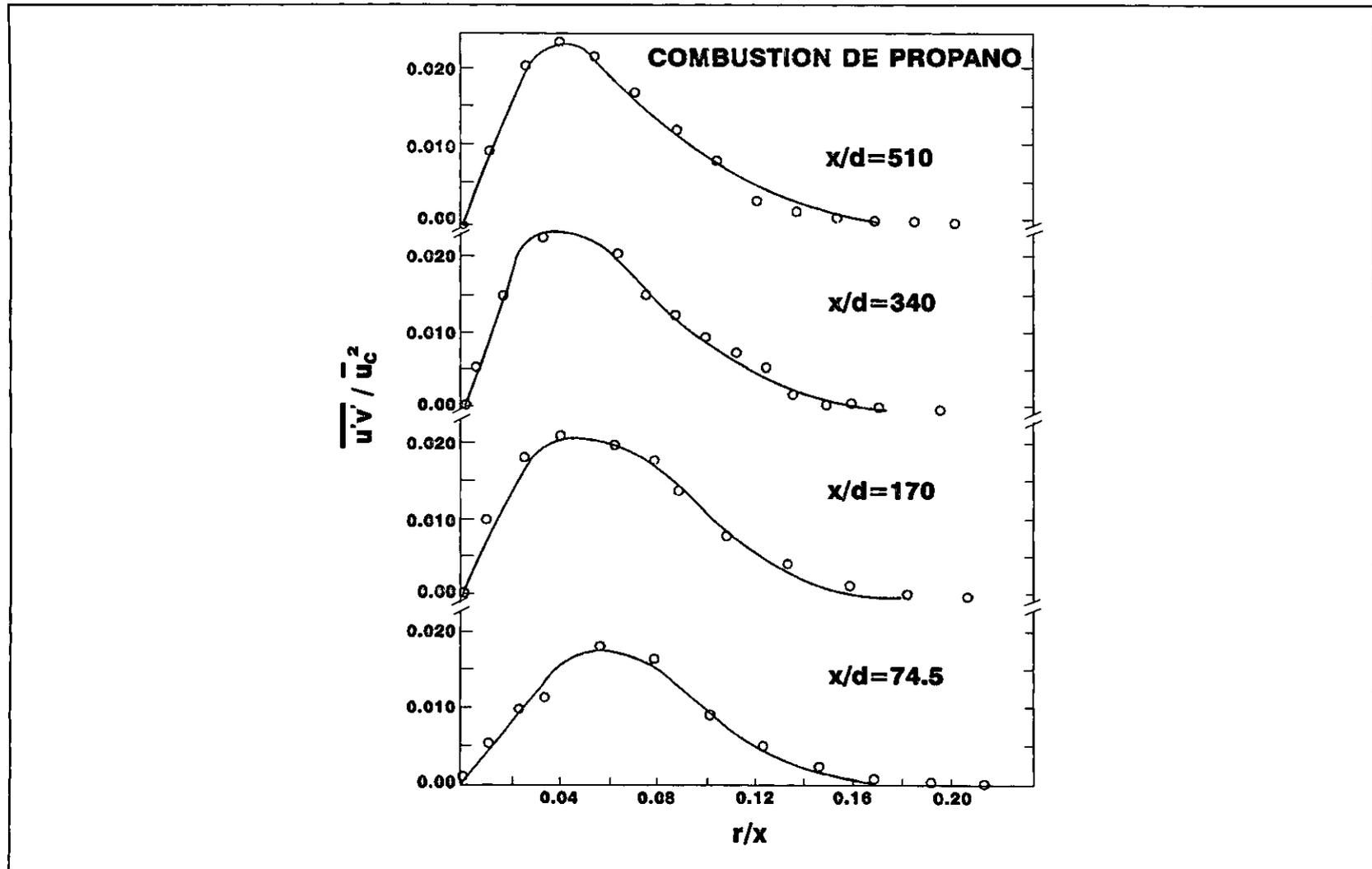


Figura 2.11. Variación de los esfuerzos de Reynolds  $\overline{u'v'}/\bar{u}_c^2$  con respecto a la velocidad central al cuadrado y a la relación radial  $r/x$ , para una mezcla Propano-aire quemándose Faeth (18).

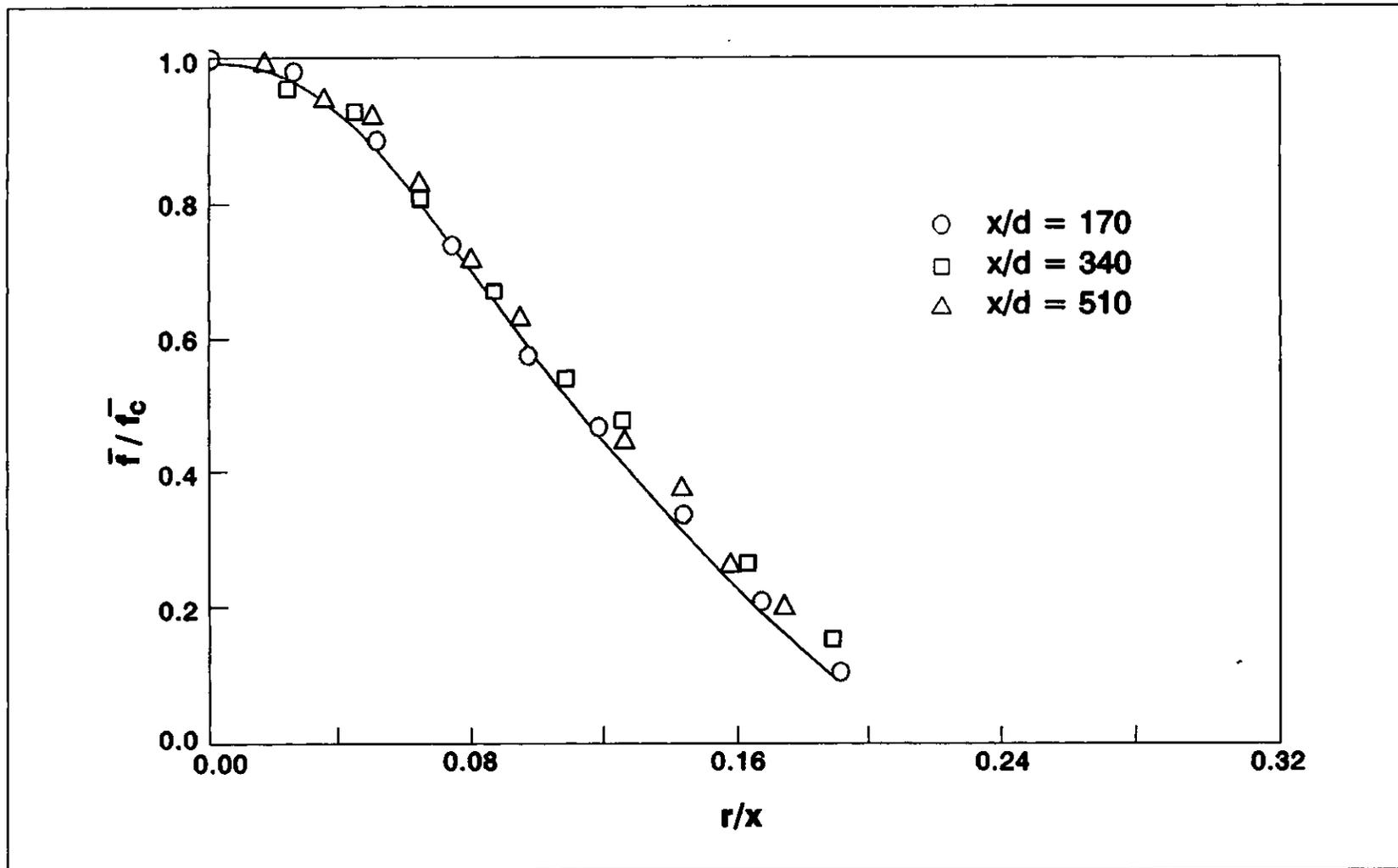


Figura 2.12. Variación de la fracción mezcla con respecto a la fracción mezcla central en función la relación radial ' $r/x$ ', para una mezcla Propano - aire quemándose a tres diferentes distancias ' $x/d$ ' Faeth (18).

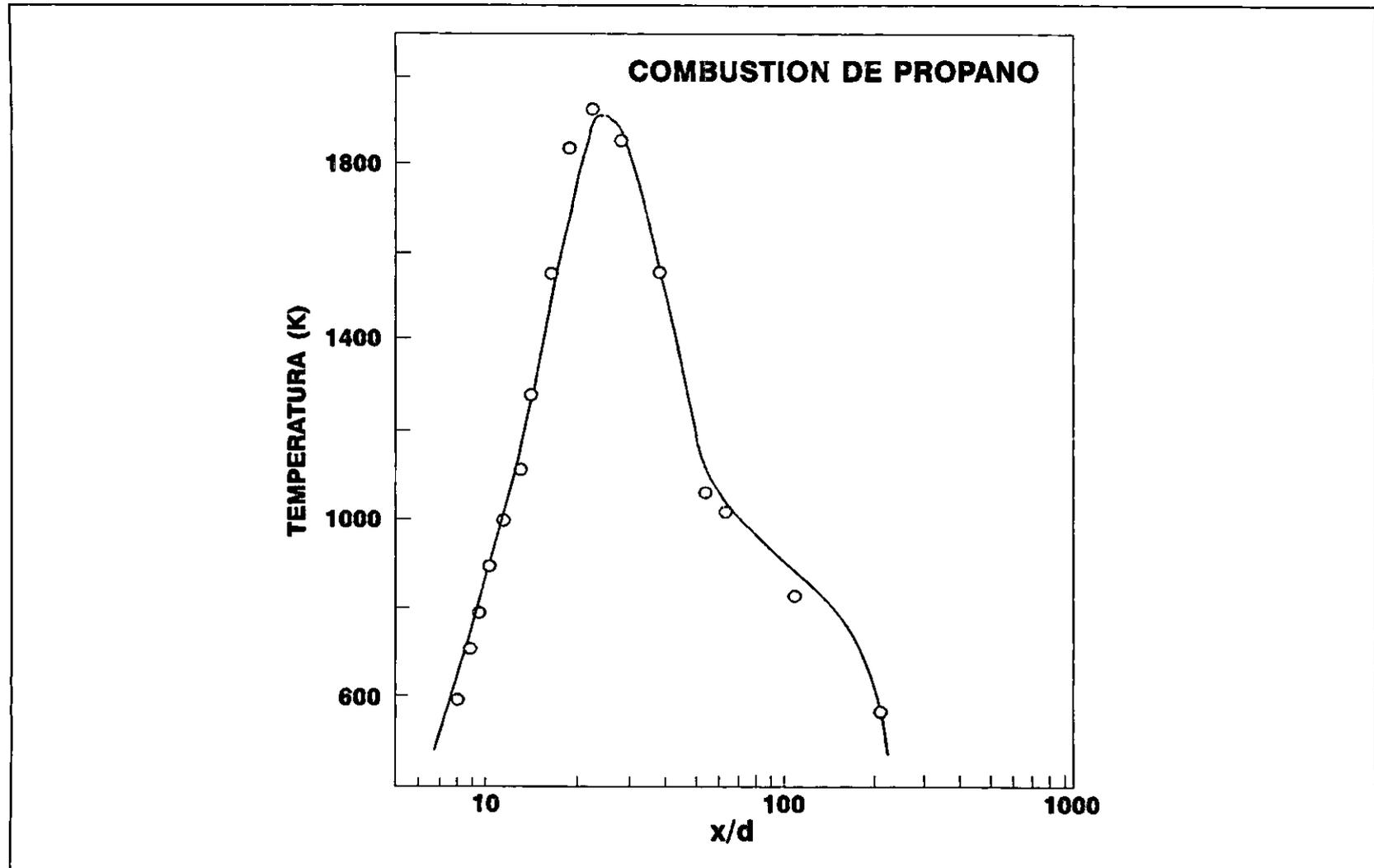


Figura 2.13. Variación de la Temperatura en función de la relación axial 'x/d' para una mezcla de Propano - aire quemándose Faeth (18).

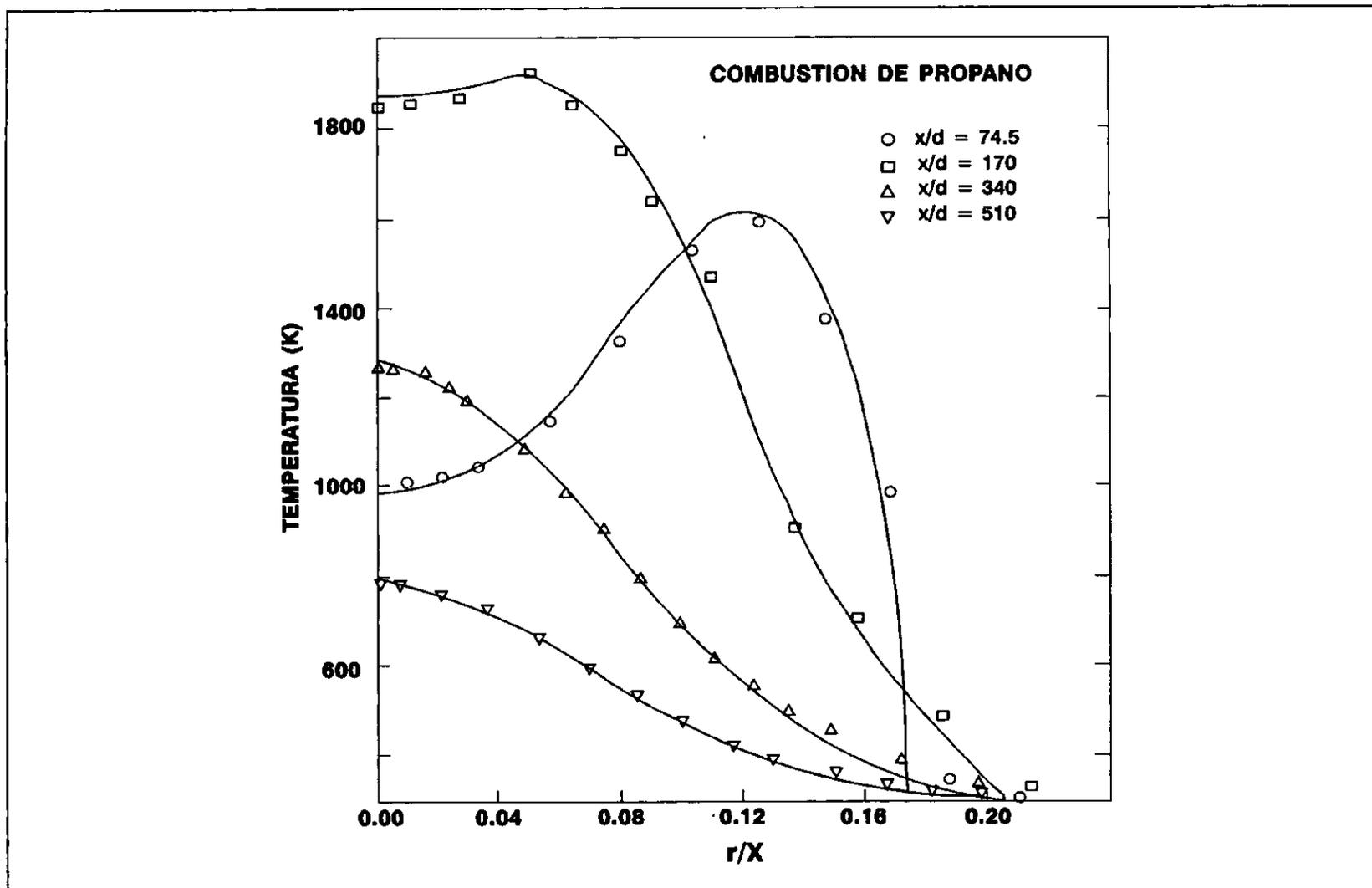


Figura 2.14. Variación de la Temperatura en función de la relación radial ' $r/x$ ' para una mezcla de Propano - aire quemándose Faeth (18).

La figura 2.11 presenta la variación de los esfuerzos de Reynolds con respecto a cuatro diferentes valores de 'x/d'. En estas figuras se observa que al disminuir el valor de 'x/d' el valor máximo del esfuerzo de Reynolds es menor y hay un desplazamiento, es decir se dan a mayor valor de 'r/x'.

La figura 2.12 muestra la variación de la fracción mezcla 'f' entre la fracción mezcla central 'f<sub>c</sub>' con que se inyectan la mezcla combustible, a lo largo de la coordenada adimensional 'r/x'.

Las figuras 2.13 y 2.14 presentan la variación de temperatura a lo largo del centro del ducto en función de la coordenada adimensional 'x/d' y en función de la coordenada adimensional 'r/x' para cuatro valores específicos de 'x/d'. El cálculo de la temperatura se hace determinando la distribución de la mezcla combustible - aire en el sistema con las ecuaciones 2.22 y 2.27. Si se toma en cuenta la reacción química y el proceso es adiabático, mediante la ecuación 2.28 se calcula la entalpía y a partir de relaciones termodinámicas se obtiene la temperatura.

Para dos fluidos que forman un flujo reactivo (Propano - Aire), del cual se conoce la velocidad inicial promedio  $\bar{u}_0$  con que es

inyectado, se puede calcular la velocidad central  $\bar{u}_c$  del flujo a partir de la figura 2.9, con la velocidad central y la figura 2.10, se calculan la velocidad con respecto a la distancia radial y los esfuerzos de Reynolds en cualquier punto del sistema que se muestran en la figura 2.11. La fracción mezcla se obtiene de la figura 2.12, la variación de temperatura a lo largo de la dirección axial es expresada en la figura 2.13 y a diferentes distancias del difusor se expresan en la figura 2.14. A partir de los valores iniciales y la gráficas que muestran las variables del sistema, se realizan los cálculos de velocidad con que se inyectan los fluidos acoplados, y así se pueden calcular la distribución, cantidad y velocidad de los fluidos para cada punto del sistema.

### 2.3 Características del modelo 'LHF' aplicado.

Para el desarrollo de este trabajo, se decidió tomar una mezcla de combustible - aire con una evolución espacio temporal, como si fuera un 'LHF'; para implementar el mismo se hicieron las siguientes consideraciones :

Combustible : n-Heptano,

Gasto comb. : 1 - 50 g/s,

Gasto aire : estequiometrico al gasto de combustible.

El combustible se inyecta a presión en el flujo de aire y se considera que la mezcla de fluidos producida (aire - n-Heptano líquido) tiene las siguientes características :

### 34 APLICACION DE LA DINAMICA DE FLUIDOS...

El combustible se dispersa en número de gotas múltiplo de diez (10, 100, 1000, etc.), con distribuciones normales de tamaños y velocidades de gotas.

Para calcular las variables dinámicas del sistema estudiado, se recurrió al teorema de similaridad o teorema Pi de Buckingham (33), en donde se indica que dos flujos son similares, sí los parámetros y variables adimensionales que caracterizan a los dos sistemas son los mismos para ambos flujos. También se señala la cantidad de flujo puede no ser idéntico pero si proporcional y siempre que se mantenga la misma forma geométrica del ducto(33).

La dinámica de fluidos que se necesita para resolver el problema de un flujo gaseoso de n-heptano - aire, el cual se considera que va reaccionando químicamente, se caracterizará con ecuaciones adimensionales y se obtendrá el modelo del sistema, con la posibilidad de modificar interactivamente los argumentos adimensionales.

Proponiendo unas condiciones iniciales de flujo y temperatura, mediante un grupo patrón de gotas obtenemos la distancia máxima que alcanzan las gotas (tamaño del SPRAY), a partir de lo cual se pueden calcular los parámetros adimensionales 'x/d' y 'r/x' que por similaridad serán semejantes a los problemas ya descritos de un fluido isotérmico e incompresible (sección 2.2.2.2), dos fluidos acoplados (sección 2.2.2.3) y una flama de gas Propano (sección 2.2.2.4), cuya solución presenta FAETH et al (18) y que se reproducen en las figuras 2.2 - 2.14.

Numéricamente los parámetros se expresan de acuerdo con los invariantes propuestos por Spalding (58, 59) (ecs. 2.16 y 2.17) y las condiciones frontera que indican que cuando el radio de flujo de la mezcla combustible - aire 'r' tiende a ser muy grande, la fracción mezcla de combustible y la velocidad de flujo tienden a cero, mientras que la entalpía es igual a la del medio ambiente.

$$r \rightarrow \infty ; u = 0 ;$$

$$r \rightarrow \infty ; f = 0 ;$$

$$r \rightarrow \infty ; h = h_{\infty} .$$

La variación de la velocidad central contra el valor de velocidad inicial, el cual es un dato experimental con que no se cuenta, pero que se propone su substitución calculándolo con una ecuación obtenida de ajustar los datos del trabajo presentado por FAETH et al (18) para una flama de gas Propano. Esta información se ajusta a una función trascendente, la cual se expresa mediante la siguiente ecuación :

$$1.1 - I -$$

$$\frac{u}{u_0} = \frac{1 - \exp(-\beta r)}{1 - \exp(-\beta r_0)}$$

De acuerdo con la solución propuesta por Spalding (59), para obtener la razón de velocidad contra el valor de velocidad central,  $\frac{u}{u_c}$  tenemos la ecuación

2.26, en donde :

$$\xi = \frac{\sqrt{3\rho}}{4\sqrt{\mu}} u_0 r_0 \frac{r}{x} \quad 2.31$$

$u_0$  es la velocidad inicial del flujo, conocida al fijar el 'LHF'.

$r_0$  es el radio inicial del flujo, conocido al fijar el 'LHF'.

$\mu$  viscosidad del gas, se considera constante en todos los cálculos.

$\rho$  densidad del gas, se considera constante en todos los cálculos.

Por ejemplo para un 'LHF' de 1 a 5 m, se tendrían radios iniciales  $0.01 \leq r_0 \leq 0.05$  m, considerando gastos de combustible de 1 a 20 g/s y un LHF de 2.5 m, las velocidades del flujo de aire serán  $6.56 \leq u_0 \leq 131.33$  m/s.

La razón de la fracción mezcla central contra el valor de fracción mezcla inicial como función de la distancia axial, se calcula con la ecuación :

$$\frac{f_c}{f_o} = \frac{10^{((1.115 - \log(\frac{x}{d}))}}{1.21526}; \quad 13 \leq \frac{x}{d} \leq 1000; \quad 2.32$$

La razón de fracción mezcla contra el valor de fracción mezcla central en función de la distancia radial, se calcula con la ecuación 2.25, en tanto que la ecuación 2.33, se propone para calcular los esfuerzos de Reynolds es la siguiente :

$$\frac{\bar{u}'\bar{v}'}{u_c^2} = \exp\left(-815\left(\frac{r}{x}\right)^2 + 73\frac{r}{x} - 5.9\right) \quad 2.33$$

Para calcular la temperatura se tomaron las gráficas 2.13 - 2.14 correspondientes a una flama de gas propano (18) y mediante una transformación de coordenadas ' $x/d$ ' y ' $r/x$ ', se obtuvieron los perfiles de temperatura que se muestran en la figura 2.15. Estas son las temperaturas que se utilizaran para calcular los parámetros de la aproximación 'LHF' que

## 36 APLICACION DE LA DINAMICA DE FLUIDOS...

proponemos para modelar la evolución, concentración, evaporación y reacción de la mezcla n-heptano - aire que se utilizará en el desarrollo de este trabajo.

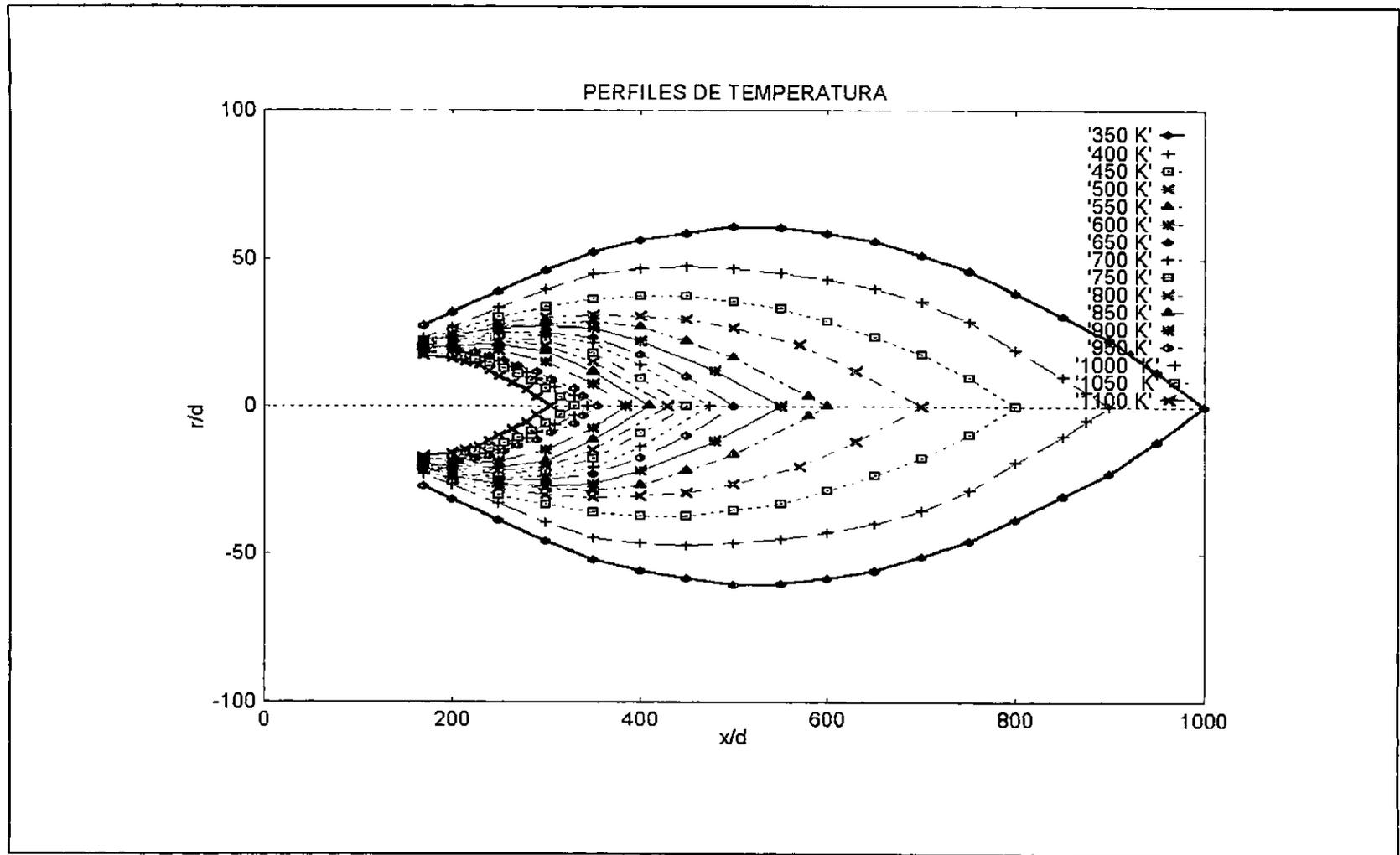


Figura 2.15. Perfiles de temperatura para la combustión de Propano, obtenidos a partir de las figuras 2.13 y 2.14.

### 3.- EVOLUCION DE LA MEZCLA AIRE-COMBUSTIBLE.

En este capítulo se describen los usos de mezclas gas-líquido (formación de sprays), se caracterizan estas mezclas, se propone una forma de simular la atomización del combustible líquido, se calcula la evaporación de combustible en las gotas, se comparan dos modelos de evaporación y se establecen las condiciones para el tratamiento que se le dará a la evolución de la mezcla aire - n-heptano.

La transformación de un volumen de líquido en un grupo de pequeñas partículas de líquido (gotas) dispersas en una atmósfera gaseosa (SPRAYES) es una aplicación industrial y parte central de procesos como : combustión, generación de energía eléctrica con turbinas de gas, encendido de motores diesel, secado, evaporación en frío, metalurgia de polvos, pintado, fumigado, así como en muchas aplicaciones de medicina y meteorología (42). Numerosos dispositivos han sido desarrollados para producir SPRAYES. Como se puede suponer, el estudio de los fenómenos de transporte en la producción y evolución de los SPRAYES, se complica debido a la presencia simultánea de varios efectos como son : la distribución de gotas de diferente tamaño al integrarse al flujo, el estudio del espacio físico, la evaporación de las gotas del líquido, el arrastre producido por el flujo de gases. El problema se puede representar como un flujo gaseoso que arrastra gotas de líquido, el modelado de este tipo de trabajo ha sido ampliamente tratado en la literatura (19, 75) y se han descrito como parte de esta tesis los flujos: separados estocásticamente 'SSF' y separados determinísticamente 'DSF', en la sección 2.2.1, en la sección 2.2.2 se describe la aproximación de flujo localmente homogéneo 'LHF'.

En cuanto a la generación, tratamiento y modelado de SPRAYES, este trabajo parte de la tesis doctoral 'ATOMIZACION Y COMBUSTION DE HIDROCARBUROS LIQUIDOS' de Juan Rubén Varela Ham (69), el cual considera una distribución rígida en cuanto al tamaño y velocidad de las gotas, haciendo el análisis unidimensional de la evolución del spray mediante las ecuaciones de Navier - Stokes). En el presente trabajo se pueden incluir diferentes tipos de distribuciones de tamaños y velocidades de gotas. La evolución de los SPRAYES se hace trazando el movimiento, velocidad, tamaño y evaporación de cada gota en las direcciones 'x' y 'y'.

En general cualquier aproximación ó modelo que se proponga para estudiar teóricamente a los SPRAYES, deberá considerar además de las características físicas de los fluidos (número de fases y componentes), una ecuación de estado para los gases, las ecuaciones de balance para: conservación de masa (especies), conservación de cantidad de movimiento y de conservación de energía. Los cambios de presión (compresibilidad) causados por la interacción

flujo, cambios de velocidad en el flujo o a la presencia de flujos reactivos. Las cantidades físicas instantáneas (velocidad, presión, temperatura, densidad, etc.) se considerarán variables aleatorias centradas que fluctúan en el tiempo y en el espacio.

Es sumamente importante examinar como estas variables se manifiestan en los principales mecanismos que definen la evolución del SPRAY como son: evaporación, difusión, producción y destrucción de especies, etc., la evolución de un SPRAY se puede representar con el siguiente diagrama que se presenta en la figura 3.1.

### 3.1 CARACTERIZACION DE SPRAYES.

Cuando un líquido es descargado a través de pequeñas aberturas a una alta presión, en un flujo gaseoso, suceden dos fenómenos principales (41, 42) que son :

- 1.- El fraccionamiento del líquido en pequeñas gotas de diferentes tamaños.
- 2.- La incorporación de las partículas de líquido al flujo gaseoso; el tamaño y la velocidad de las gotas dependen del tamaño de la abertura por donde se inyecta el líquido y de la presión de aire con la que se provoca la dispersión.

Buscando en la literatura algunos datos acerca de la funcionalidad de la velocidad de las gotas con la presión de inyección, encontramos que HIDROCARBUROS (HC's) líquidos inyectados en aire (41), considerando que no hay fricción, mediante 2.5 atmósferas de presión se producen gotas a una velocidad de salida de aproximadamente de 18.6 m/s, la cual se incrementará en función de la raíz cuadrada de la presión, así por ejemplo una presión de 8 atmósferas producirá velocidades promedio de salida de 41.5 m/s y 55 atmósferas darán velocidades aproximadas de 117 m/s.

A la formación y dispersión de gotas líquidas en el flujo gaseoso se le denomina atomización y a la mezcla de estos fluidos se le conoce como SPRAY. La atomización normalmente se produce a partir de una pequeña película de líquido que se desintegra por medio de energía cinética o energía mecánica en pequeñas partículas de líquido (gotas) que son expuestas a un flujo de aire a alta velocidad que los arrastra, debido a la gran cantidad de esfuerzos y efectos que se introducen en el proceso de atomización, el SPRAY resultante se caracteriza por un amplio espectro en el tamaño y velocidad de las gotas.

La fuerza necesaria para atomizar un líquido depende directamente de la tensión superficial del líquido, que representa la fuerza que se opone a la formación de la nueva área superficial, la mínima energía requerida para la atomización es igual a la tensión superficial multiplicada por el incremento de área superficial.

Al aumentar el número y tamaño de las aplicaciones de SPRAYES (35), se

# DIAGRAMA PARA OBTENER LA EVOLUCION ESPACIO-TEMPORAL DE SPRAYES

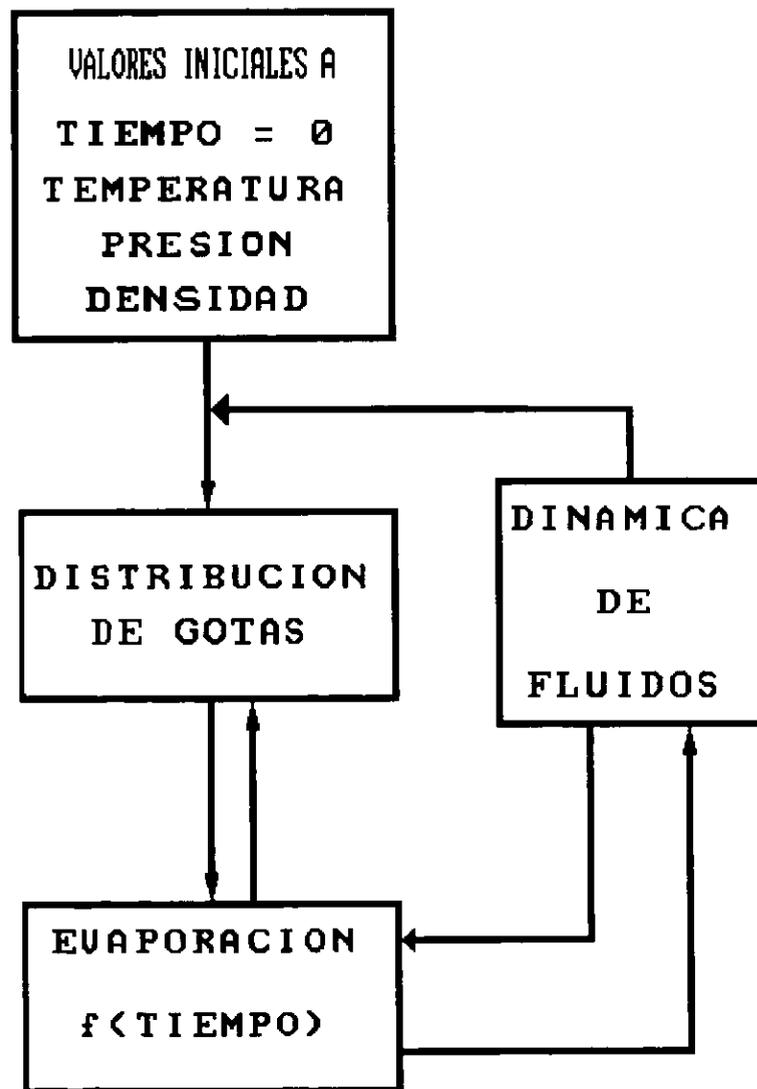


Figura 3.1 Diagrama para representar la evolución de sprays.

necesita de mayor número de experimentos y modelos matemáticos para estudiar ó simular la generación, evolución y combustión (72, 73, 74) de los mismos, normalmente la descripción de un SPRAY incluye los valores de : densidad, velocidad y distribución de tamaños de gotas como una función del tiempo y el espacio, haciéndose notar que estas características dependen fuertemente de la geometría interna del atomizador, las propiedades del líquido y del medio gaseoso que arrastra las gotas.

Para comparar SPRAYES producidos por diferentes dispositivos de atomización, se calculan las áreas superficiales del líquido antes y después de la atomización, el cálculo del área superficial del líquido antes de la atomización se aproxima con el área interna del ducto que conduce el líquido al atomizador, el área superficial posterior a la atomización se calcula mediante la suma del área superficial de las gotas producidas, el factor de incremento en el área superficial es una función directa del nivel de atomización y es un punto determinante en fenómenos superficiales como la evaporación, difusión, absorción, etc. El Diámetro Medio Sauter (41) (SMD) es la relación del volumen total de las gotas entre el área superficial de las mismas gotas, siendo este un número que no depende del tipo de atomizador, nos sirve para comparar los diferentes atomizadores y modelos de atomización propuestos.

$$SMD = \frac{\sum_{i=1}^{n_g} N_i D_i^3}{\sum_{i=1}^{n_g} N_i D_i^2} \quad 3.1$$

El flujo gaseoso dentro del cual el líquido es inyectado puede variar ampliamente tanto en presión como en temperatura, especialmente en combustibles líquidos para sistemas de combustión (13, 34, 64). Los patrones de SPRAY generados por grandes diferenciales de presión en atomizadores producen remolinos (turbulencia) y generan corrientes de aire a alta velocidad que modifican los patrones de flujo, los cuales también son alterados por el ángulo de la boquilla de inyección, este parámetro influye directamente en el tamaño o alcance del SPRAY.

El desarrollo de un modelo para aproximar numéricamente la generación, tratamiento y evolución de un SPRAY (49, 53, 63) dependerá en cuanto a las gotas de líquido de :

- 1.- Angulo de salida de los orificios de atomización.
- 2.- Volumen.
- 3.- Rango de tamaños.
- 4.- Rango de velocidades.
- 5.- Relación de volumen-área (SMD) para el combustible.

## EVAPORACION DE UNA GOTA

Presión atmosférica

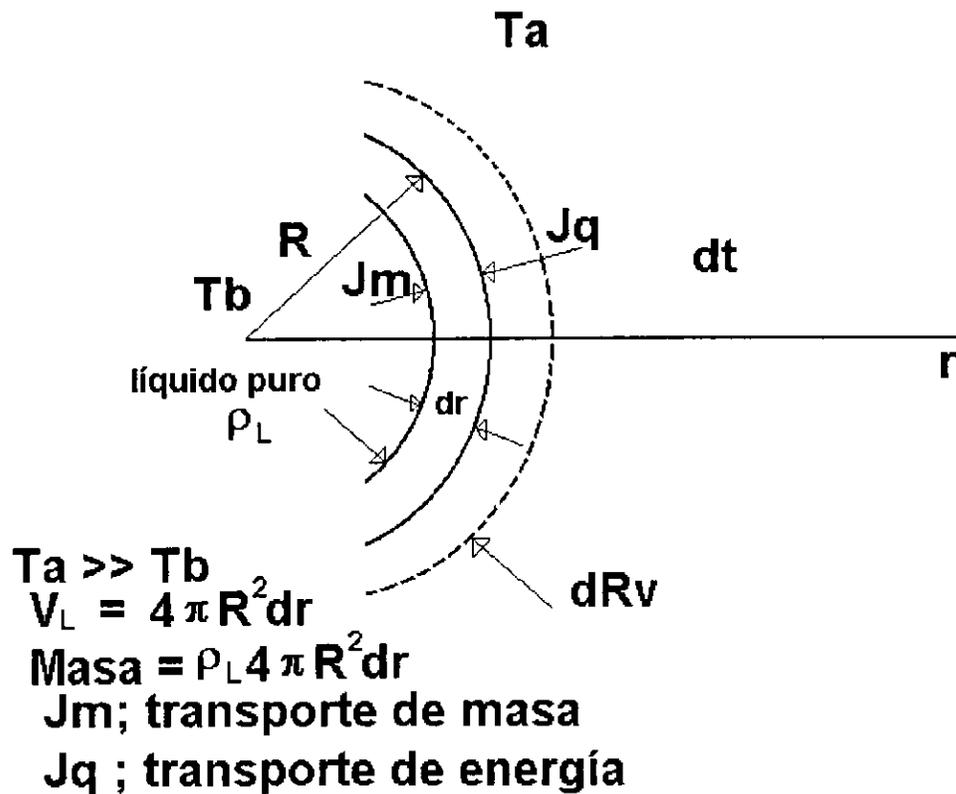


Figura 3.2 Esquema ideal de la evaporación de una gota.

6.- Temperatura superficial.

Así como para el flujo gaseoso se necesita de :

7.- Gasto de aire.

8.- Velocidad.

9.- Temperatura ambiente.

10.- Presión de inyección.

El conocimiento de esta información nos permitirá calcular, la transferencia de calor entre la fase dispersa del líquido y el gas circundante, la transferencia de masa líquida a vapor (evaporación, ver figura 3.2), la evolución (cantidad-posición) de la fase dispersa de líquido así como la de gas circundante, con lo cual en cualquier instante de tiempo se podrá caracterizar el SPRAY.

### 3.2 HISTORIA POR ETAPAS DE LA VIDA DE UNA GOTA.

El presente trabajo, esta encaminado al estudio de los flujos donde la compresibilidad únicamente afecta a la densidad, y esta se modifica con los perfiles de temperatura ( $t_{10}$ ), por las diferentes cantidades de combustible líquido-aire que se mezclan y pueden reaccionar.

Las características, de densidad, velocidad y tamaño de gotas en un SPRAY son función del tiempo y el espacio, las consideraciones que se hicieron para obtener un modelador (generación - evolución de gotas) de SPRAY se describen las secciones siguientes :

#### 3.2.1 DISTRIBUCION DE TAMAÑOS Y VELOCIDADES DE GOTAS.

Se considera que se generan aleatoriamente cada milésima de segundo, paquetes de un determinado número de gotas (10, 100, 1000, etc.), con una distribución normal de tamaños de gotas, la cual es básicamente de 2 formas :

1.- A partir del valor medio del diámetro que se quiere generar y la dispersión con que se esperan obtener las gotas (desviación estándar), de esta información se obtienen los límites de la distribución de gotas con un nivel de confianza mayor al 95%, mediante las ecuaciones :

$$r_{\min} = \langle r \rangle - 3\sigma \quad 3.2$$

$$r_{\max} = \langle r \rangle + 3\sigma \quad 3.3$$

En donde :

$\sigma$  desviación estándar

#### 44 EVOLUCION DE LA MEZCLA AIRE-COMBUSTIBLE

2.- La segunda forma es dándole directamente el limite superior y el limite inferior, a partir de estos datos y con las formulas anteriores se puede despejar el radio medio y la desviación estándar.

Con la finalidad de hacer una discretización en los rangos de tamaño de gotas, al mismo tiempo que simplificar el procedimiento computacional, los límites inferior y superior se reasignan a la decena más cercana en valor inferior para el mínimo y mas cercana al superior, con esta modificación se tiene un rango fijo de decenas el cual al ser dividido entre diez, da un número entero de intervalos <sup>1</sup>:

$$r_{\min} = 10. * (IFIX(\frac{r_{\min}}{10})) \quad 3.4$$

$$r_{\max} = 10. * (IFIX(\frac{r_{\max}}{10} + 1)) \quad 3.5$$

Como los valores obtenidos de los intervalos discretos en rangos de 10 micras para radios no dan el número total de gotas requerido, (porque la información proviene de una integral de  $-\infty$  a  $\infty$ ), se normaliza al número de gotas que se quieren manejar, que la mayoría de las veces son 100 gotas. En la figura 3.3 se puede ver una distribución generada a partir de un radio medio  $\langle r \rangle = 150.00$  micras, con una desviación estándar  $\sigma = 22.50$  micras y 100 gotas.

Si hacemos esta reasignación de límites tenemos al dividir entre 10, un número entero de intervalos que obtenemos así :

$$n = \frac{r_{\max} - r_{\min}}{10} \quad 3.6$$

Los limites de cada intervalo se obtienen con la ecuación de recurrencia :

---

1 Se hace notar que esta notación es válida únicamente en forma computacional y que IFIX(nreal) es una función de cómputo que permite fijar la parte entera de un número real.

$$r_i = r_{\min} + i * 10. \quad \text{para } 0 \leq i \leq n \quad 3.7$$

Con esta información se obtiene una distribución normal con intervalos discretos para un determinado número de gotas (por ejemplo 100) que se quieren generar, la discretización se hace mediante la ecuación :

$$N_{gotas,i} = 100. * e^{-\frac{1}{2} \left( \frac{r_i - \langle r \rangle}{\sigma} \right)^2} \quad 3.8$$

En la figura 3.3 se encuentra una distribución normal de tamaños en el intervalo de 90 a 210 micras.

Para obtener la distribución de velocidades se siguen los mismos lineamientos (algoritmos) que en la distribución de tamaños de gotas, solo que aquí se incluyen las siguientes variantes, la velocidad asignada aleatoriamente se hace en metros/segundo, ajustándose al número entero mas cercano inferior para el límite mínimo y al más cercano superior en el caso del limite máximo, la distribución se puede ver en la figura 3.4.

Una vez asignada la velocidad, esta se divide en un componente 'x' y otro 'y', debido a que al inyectarse la gota, el dispositivo tiene un ángulo de salida 'θ' con respecto al eje central del difusor, generando los dos componentes en el vector de velocidad del SPRAY, para asignar los valores correspondiente a v<sub>x</sub> y v<sub>y</sub> tenemos :

$$V_x = Velocidad * COS(\theta) \quad 3.9$$

$$V_y = Velocidad * SEN(\theta) \quad 3.10$$

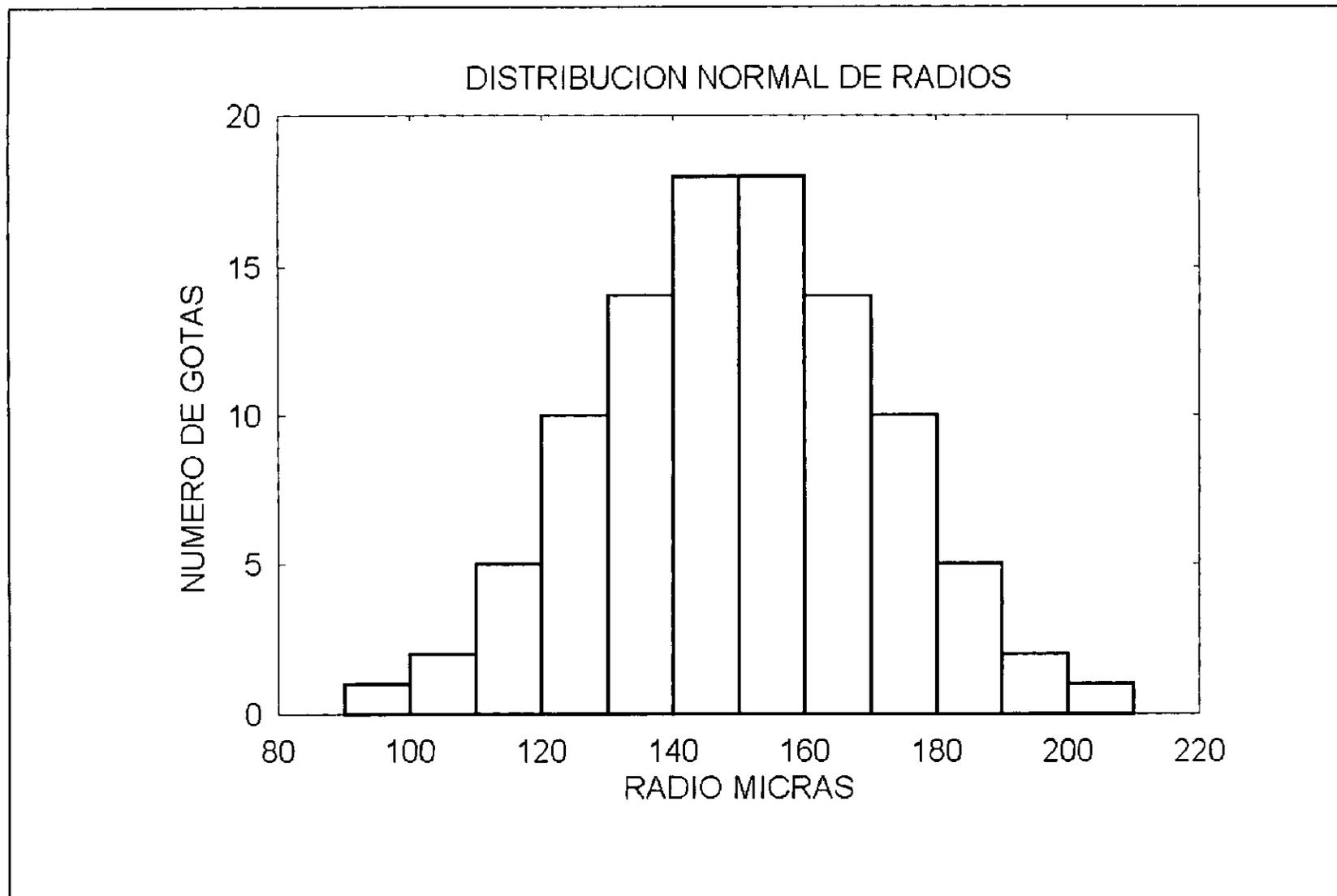


Figura 3.3. Distribución de tamaños de gotas.

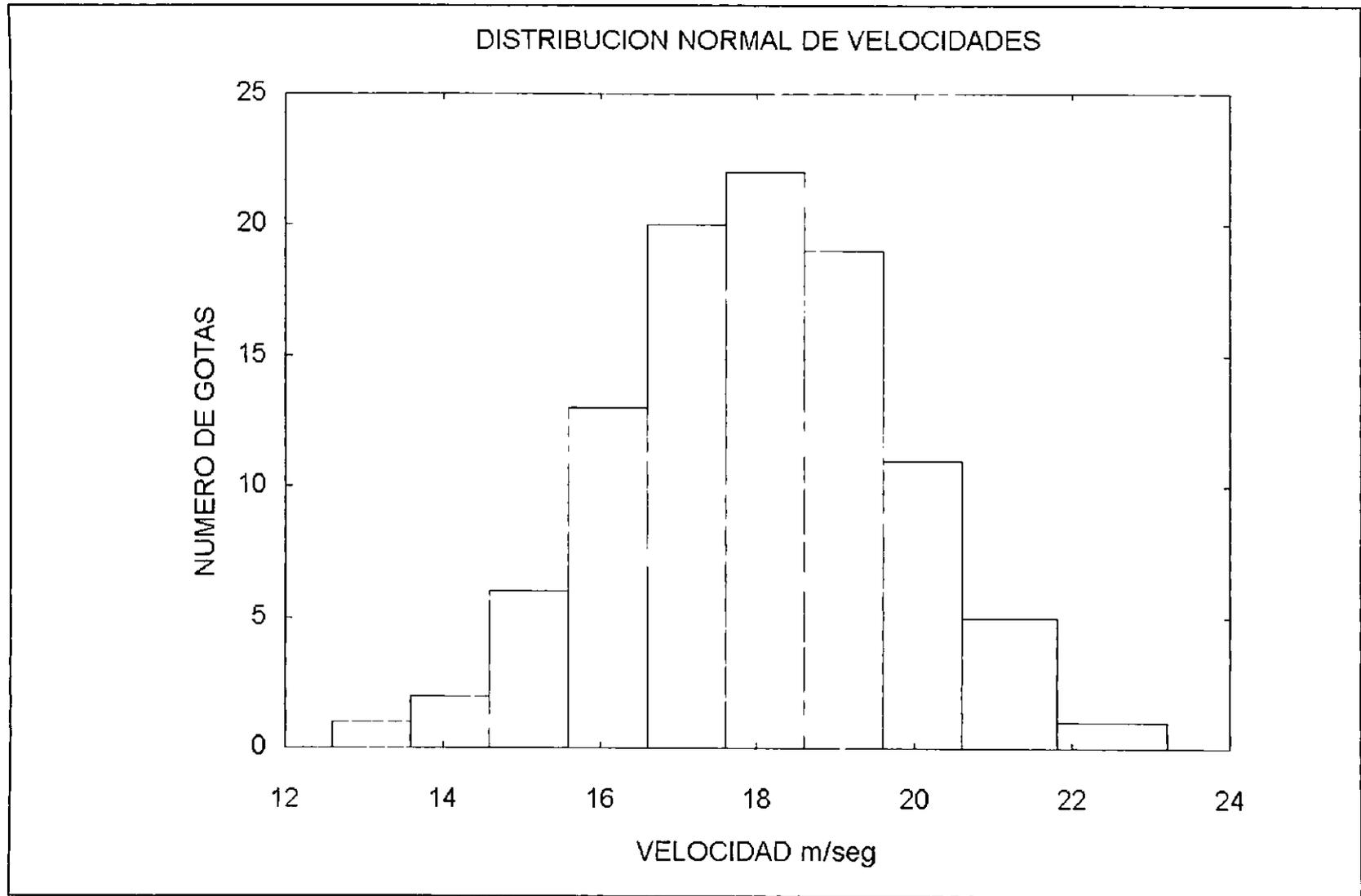


Figura 3.4 Distribución velocidades de gotas.

### 3.2.2 EVAPORACION DE GOTAS EN UN MEDIO GASEOSO.

El proceso mediante el cual se forma o produce un spray, es un problema interesante y complejo de estudiar o modelar, ya que involucra la evolución espacio-temporal, evaporación y combustión de las gotas de combustible líquido sumergidas en el flujo gaseoso. En este trabajo se discuten las siguientes formas de evaluar la evaporación del spray mediante cálculos termodinámicos o termofísicos para lo cual se hacen las siguientes suposiciones :

#### 3.2.2.1 CALCULOS TERMODINAMICOS EN EQUILIBRIO.

A partir de un spray formado, independientemente del dispositivo utilizado, para evaluar la cantidad de combustible que se evapora de las gotas en función de las variables termodinámicas, tenemos lo siguiente :

1.- Se hace un análisis para una gota de combustible rodeada de su vapor, en equilibrio y contenida en un recipiente imaginario de paredes elásticas (sistema), en donde la presión del vapor ( $p_v$ ) y la presión de la gota líquida ( $p_l$ ) pueden o no ser diferentes.

2.- El medio ambiente de este sistema solo interactúa a través de la fase vapor, por lo cual se puede expresar mediante la ecuación :

$$dW_0^{rev} = p_v dV_v + p_l dV_l \quad 3.11$$

En donde :

$dW^{rev}$  = Intercambio de trabajo reversible.

$dV_v$  = Diferencial del volumen del vapor.

$dV_l$  = Diferencial del volumen del líquido.

3.- El trabajo de "compresión" realizado por el medio (fase vapor sobre la gota) es:

$$p_v dV_l = -p_l dV_l + \sigma dA \quad 3.12$$

En donde :

$dA$  = Diferencial de área superficial de la gota.

$\sigma$  = Tensión superficial.

Así, el trabajo neto comunicado por todo el sistema, como las fuerzas de los alrededores son :

$$dW_0^{rev} = p_v dV_v + p_l dV_l - \sigma dA \quad 3.13$$

4.- Si el sistema gota-vapor de combustible es cerrado (no hay entrada ni salida) y está en equilibrio, las diferenciales de volumen tanto para el líquido como para el gas son iguales pero de signo contrario:

$$dV_l = -dV_v \quad 3.14$$

5.- El trabajo neto que comunica el sistema (gota-vapor) al medio es cero y de esta se puede establecer la siguiente ecuación:

$$[p_l - p_v]dV_l = \sigma dA \quad 3.15$$

Como la relación entre el área de la gota y el volumen del gas es puramente geométrico, para simplificar las expresiones se considerará como una gota esférica, por lo tanto el área y el volumen correspondiente son :

$$A = 4\pi r^2 \quad 3.16$$

$$V_g = \frac{4}{3}\pi r^3 \quad 3.17$$

Obteniendo las derivadas del volumen del gas ( $V_g$ ), del área, substituyéndolas y haciendo las reducciones pertinentes en la ecuación del trabajo neto obtenemos la ecuación de Laplace :

$$[p_l - p_v] = \frac{2\sigma}{r} \quad 3.18$$

Esta ecuación relaciona las presiones internas y externas de una gota esférica de radio "r" con la tensión superficial.

En general, la presión de vapor en equilibrio con su líquido es  $p_v$ , pero para el caso en que "r" tienda a infinito (substrato líquido en equilibrio con su vapor) se representara como  $p_{v\infty}$ , así, se podrá satisfacer la igualdad de los potenciales químicos :

$$\mu_v(T, p_v) = \mu_l(T, p_l) \quad 3.19$$

Si utilizamos el teorema fundamental del cálculo integral para calcular el volumen molar del vapor obtenemos la expresión :

50 EVOLUCION DE LA MEZCLA AIRE-COMBUSTIBLE

$$\bar{V}_v = \left( \frac{\partial \mu_v}{\partial p_v} \right)_{T, p_v} \quad 3.20$$

En donde :

$\bar{V}_v$  Volumen molar del vapor y  $\bar{V}_l$  volumen molar del líquido.

Para calcular el volumen molar de la gota líquida que es incompresible y considerando que el vapor de combustible que la rodea sigue el comportamiento de un gas ideal tenemos :

$$p_v \bar{V}_v = RT \quad 3.21$$

$$\bar{V}_l = \frac{V_l}{\eta_l} \quad 3.22$$

Como el volumen molar del líquido es constante el sistema se puede expresar como :

$$\int_{p_{v_\infty}}^{p_v} \frac{RT}{p_v} dp_v = V_l \int_{p_{v_\infty}}^{p_v} dp_v + \sigma \left( \frac{\partial A}{\partial \eta_l} \right)_{T, p_v} \quad 3.23$$

En donde :

A es el área superficial de la gota.

$\eta_l$  es el número de moles de líquido.

Realizando las integrales y substituyendo los limites obtenemos:

$$RT \ln \left[ \frac{p_v}{p_{v_\infty}} \right] = \bar{V}_l (p_v - p_{v_\infty}) + \sigma \left( \frac{\partial A}{\partial \eta_l} \right)_{T, p_v} \quad 3.24$$

Partiendo de las suposiciones geométricas y de la definición de volumen molar se puede obtener :

$$\left(\frac{\partial A}{\partial \eta_l}\right)_{T, p_v} = \frac{2V_l}{r} \quad 3.25$$

Substituyendo estas relaciones obtenemos :

$$RT \ln\left[\frac{p_v}{p_{v\infty}}\right] = \bar{V}_l(p_v - p_{v\infty}) + \frac{2\sigma V_l}{r} \quad 3.26$$

Como el termino  $\bar{V}_l(p_v - p_{v\infty})$  tiene una contribución muy pequeña comparada con el resto de los términos, puede despreciarse con lo cual queda la ecuación :

$$r = \frac{2\sigma V_l}{RT \ln(p_v/p_{v\infty})} \quad 3.27$$

La ecuación 3.27 es conocida como ecuación del modelo de KELVIN (2). En donde el radio de la gota depende de la presión de vapor ( $p_v$ ), la temperatura (T) y la tensión superficial ( $\sigma$ ) que a su vez es inversamente proporcional a la temperatura (2), en forma general, se puede observar que el radio disminuye aumentando la temperatura o disminuyendo la tensión superficial.

### 3.2.2.2 CALCULOS TERMOFISICOS.

El cálculo de la aproximación termofísica parte de considerar que las gotas sumergidas en la atmósfera gaseosa que las arrastra, están sometidas a varias fuerzas que modificaran su tamaño y posición dentro del flujo, si consideramos individualmente cada gota dentro del SPRAY, el nuevo tamaño se puede obtener con la ley del diámetro cuadrado (40, 57), la cual es una relación rectilínea obtenida como resultado del estudio de evaporación de gotas aisladas, sumergidas en ambientes gaseosos, estancados, la forma más común de representar esta ley es la siguiente :

$$d^2 = d_0^2 - \lambda t \quad 3.28$$

En donde 'd' es el diámetro final de la gota, 'd<sub>0</sub>' el diámetro inicial de la gota,

## 52 EVOLUCION DE LA MEZCLA AIRE-COMBUSTIBLE

$\lambda$ , la constante de evaporación, que depende de la naturaleza de la gota y de las condiciones ambientales y 't', el tiempo.

Esta ley se desarrollo en forma empírica (40) y no fue sino hasta 1953 en que Spalding (57) la dedujo en base a una aproximación estacionaria, la cual implica resolver las ecuaciones de balance de masa y energía, conduciendo a la siguiente expresión para la constante de evaporación :

$$\lambda = \frac{B}{c} \frac{k}{\rho_L} \ln(1+B) \quad 3.29$$

En donde 'B' es el número de transferencia, 'c' la capacidad calorífica de vapor, 'k' la conductividad térmica del vapor y ' $\rho_L$ ' la densidad del líquido.

El número de transferencia depende de las condiciones ambientales que envuelven a la gota, esto es, temperatura, presión, concentración de oxígeno, etc. Este parámetro también depende de la estequiometría en casos de combustión, tomando como base el modelo original de Spalding (57) la estimación del número de transferencia queda como :

$$B = \frac{H}{Q} \frac{M_{ox}}{\nu} + \frac{c}{Q} (T_A - T_B) \quad 3.30$$

En donde 'H' es el calor de combustión, 'Q' es el calor latente a la temperatura de ebullición del líquido, ' $M_{ox}$ ' la concentración de oxígeno,  $\nu$  la razón estequiométrica oxidante/combustible,  $T_A$  la temperatura de la atmósfera y  $T_B$  la temperatura de la superficie de la gota.

En la combustión de una gota aislada (24, 25, 27, 54) inmersa estacionariamente en una atmósfera con movimiento se presenta el efecto de convección natural, que rompe la supuesta simetría esférica adoptada en el modelo de aproximación estacionaria. La convección aumenta la razón de pérdida de masa en la gota, aumentando el valor de la constante de evaporación.

Al calcular y graficar la cantidad de líquido que se evapora de la gota mediante datos termofísicos, se puede observar en la figura 3.6 que con la disminución del radio de la gota aumenta la cantidad de líquido evaporado, lo cual concuerda en forma general con los cálculos termodinámicos de la tensión superficial realizados con la ecuación 3.27. De los valores obtenidos, observamos que la tensión superficial disminuye al reducirse el radio de la gota, y por lo tanto aumenta la cantidad de líquido que se evapora.

### 3.3 FUERZAS DE ARRASTRE DE LAS GOTAS.

Cuando existe un movimiento relativo entre la gota y el ambiente que la rodea, aparecen efectos que modifican fuertemente el proceso de evaporación y que cambian el estado del movimiento. Para estudiar estos casos se recurre a la ley de STOKES (62, 8).

$$\vec{F}_i = 3\pi\mu d_i(\vec{u} - \vec{v}_i) \quad 3.31$$

En donde  $\vec{F}$  es la fuerza que ejerce el flujo de gases sobre una esfera solida de diámetro ' $d_i$ ',  $\mu$  es la viscosidad de los gases,  $\vec{u}$  es la velocidad de los gases y  $\vec{v}$  es la velocidad de la gota.

Una forma alternativa de escribir la ley de STOKES (69) en términos del coeficiente de arrastre  $C_D$ , que además permite extender su aplicación para numeros de Reynolds  $R_E$  grandes es :

$$\vec{F} = \frac{\pi}{8} \rho d_i^2 C_D |\vec{u} - \vec{v}| (\vec{u} - \vec{v}) \quad 3.32$$

Y en donde  $\rho$  es la densidad de masa.

A partir de la ecuación 3.32 y utilizando valores par el coeficiente de arrastre calculados con  $C_D = 24/R_E$ , se hace posible el tratamiento de una variedad de regímenes que van desde  $R_E = 1$  hasta  $R_E = 2000$ , en donde el número de Reynolds, lo calculamos a partir de la ecuación :

$$R_E = \frac{\rho}{\mu} d_i |\vec{u} - \vec{v}| \quad 3.33$$

Cuando existe transferencia de masa entre la gota y el flujo de gases (este efecto aparece siempre en el estudio de la evaporación de SPRAYS), Spalding (59) propone la siguiente expresión

$$C_{DM} = C_D \frac{\ln(1+B)}{B} \quad 3.34$$

donde :

$C_{DM}$  es el coeficiente de arrastre en presencia de la transferencia de masa. En trabajos más recientes (1) se sugiere que el factor  $(1+B)^{-0.7}$  produce

## 54 EVOLUCION DE LA MEZCLA AIRE-COMBUSTIBLE

mejores resultados que la expresión propuesta por Spalding (59), este factor pretende tomar en cuenta todos los efectos que ocurren en la transferencia de masa, momento y energía entre la gota y el flujo de gases que la arrastran.

### 3.4 DINAMICA DE MOVIMIENTO DE LAS GOTAS.

Las ecuaciones que describen el movimiento individual y los cambios que ocurren en la gotas (incluyendo cambio de posición, velocidad y tamaño), son sumamente difíciles (si no es que imposibles) de obtener analíticamente, debido a la irregularidad de las condiciones a que están sujetas las gotas a lo largo del SPRAY. El período de tiempo  $\Delta t$  en que se analiza la cantidad de líquido evaporado es de 0.001 segundos (este es el tiempo de vida promedio de una gota de diámetro aproximado a 20 micras, además este es un período de tiempo en el que se pueden efectuar todas las reacciones químicas de una mezcla combustible-aire con fracciones mezcla entre 0.02 y 0.20, ver capítulo 4 y apéndice C).

Con el período de tiempo determinado, se supone que la gota tiene un movimiento rectilíneo y uniformemente acelerado, a partir de estas suposiciones, se aplican las ecuaciones clásicas de movimiento y la ecuación de pérdida de masa (Ley del diámetro cuadrado (59)) para intervalos de tiempo cortos, esto permite predecir: posición, velocidad y radio de las gotas a partir de sus condiciones iniciales.

La velocidad final  $\bar{v}$  y la posición final  $\bar{x}$  se calculan de acuerdo con las ecuaciones clásicas de la mecánica de Newton (8):

$$\bar{v} = \bar{v}_0 + \bar{a} \Delta t \quad 3.35$$

En donde  $\bar{v}_0$  es la velocidad inicial de la gota,  $\bar{a}$  la aceleración y  $\Delta t$  el tiempo transcurrido y :

$$\bar{x} = \bar{x}_0 + \bar{v}_0 \Delta t + \frac{\bar{a}}{2} (\Delta t)^2 \quad 3.36$$

En donde  $\bar{x}_0$  es la posición inicial de la gota.

A partir de la densidad del líquido  $\rho_L$ , se obtiene  $m_0$  y usando la fuerza según la ecuación  $F = m_0 \bar{a}$  se obtiene la expresión para la aceleración :

$$\bar{a} = \frac{3}{8} \frac{\rho}{\rho_L} \frac{C_D}{R_0} |\bar{u} - \bar{v}_0| (\bar{u} - \bar{v}_0) \quad 3.37$$

### 3.5 PROPOSICIONES PARA MODELAR UN SPRAY.

En este trabajo se propone el desarrollo de un modelo matemático de SPRAYES, tanto su generación como su evolución, para lo cual la primera proposición que se asume es considerar que la mezcla de combustible líquido-aire están en una sola fase homogénea, este es un sistema 'LHF', en donde como variables del modelado de SPRAY, se tienen las condiciones o el medio en que se va a considerar su evolución, para ello se fija la distancia máxima a la que puede llegar (1 - 10 m). Otra variable que se puede modificar interactivamente es la cantidad de combustible que se va a quemar (1 - 50 g. de n-Heptano/s.), así como el ángulo de atomización (3-20°), a partir de estos datos, se obtienen las demás variables dependientes del proceso de atomización, tomando la concentración de especies y la temperatura de la relación instantánea de la fracción mezcla de combustible (38).

#### 3.5.1 PARAMETROS DE ATOMIZACION.

La atomización es la base de la formación del SPRAY, en este caso, la simulación de la disgregación del líquido en gotas se puede incluir con cualquier tipo de distribución de tamaños y velocidades de gotas, si cumple con las siguientes condiciones :

- i).- indicar la cantidad de gotas ó velocidades.
- ii).- los parámetros de la distribución, cotas de cada clase y sus frecuencias.

Como elemento de seguridad se verifica que la suma de frecuencias en las distribuciones de tamaños y velocidades de gotas sean igual. La forma como se interactúa con el sistema es a través de la lectura de archivos de datos en donde se almacenan las distribuciones de tamaños y velocidades de gotas, a partir del gasto de combustible se calcula el gasto de aire necesario.

#### 3.5.2 GASTO DE AIRE.

Al fijar el gasto de combustible (n-Heptano) y considerar la reacción global que se da en su combustión estequiométrica (52) con aire (composición aproximada en peso de 21% de Oxígeno y 79% de Nitrógeno) se tiene :



## 56 EVOLUCION DE LA MEZCLA AIRE-COMBUSTIBLE

Por lo cual por cada gramo de n-heptano se necesita un gasto de 15.11 g. de Aire (3.52 g de Oxígeno y 11.59 g de Nitrógeno), como la reacción de oxidación es exotérmica habrá un aumento en la temperatura que se supone se da en un proceso adiabático, (VER APENDICE E); si la relación no es estequiométrica, es decir existe exceso de aire o exceso de combustible, habrá productos o reactantes que absorberán calor y proporcionaran una variación de la temperatura calculada.

### 3.5.3 PERFILES DE TEMPERATURA.

La temperatura en cada punto ó sección del sistema en que evoluciona el SPRAY será diferente porque la mezcla aire - combustible no es constante, pero para obtener esta mezcla se necesita de una temperatura inicial que provoque la evaporación. Para no partir de una temperatura supuesta arbitrariamente que obligaría al modelo a trabajar (iterar) más, se propone como perfil inicial de temperatura los valores promedio que presentan Faeth et al (18) para propano y pentano en funciones axial y radial, ver figuras 2.15 ó 3.5. A partir de estas temperaturas, se evaporará el n-heptano, el cual se considera que en un intervalo de tiempo menor a 0.001 segundos, se asume que llega a un equilibrio químico local el sistema (productos y reactantes), suponiendo que la velocidad de reacción sea rápida, pero que no hay una explosión en su reacción (23), a partir de este proceso evaporación-equilibrio se calcula una nueva temperatura para cada sección (celda) del sistema, este valor será usado en la siguiente iteración, (evolución del SPRAY), hasta alcanzar un valor semi-constante de evaporación - temperatura, ocurriendo esto se considera que el spray esta en un estado pseudoestacionario.

### 3.5.4 EVAPORACION DE GOTAS EN EL 'LHF'.

Las gotas generadas con un tamaño específico (distribución), a una velocidad (distribución) y un ángulo dado, se consideran dentro del flujo de gas, a una temperatura (ver figura 3.5) y velocidad de aire preestablecidos. En estas condiciones se produce un cambio fisicoquímico en el medio que circunda a las gotas y este, al tender al equilibrio, produce la evaporación de las gotas de combustible líquido. El modelo que se propone para considerar la evaporación es el que se representa en la ecuación 3.28 a presión atmosférica constante.

$$d^2 = d_0^2 - \lambda t \quad 3.28$$

En donde :

t el tiempo, que se incrementa en milésimas de segundo.

$\lambda$  es la constante de evaporación que se calcula de acuerdo con la ecuación 4.29, sus parámetros son :

$c$  = capacidad calorífica del vapor =  $0.58 \text{ cal g}^{-1}\text{K}^{-1}$ .

$k$  = conductividad térmica del vapor =  $0.0005 \text{ cal cm}^{-1}\text{s}^{-1}\text{K}^{-1}$

$\rho_l$  = densidad del líquido (n-heptano) =  $0.582 \text{ kg/l (TPN)}$ .

$B$  = número de transferencia, que se calcula con la ecuación 4.30, este depende de las condiciones ambientales que envuelven a la gota, esto es, temperatura, presión, concentración de oxígeno, etc. Este parámetro también depende de la estequiometría en casos de combustión y los datos correspondientes son :

$H$  = calor de combustión =  $11489.9 \text{ cal/g}$ .

$T_a$  = temperatura de la atmósfera, determinada de acuerdo con su posición en la figura 3.5, los datos mostrados son puntuales y se considera uniformes en toda la celda.

$T_b$  = Temperatura de ebullición =  $372 \text{ K}$ .

$Q$  = calor latente a  $T_b$  del líquido =  $380 \text{ cal/gr}$ .

$M_{ox}$  = concentración de oxígeno =  $10\%$ .

$\nu$  = razón estequiométrica oxidante/combustible =  $1$

Como parte de los resultados de evaporación, se tiene que :

El tamaño de gota desciende como una función del tiempo, siendo independiente de la velocidad del flujo de aire utilizado.

La evaporación a radios pequeños es muy elevada y cuando se aplica la ley del diámetro cuadrado a gotas de radio menor a 15 micras, con intervalos de una milésima de segundo, estas desaparecen en este lapso.

De los cálculos realizados para distintas distribuciones de tamaños y velocidades de gotas, se puede observar en forma general que las gotas con radios menores a 40 micras de tamaño llegan a una velocidad mínima que casi siempre es el 30% de la velocidad inicial, con la cual se inyecta el aire. Como se puede determinar en las gráficas de evaporación contra el radio de la gota, la evaporación es inversamente proporcional al tamaño de la gota.

Los resultados de evaporación se muestran en la figura 3.6, en donde gráficamente se observa que la evaporación se incrementa al disminuir el radio de las gotas, esto concuerda con el modelo de KELVIN (2) en donde a menor tamaño de gota, aumenta la evaporación.

### 3.5.5 EVAPORACION CALCULADA.

Observando la figura 3.6, la evaporación se incrementa con la disminución del radio, lo cual nos hace suponer que las gotas de tamaños menores a 15 micras, ya no tienen velocidad como gotas, sino que su velocidad es muy similar a la velocidad del flujo gaseoso y aplicando el modelo de evaporación,

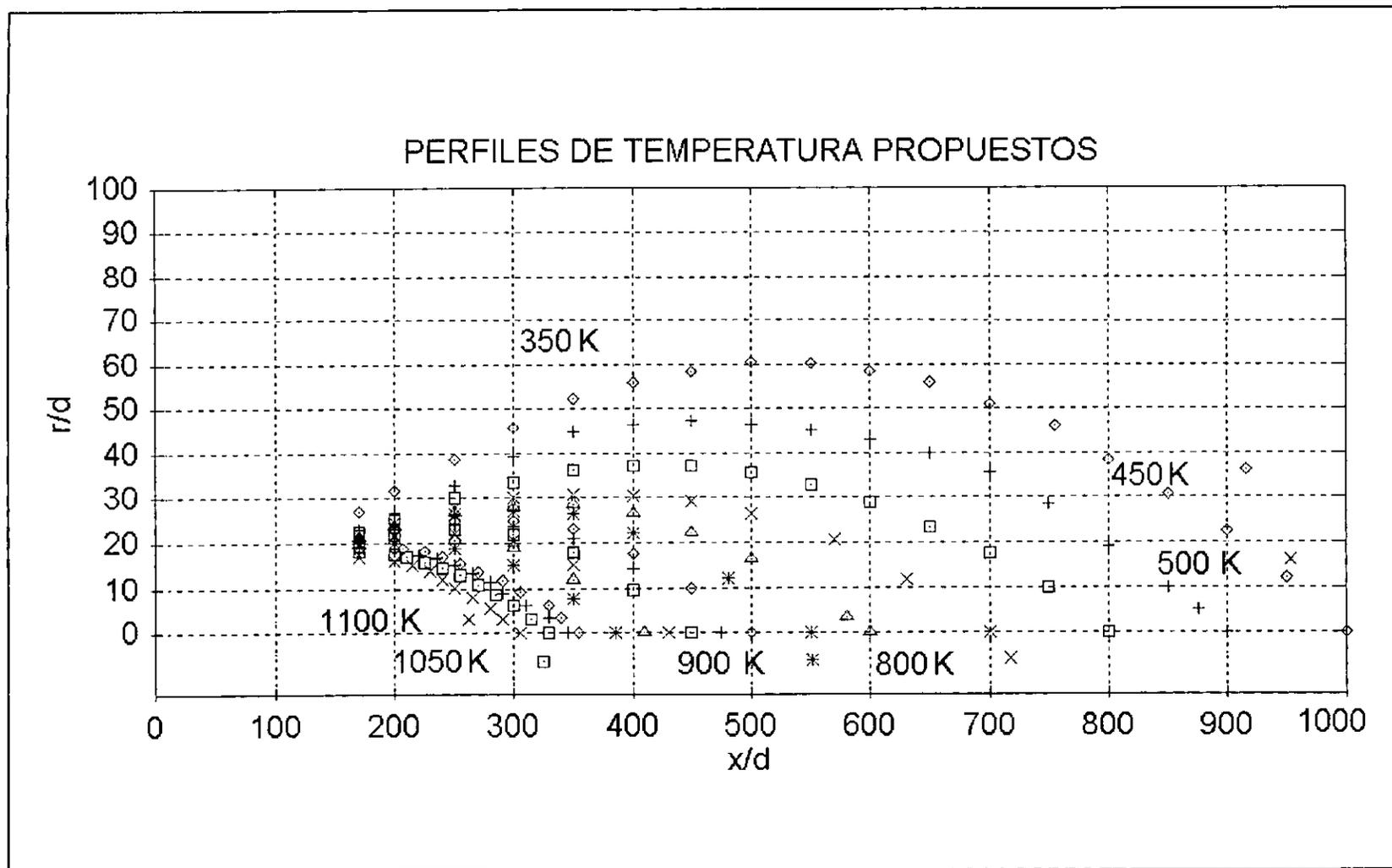


Figura 3.5. Perfil de temperatura propuesto para iniciar la evaporación-combustión de n-heptano en un flujo localmente homogéneo (LHF).

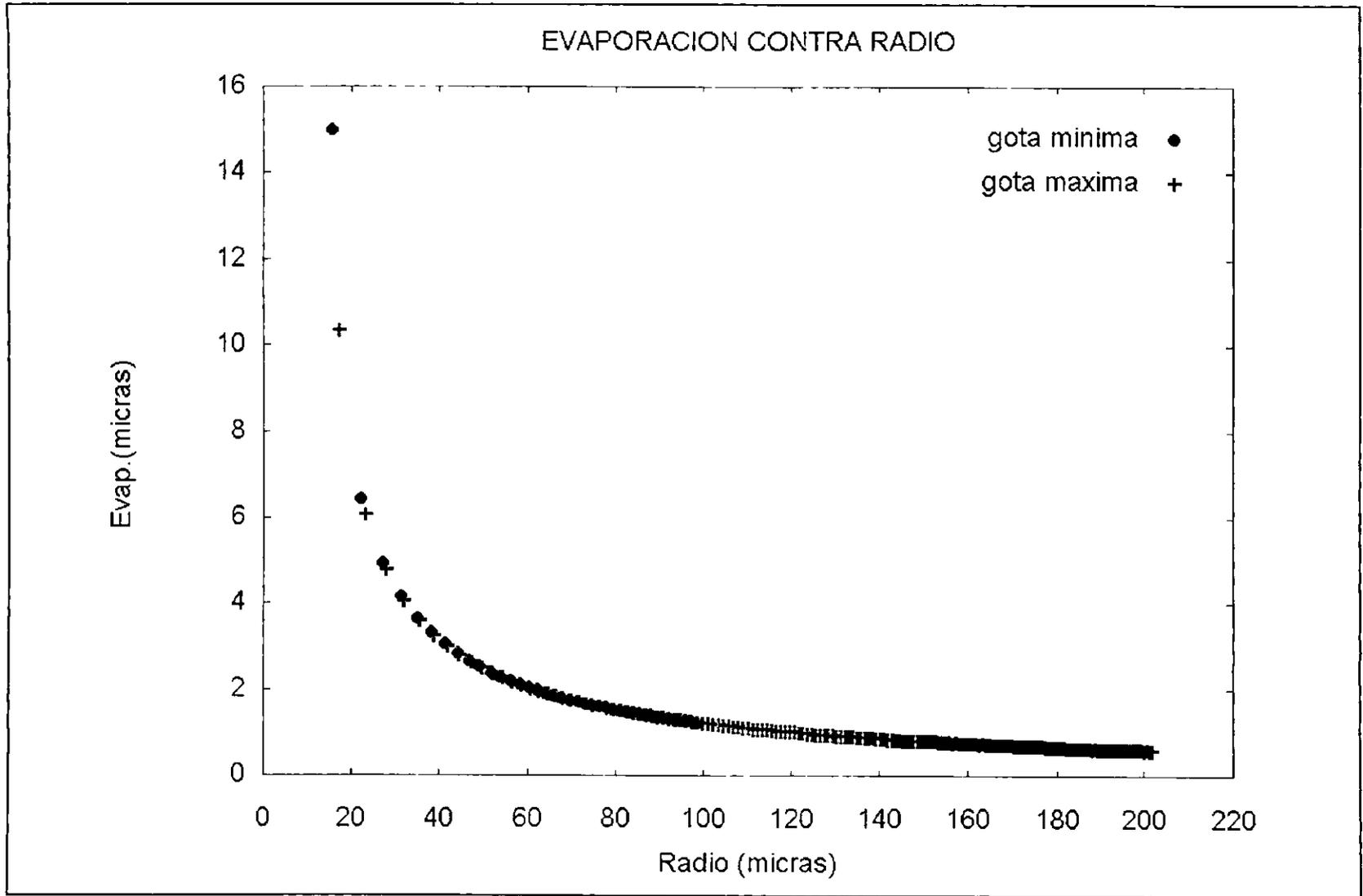


Figura 3.6 Evaporación contra radio de gota.

## 60 EVOLUCION DE LA MEZCLA AIRE-COMBUSTIBLE

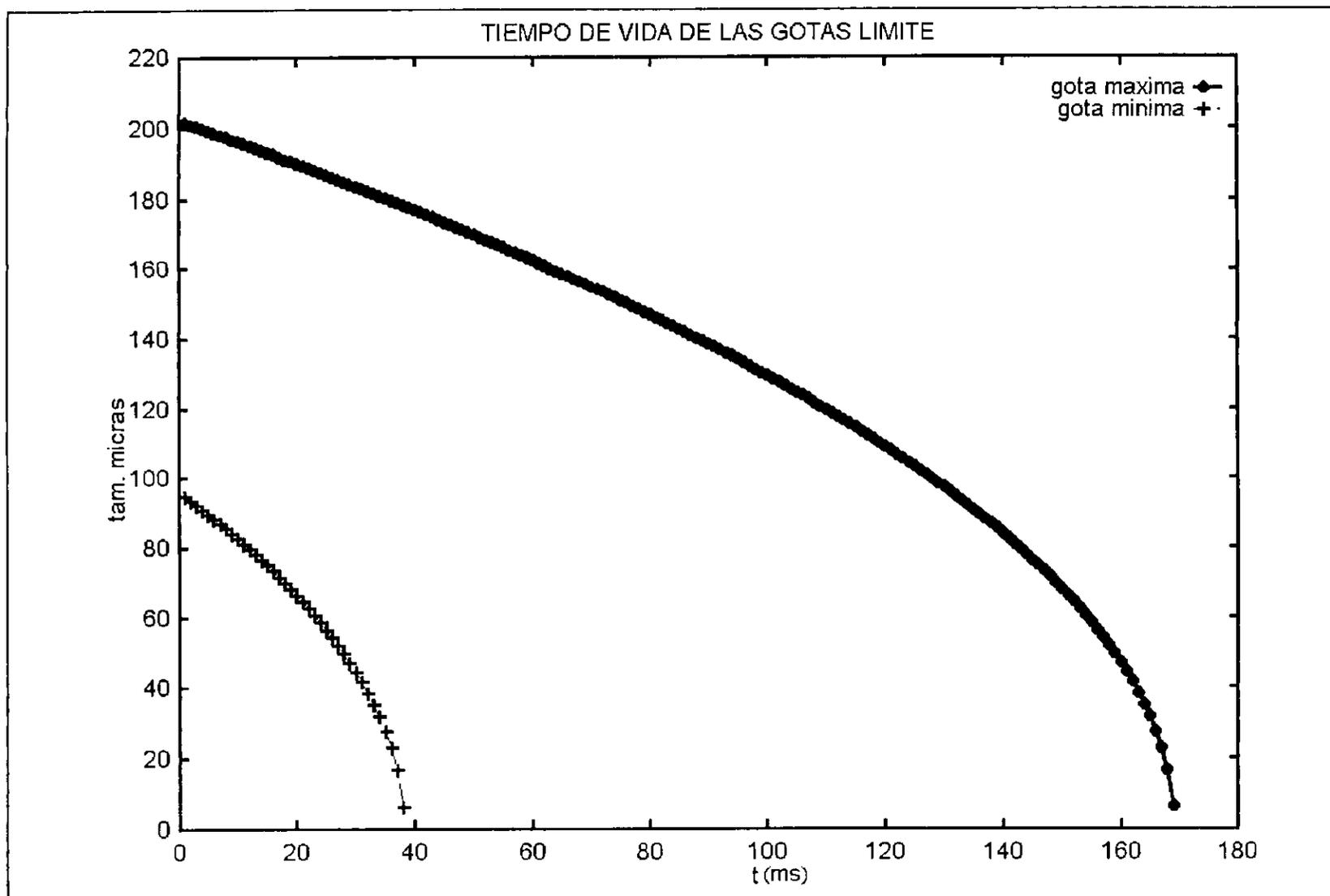


Figura 3.7 Tamaño de gotas contra tiempo (ms).

Únicamente sobrevivirán por una milésima de segundo mas (0.001 s), por lo tanto como se puede ver en la figura 3.7 el tiempo mínimo y máximo para la incorporación de las gotas al 'LHF', dependerá del tamaño de las gotas, la temperatura de la gota y del medio en que evoluciona el 'SPRAY'.

### **3.6 MODELACION DEL SPRAY.**

Una vez obtenido un algoritmo que genere 100 gotas cada milésima de segundo y acoplado el modelo de evaporación con esa misma diferencial de tiempo, se empieza a incrementar el número de gotas y el volumen de combustible líquido que esta siendo arrastrado en el fluido. Conforme el tiempo avanza, las gotas del primer grupo generado se van reduciendo de tamaño y después de un período de tiempo (dependiente de la temperaturas de la gota, el medio que rodea el SPRAY y las velocidad de movimiento del flujo, etc.), las gotas terminan por integrarse al fluido homogéneo (LHF) como combustible evaporado en el fluido gaseoso. Si se sigue el comportamiento de cada gota en cuanto a tamaño y velocidad se, tendrá algún tiempo, en el cual, tanto la cantidad de gotas como el volumen de combustible atomizado sea aproximadamente igual a la misma cantidad de líquido que se evapora y pasa al fluido, en este caso se llega a un estado pseudo-estacionario, el cual dependerá de la distribución de tamaños de gotas, de su velocidad y condiciones ambientales del fluido. Las figuras 3.8 y 3.9 muestran respectivamente las gráficas de la evolución del número de gotas y volumen de combustible en función del tiempo de evolución del SPRAY.

#### **3.6.1 CRITERIOS PARA DETERMINAR UN ESTADO PSEUDO-ESTACIONARIO.**

La evolución del SPRAY se considera en estado de pseudo-equilibrio cuando la cantidad de combustible que se atomiza es igual a la cantidad de combustible que se evapora. En la práctica es complicado determinar el estado pseudo-estacionario en función del tiempo, gasto de combustible, ángulo de atomización, flujo de aire, etc. Esto es lo que origina que por cada SPRAY se tenga un estado pseudo-estacionario diferente, para no depender de la observación subjetiva que le puede dar el usuario del sistema. En forma general, el modelo del SPRAY incluye un algoritmo que siempre llega al estado pseudo-estacionario mediante los siguientes criterios:

1.- Se define el medio en donde se generará y evolucionará el SPRAY, con ello se determina la temperatura del medio, el gasto y la velocidad del aire (LHF).

2.- Se crean 6 vectores de 100,000 posiciones para almacenar :

## 62 EVOLUCION DE LA MEZCLA AIRE-COMBUSTIBLE

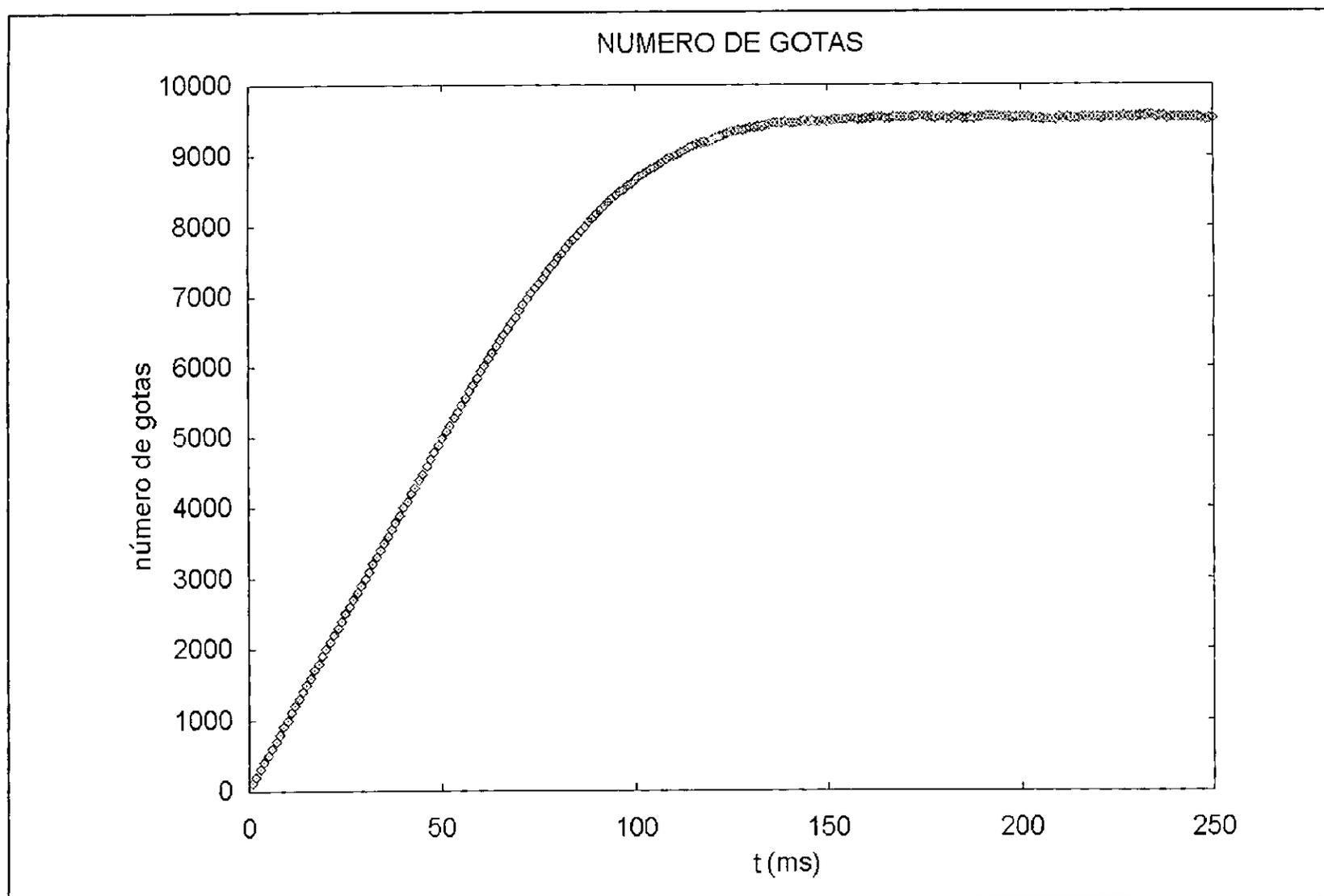


Figura 3.8 Número de gotas contra tiempo (ms).

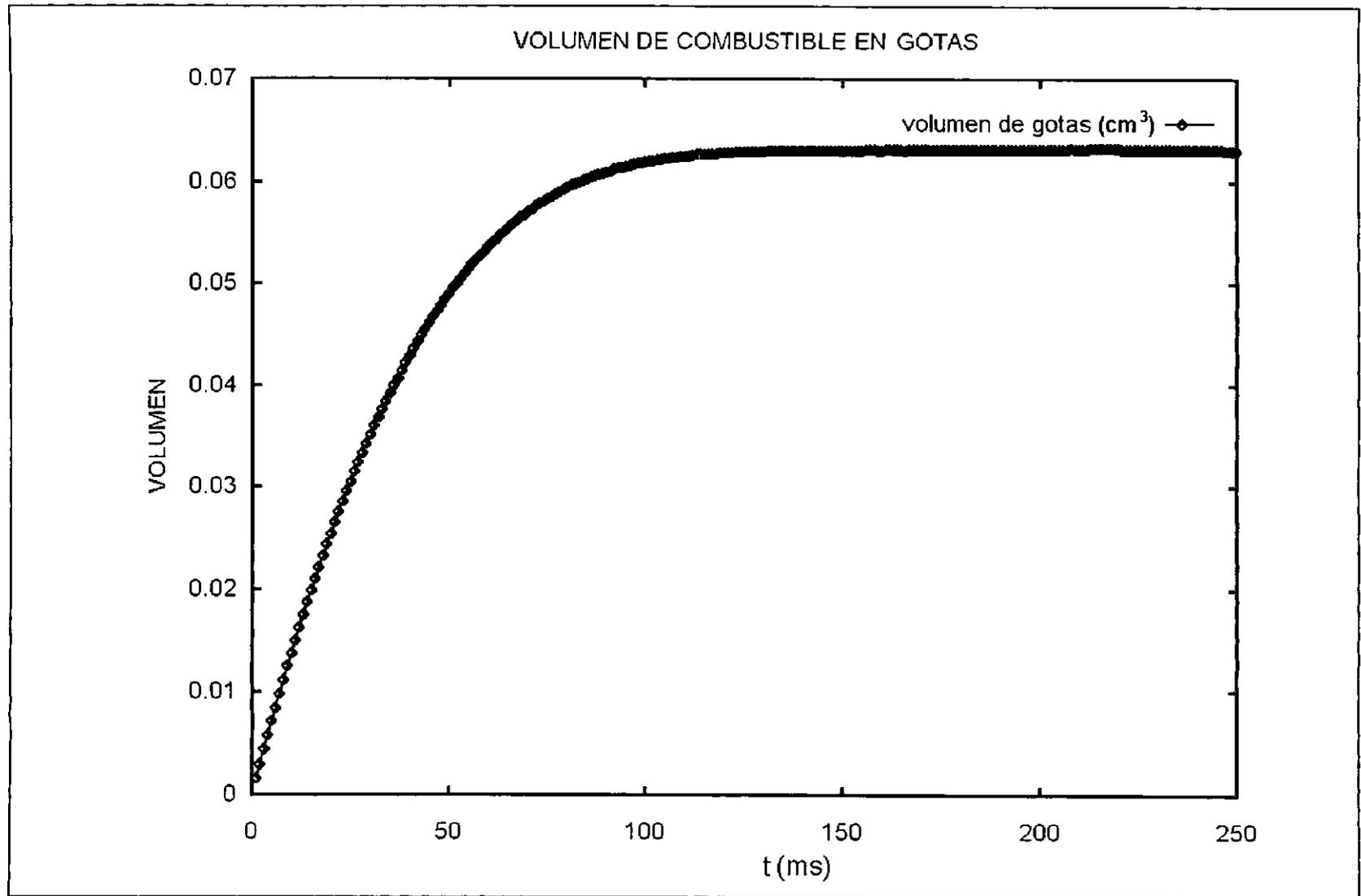


Figura 3.9 Volumen de gotas contra tiempo (ms).

## 64 EVOLUCION DE LA MEZCLA AIRE-COMBUSTIBLE

- a).- radio de gotas.
- b).- posición en la dirección x.
- c).- posición en la dirección y.
- d).- velocidad en la dirección x.
- e).- velocidad en la dirección y.

f).- temporal para optimización de los vectores anteriores, en caso de que el número de gotas pase de 100000, con esta variable se eliminan las gotas muertas o ya totalmente evaporadas e integradas al 'LHF', en los vectores de tamaño, posición y velocidad.

3.- Cada milésima de segundo se generan en forma aleatoria 100 gotas que cumplen con el rango de las distribuciones de tamaños y velocidades de gotas ya especificadas.

4.- Inclusión de las gotas generadas en los vectores principales, la adición se hace con número progresivo al final de los datos acumulados.

5.- Aplicando la diferencial de tiempo a cada elemento de los vectores de tamaño, posición y velocidad, así como a los datos del 'LHF', se obtienen los nuevos valores de radio, velocidad y posición en 2 dimensiones, para cada gota.

6.- Tomando como criterio que las gotas de radio menor a 15 micras pasan directamente a formar parte del LHF, se hace un recuento de las gotas a las que se les aplicará el nuevo ciclo de avance, a partir de esta información, para poder mediante los cálculos de la computadora determinar si ya se llegó al estado pseudo-estacionario, se utilizan arbitrariamente las siguientes posibilidades :

a).- Si las gotas que se evaporaron (se integraron al LHF), son menos de 85 o más de 115, el ciclo continua normal.

b).- Si las gotas evaporadas están entre 85 y 115, se incrementa un contador y se continua el ciclo generación- evaporación hasta que se tengan 50 eventos consecutivos en esas condiciones.

c).- Si el contador de eventos del inciso 'b' es diferente de cero y se tiene algún evento de entre 80 - 85 ó 115 - 120 gotas evaporadas, se resta la diferencia a 85 ó 120 del contador de eventos para no regresarlo a cero por una pequeña fluctuación, si esta operación da un número negativo el contador se regresa a cero.

7.- Por cuestiones de optimización computacional cada 500 eventos (ciclos generación avance) ó que los vectores tengan 99850 gotas acumuladas, se optimiza el espacio de los mismos, eliminando los datos (radio, posición y velocidad) de las gotas que ya se integraron totalmente al 'LHF'.

Una vez alcanzado el estado pseudo - estacionario se realiza un cambio en el sistema de observación (LAGRANGIANO a EULERIANO), para poder calcular las fracciones mezcla n-heptano - aire en cada celda, teniendo como referencia, el espacio discretizado del 'LHF' propuesto inicialmente, mediante un enmallado.

### 3.6.2 MALLA DE DISTRIBUCION.

Con el fin de analizar el estado pseudo-estacionario a que llega el modelo del SPRAY generado, se discretiza, por limitaciones del equipo de cómputo, utilizando el espacio del 'LHF' dividiendo arbitrariamente este en 10,000 celdas (100 divisiones en la dirección horizontal y 100 en la vertical). En la figura 4.4, cada rectángulo presentado representa 100 celdas, generando con ello la malla de elementos más pequeños que se pueden analizar en el sistema de computo de que se dispone. Una vez que se ha alcanzado el estado pseudo-estacionario, toda la información que tienen los vectores de posición se traslada a los elementos de esta malla (CAMBIO AL SISTEMA EULERIANO). Una vez que esto se ha efectuado, se conoce la concentración de combustible, la cantidad de aire, y si se considera que la mezcla aire-combustible es más rápida de  $1.0 \times 10^{-15}$  segundos, por lo cual podemos suponer que es instantánea y por otro lado si todas las reacciones químicas (combustión) que ocurren en esta mezcla se dan en un tiempo menor de  $1.0 \times 10^{-3}$  segundos que es el período de tiempo en que analizamos la evolución del spray, esto significa que se llega al EQUILIBRIO QUIMICO LOCAL.

Para calcular el Equilibrio Químico Local, se supone que la mezcla inicial de combustible-aire es estequiométrica y que su reacción se produce en una flama adiabática, de la cual se calcula a través de un balance entálpico la temperatura de cada uno de los elementos de la celda que se produzcan en la mezcla de combustible-aire; considerando que la temperatura inicial se propuso arbitrariamente, un nuevo valor se calcula en forma iterativa, o sea se regresa el proceso a la milésima de segundo anterior. Con las condiciones ya establecidas (en el estado pseudo-estacionario) y con la nueva temperatura, se recalcula la cantidad de líquido evaporado (evaporación), la distribución de tamaños y velocidad, y la posición en la malla de análisis; esto genera una nueva fracción mezcla, otro equilibrio químico local, una nueva temperatura adiabática, etc. Si se repite el ciclo evaporación-distribución-temperatura, se llegará a un valor único, que en este caso es el valor de temperatura final que tendrá cada celda, a partir de los valores finales de temperatura obtenemos los perfiles de temperatura y concentración de las especies de combustión del n-heptano - aire; para referir los resultados en términos del SPRAY, se determina por cada celda el SMD, tiempo de residencia de las gotas por celda, así como el tiempo de vida de las gotas.

### 3.6.3 DIAMETRO MEDIO SAUTER (SMD).

Para determinar las características del SPRAY en cada celda del sistema EULERIANO, se utiliza el diámetro medio Sauter SMD (41). De acuerdo con la

ecuación 3.1, el SMD, se calcula para cada celda de la malla propuesta.

### 3.6.4 TIEMPO DE RESIDENCIA (GOTAS, POR CELDA).

Se ha calculado el tiempo promedio de residencia ( $t_r$ ) de las gotas en un estado pseudo-estacionario por cada celda de la malla que se ha desarrollado para analizar la evolución, el tiempo se calcula en función de la velocidad en la dirección 'x' ( $v_x$ ) y de la posición que guarda cada gota en la celda, mediante la siguiente ecuación :

$$t_r = \frac{d_x}{v_x} \quad 3.38$$

En donde :

$t_r$  es el tiempo de residencia.

$d_x$  es la distancia en dirección 'x' hasta el limite de la celda actual.

$v_x$  es la velocidad en dirección 'x'.

### 3.6.5 TIEMPO DE VIDA DE LAS GOTAS.

El tiempo de vida de las gotas es proporcional al tamaño inicial de las mismas, como no son de tamaño uniforme y no se puede poner un limite arbitrario para considerar el volumen de gotas combustible que se integra a 'LHF', se aplica continuamente el modelo de evaporación mientras el tamaño de gota calculado tiene un valor positivo, de acuerdo con la ecuación 3.28 que ahora se expresará en función de los radios :

$$r_f = \left( r_0^2 - \frac{\lambda \Delta t}{4} \right)^{1/2} \quad 3.39$$

#### 4.- CINETICA QUIMICA DE LA MEZCLA AIRE - COMBUSTIBLE.

En este capítulo se describe la cinética química de la mezcla aire - combustible, se propone un grupo de especies y de reacciones químicas (mecanismo cinético) para estudiar la evolución del proceso de combustión de hidrocarburos mediante ecuaciones diferenciales ordinarias (EDO). Las EDO se integran con métodos de la literatura (30, 31) y se obtienen los resultados que se presentan al final del capítulo y en el APENDICE B.

El estudio de las velocidades de reacción y la dependencia con las variables que permiten su evaluación es lo que se conoce como cinética química (4, 20).

En forma general, una reacción química se representa como :



Siendo  $a$  y  $b$  los coeficientes de las especies reaccionantes  $A$  y  $B$  respectivamente, así como  $c$  y  $d$  los coeficientes de las especies  $C$  y  $D$  que se producen en la reacción.

Las variables que intervienen en la determinación de la velocidad de reacción química son : TEMPERATURA, PRESION, VOLUMEN y CONCENTRACION INICIAL DE REACTANTES.

En este trabajo, partiendo de una mezcla combustible-aire, se estudia la rapidez de cambio en la concentración de las especies involucradas en los mecanismos de reacción para la combustión de hidrocarburos a presión atmosférica y volumen constante.

Los Hidrocarburos (HC's) son compuestos químicos derivados del petróleo que se componen principalmente de Carbono 'C' e Hidrógeno 'H'. La cinética de reacción de los HC's al combinarse con un comburente (oxígeno/aire) incluye una gama de posibles reacciones cuando el HC cuenta con dos ó más Carbones. Al aumentar el número de Carbones, se incrementan las formas de disociación, oxidación, radicales, etc., ésto a su vez hace que el mecanismo de reacción sea más variado y complejo.

Existen en la literatura (20, 21, 23, 53, 61, 74, 75) varios mecanismos cinéticos globales de reacción que tratan de describir la combustión de hidrocarburos con oxígeno/aire, pero que básicamente solo describen los reactantes iniciales (no hay disociación, ni productos intermedios) y los productos finales más comunes : Monóxido de Carbono 'CO', Dióxido de Carbono 'CO<sub>2</sub>', radical Hidroxilo 'OH', etc. Un estudio que utilice mecanismos de reacción no globales debe de tomar en cuenta la existencia de otras especies o elementos químicos tales como el nitrógeno en combustible o en el aire, el azufre, etc., que pueden reaccionar ó catalizar algunas reacciones. La presencia de estos elementos adicionales, independientemente de las concentraciones y sus velocidades de reacción, hace

que se incremente la cantidad de reacciones posibles que forman parte de los mecanismos cinéticos de reacción que describen estos procesos.

En la literatura especializada existen mecanismos de reacción para una gran variedad de casos, en donde se hacen importantes tanto el tipo de combustible (12, 16, 56, 28, 71, 68, 51), como la forma de quemarlo, los aditivos y otros aspectos que son necesarios especificar antes de adoptar la cinética química correspondiente. Por esta razón los mecanismos varían por el tipo y cantidad de especies químicas y por el número de reacciones. Para conocer la evolución temporal de las concentraciones de las especies químicas, es necesario traducir el mecanismo particular en un sistema de Ecuaciones en Derivadas Ordinarias (EDO's) que representen la variación de cada especie química en función de la concentración del resto de las especies, la temperatura y el tiempo; este sistema se resuelve numéricamente, reduciendo el sistema a un problema de condiciones iniciales.

El diagrama de la figura 4.1 nos muestra que el proceso completo parte del conocimiento de las concentraciones de especies ( $Y_i$ ) reaccionantes en la MEZCLA GASEOSA, la combinación de éstas dan la cantidad de REACCIONES QUIMICAS POSIBLES, las cuales, junto con los coeficientes, concentración y constantes de velocidad de las reacciones nos permiten IDENTIFICAR EL MECANISMO cinético de reacción y GENERAR la ecuación diferencial ordinaria y las relaciones de cada especie en las reacciones involucradas. Si se tienen fijadas las condiciones de ESPECIES QUIMICAS, TIEMPO y las variables de DINAMICA DE FLUIDOS, se INTEGRAN las EDO's y se tienen los resultados finales, los cuales se pueden observar en las figuras 4.2 - 4.10 y en el apéndice C.

Se considera que las velocidades de reacción química son lo suficientemente rápidas, para que las concentraciones de reactantes-productos en cualquier momento estén en equilibrio y poder suponer que el fluido es localmente homogéneo.

Si se tiene un sistema de ' $n_e$ ' especies, entre los cuales puede haber ' $n_r$ ' posibles reacciones, para expresar el cambio de masa de un componente 'A' en un volumen se tiene :

$$\int^V \frac{\partial \rho_A}{\partial t} dV = \frac{d}{dt} \int^V \rho_A dV \quad 4.1$$

La cantidad del componente 'A' es igual a la suma del mismo que fluye a un elemento de volumen ( $V$ ) a través de su superficie  $\Omega$ , más el total de producción de 'A' dentro del mismo elemento de volumen, de acuerdo al principio de conservación de masa :

$$\int \frac{\partial \rho_A}{\partial t} dV = - \int \rho_A \vec{v}_A \cdot d\vec{\Omega} + \sum_{i=1}^{n_r} \int v_{Ai} J_i dV \quad 4.2$$

Donde  $J_i$  denota la rapidez de cambio de masa en la reacción 'i' por unidad de volumen,  $v_{Aj}$  es el coeficiente estequiométrico de A en la reacción 'j', lo cual junto con la densidad  $\rho_A$  y la velocidad  $\vec{v}_A$  del elemento 'A' son funciones del tiempo y de las coordenadas espaciales.

Aplicando el teorema de Gauss a la integral de superficie (15) de la ecuación 4.2, se obtiene la ecuación 4.3 de "conservación de masa" que es la misma que la ecuación 2.1 pero incluyen las 'n<sub>r</sub>' posibles reacciones químicas como término fuente.

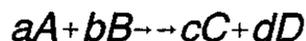
$$\frac{\partial \rho_A}{\partial t} = -\nabla \cdot (\vec{v}_A \rho_A) + \sum_{i=1}^{n_r} v_{Ai} J_i \quad (A=1,2,\dots,n_e). \quad 4.3$$

Como la masa se conserva en cada reacción química por separado:

$$\sum_{A=1}^{n_e} v_{Ai} = 0, \quad (i=1,2,\dots,n_r).$$

Si sumamos las ecuaciones 4.3, una para cada componente químico, sin importar el número de reacciones que se presenten como término fuente en la ecuación 4.3, este término siempre se anula obteniéndose ecuación 2.1 de conservación de masa.

Si para definir las constantes de velocidad de reacción, se considera que la reacción química solo cuenta con dos reactantes, los cuales a su vez originan dos productos y no hay reaccionan inversa :



La velocidad de reacción para el componente 'A' se calcula así:

$$\frac{d[A]}{dt} = -k[A]^a[B]^b \quad 4.4$$

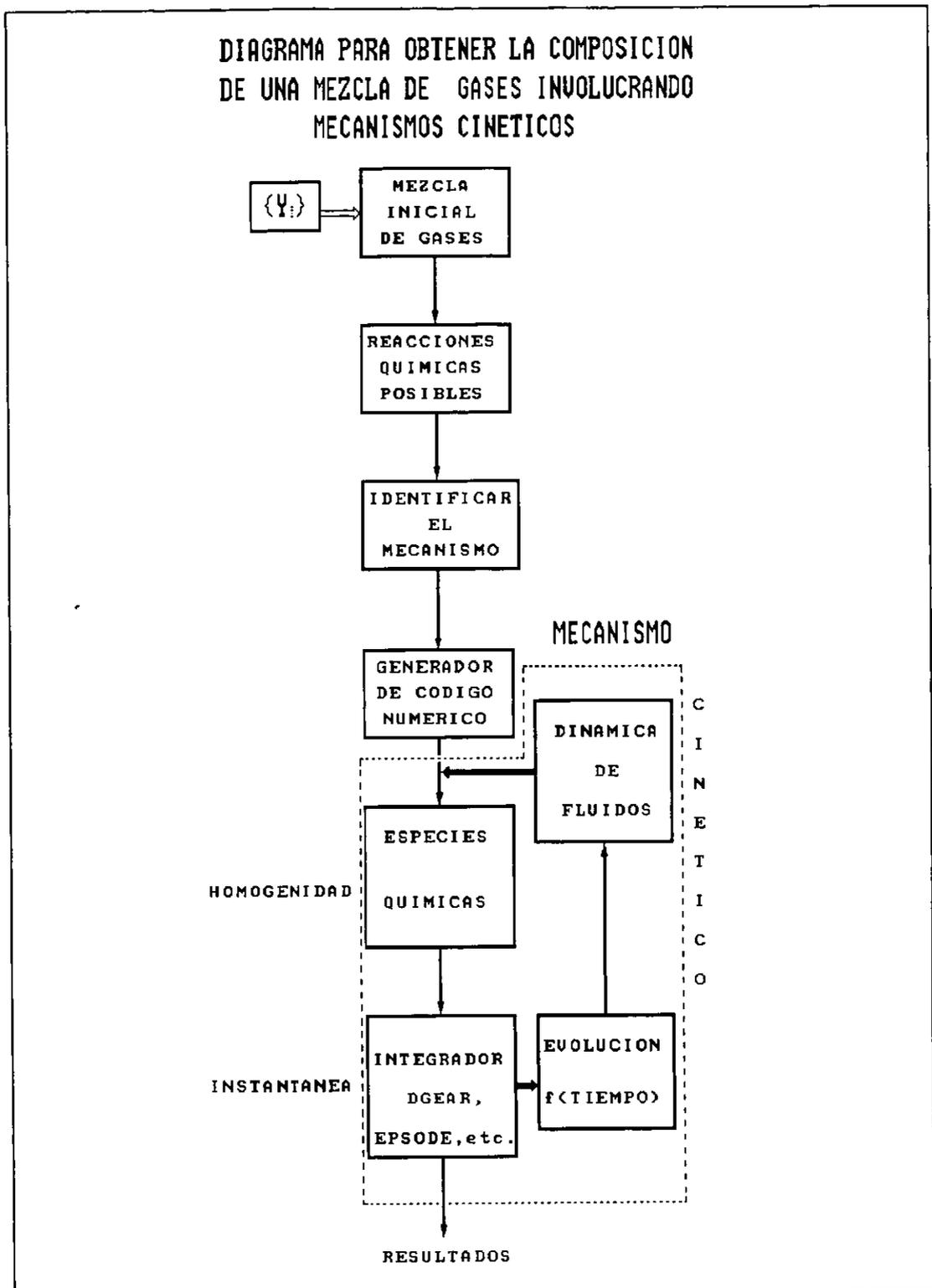


Figura 3.1 Diagrama general para obtener el Equilibrio Químico Local.

Se considera que para llegar al equilibrio químico de una mezcla hidrocarburo-aire, se necesitan "típicamente más de 100 reacciones para describir un proceso de combustión de Hidrocarburos (12, 16)", la diferencia entre mecanismos cinéticos de reacción se debe al número de reactantes y reacciones. Como entre los reactantes se pueden incluir algunos elementos indeseables (impurezas), el número de reacciones químicas se incrementa considerablemente; también se modifica la velocidad de las reacciones y la estabilidad de los productos finales.

Si al estudio de reacciones elementales que pueden llevarse a cabo entre un grupo de reactantes, se le especifican ciertas condiciones y formatos, siempre que se apliquen estas condiciones y formatos al mismo grupo de reactantes se obtendrán idéntico número de reacciones, productos, intervalos de tiempo en que se considera alcanzado el equilibrio químico (23), temperaturas, estabilidad de los compuestos, etc., a esta información se le denomina MECANISMO CINETICO DE REACCION (14, 21).

#### 4.1 Mecanismos cinéticos de reacción para hidrocarburos.

Si tomamos solo los HC de tipo parafinico (ALKANOS), cuya importancia puede observarse en la cantidad de estudios que se han realizado entre los que destacan :

Combustión de metano (12, 16, 56, 71, 68).

Combustión de etano, propano, butano (68).

Combustión de propano y pentano (18).

Combustión de n-heptano (51).

Se Puede observar en las referencias anteriormente enumeradas que la cantidad y complejidad de las reacciones de los mecanismos cinéticos para ALKANOS, se incrementa con la cantidad de carbonos que contiene el hidrocarburo en cuestión. Se ha podido encontrar al estudiar los mecanismos de reacción anteriores, que el mecanismo de reacción del hidrocarburo más complejo (mayor número de carbonos) contiene entre sus reacciones a los mecanismos de hidrocarburos con menor número de carbonos (9, 23). Una explicación que justifica este proceso, es que los elementos químicos reactantes (C, H<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>) de cualquier mezcla de Hidrocarburo-Aire, siempre serán los mismos (en diferentes proporciones) y tendrán idénticas reacciones y reactantes intermedios en la combustión así como igualdad en los productos finales.

En forma general, para modelar numéricamente un sistema de combustión (61) de hidrocarburos con aire, se considera una mezcla gaseosa homogénea (45) con un número de especies ó componentes (n<sub>e</sub>), en el que pueden ocurrir un número de reacciones (n<sub>r</sub>), la representación de todas las posibles reacciones químicas se expresa como :

$$\sum_{k=1}^{n_e} v'_{ki} \chi_k = \sum_{k=1}^{n_e} v''_{ki} \chi_k \quad (i=1, \dots, N_r).$$

Donde  $v'_{ki}$  y  $v''_{ki}$  son los coeficientes estequiométricos de la componente  $k$  en la  $i$ -ésima reacción y  $\chi_k$  denota el nombre de la especie involucrada.

#### 4.2 Representación numérica de la cinética química.

En esta sección se trata de dar un tratamiento cinético a los mecanismos de reacción propuestos para la simulación de combustión de los HC. Ciertamente existen en la literatura una gran cantidad de estudios (9, 12, 16, 23, 45, 56, 28, 71, 68, 18, 51) sobre el tema que difieren principalmente en el grado de detalle que se desea. Difieren también en la sensibilidad y en el volumen de información que necesitan.

Cualquiera que sea el mecanismo a tratar, para estudiar numéricamente la cinética química y su interacción correspondiente, se inicia con la traducción de las reacciones y especies del mecanismo cinético de reacción a un conjunto de ecuaciones en derivadas ordinarias (EDO), que en general resultan no lineales. La evolución temporal de cada especie química que participe en el mecanismo de reacción está representada por la integración de las ecuaciones diferenciales ordinarias (EDO) de ese conjunto.

Para construir el conjunto de ecuaciones diferenciales, primeramente se identifican y ordenan de acuerdo a la concentración de las especies químicas participantes en el mecanismo. Denotando como  $Y[i]$  a la concentración de la especie ' $i$ '. El mecanismo cinético de reacción es :

$$\sum_{i=1}^{n_e} N(i,j) Y[i] = \sum_{k=1}^{n_e} M(k,j) Y[k], \quad j=1,2,\dots,n_r$$

Donde:

$N(i,j)$  y  $M(k,j)$  son coeficientes estequiométricos de la especie  $i$  en la reacción  $j$ , para los reactivos y productos respectivamente.

La evolución temporal de las especies se expresan de la manera siguiente :

$$\frac{dY[i]}{dt} = \sum_{j=1}^{n_r} [M(i,j) - N(i,j)]R(j) \quad 4.5$$

$$R(j) = \prod_{i=1}^{n_e} K(j)[Y[i]]^{M(i,j)} \quad 4.6$$

En donde :

R(j) Es la velocidad de cambio de la reacción j.

K(j) es la constante de velocidad de reacción de la reacción j.

El siguiente paso es resolver numéricamente el mecanismo cinético de reacción, para lo cual se integra simultáneamente el conjunto de ecuaciones diferenciales ordinarias (una para cada especie) desde un tiempo t en donde se inicia la mezcla hasta t + Δt en donde se llega al equilibrio de los productos de reacción finales. Para ello se deben proporcionar los valores iniciales de las concentraciones al tiempo t.

Para propósitos de modelación numérica de mecanismos cinéticos de reacción, se tomó el algoritmo GENCOD desarrollado por Varela et al en 1993 (70), con este algoritmo se pueden "escribir" en un archivo ASCII las especies, reacciones químicas y características que determinan un mecanismo cinético de reacción el cual mediante un programa de cómputo genera el código correspondiente en lenguaje FORTRAN. El código generado contiene las subrutinas CONSTS para el cálculo de las constantes de velocidad de reacción, RATES para calcular las variaciones de concentración de las especies químicas, DIFFUN que contiene las EDO asociadas a un mecanismo dado y PEDERV que contiene el JACOBIANO que calcula la variación en la concentración de especies en función del tiempo.

El listado de especies, reacciones químicas y constantes de velocidad de reacción, debe ser escrito en el formato alfanumérico adecuado y el mecanismo debe proporcionarse en forma de claves (70).

### 4.3 Métodos de solución de EDO.

Las ecuaciones diferenciales ordinarias (EDO) no lineales que representan cada una de las especies químicas del mecanismo de reacción están acopladas, la solución de estas EDO para unas condiciones de concentración, temperatura y presión consiste en un procedimiento de integración numérica (11) del que

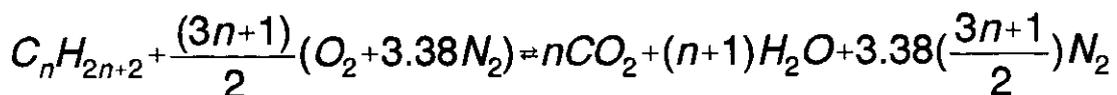
existe en la literatura una gran cantidad de métodos, entre los que destacan los métodos de EULER, RUNGE KUTTA, ADAMS-MOULTON, etc.. El problema particular de los mecanismos cinéticos de reacción estriba en que las concentraciones de las diferentes especies varían hasta en 10 ordenes de magnitud, por lo cual se presentan problemas de convergencia hacia la solución numérica de las EDO que representan el mecanismo cinético de reacción.

Buscando la solución numérica de EDO con diferentes ordenes de magnitud, WILLIWM GEAR (22) empezó a caracterizar EDO con problemas de precisión y convergencia, a los cuales denominó 'sistemas con rigidez' (22), posteriormente HINDMARSH (29) desarrolló el método 'GEAR', que cuenta con un algoritmo que le permite ajustar el tamaño del paso de integración con respecto a la precisión, así como reinicializar el mismo problema si el paso de integración no cumple con los criterios de tolerancia y convergencia establecidos. El método GEAR (29) ya se encuentra programado en FORTRAN (subrutinas EPSODE, EPISODE (30, 31), etc.), por lo cual utilizando estas herramientas con las condiciones límite de un problema específico, podemos resolver numéricamente las EDO del mecanismo cinético de reacción.

La base de este trabajo son las herramientas que se han desarrollado para el planteamiento de las EDO a partir de los mecanismos cinéticos de reacción, para lo cual se participó con Varela et al. en el desarrollo de la herramienta 'GENCOD (70)' que tiene como parte central la traducción del mecanismo cinético de reacción en subrutinas de programa FORTRAN, el código generado se une a las subrutinas 'EPISODE (31)' del trabajo de HIDMARSH (31), por otro lado una vez obtenidos los códigos en FORTRAN de los mecanismos cinéticos de reacción, en su la evolución espacio temporal (integración) del grupo de EDO's, se participó en diferentes trabajos relacionados con la cinética química, el equilibrio químico local, la fotoquímica y la contaminación ambiental (70, 46, 50, 67).

#### 4.4 Planteamiento del problema.

Tomando como combustible cualquier hidrocarburo (Alcano) con una fórmula general :  $C_nH_{2n+2}$ , que en la combustión total o completa, de una mezcla estequiométrica combustible-aire nos da la siguiente reacción :



A partir de los pesos moleculares de los elementos reactantes: C 'carbono' 12 um, H 'hidrógeno' 1 um, O<sub>2</sub> 'oxígeno' 32 um, N<sub>2</sub> 'nitrógeno' 28 um y substituyendo los pesos moleculares del hidrocarburo y el aire, la cantidad de

reactantes - productos para la combustión queda como una función del número de carbonos 'n'(s) de la forma siguiente :

$$\text{Peso de Reactantes } 12n + 2(n + 1) + 32[(3n + 1)/2] + 28[3.38(3n + 1)/2]$$

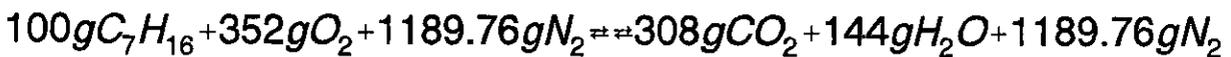
$$\text{Peso de Productos } 44n + 18(n + 1) + 28[3.38(3n + 1)/2]$$

$$\text{De donde se obtiene : Peso de reactantes} = 203.80n + 65.2666$$

Y, por lo tanto, el porcentaje en peso de cualquier ALKANO como reactante en una combustión estequiométrica será :

$$\% \text{Reactantes (HC)} = 100(14n + 2)/(203.80n + 65.2666)$$

De acuerdo con el desarrollo anterior si el hidrocarburo utilizado es el n-heptano (C<sub>7</sub>H<sub>16</sub>), el número de carbonos 'n' es igual '7', y la ecuación general queda como :



$$\% \text{Reactantes (HC)} = 100(14(7) + 2)/(203.80(7) + 65.2666) = 6.703\%$$

Una mezcla de Metano - aire (n=1) calculada da un %reactantes (HC) = 5.95%, que es similar al 5.5% usado por CHEN et al (12) en su trabajo en el que supone pesos moleculares iguales para todas las especies de su mecanismo global.

Como puede observarse, al calcular el % en peso de reactantes que significa el peso de hidrocarburos resulta una progresión y cuando 'n' tiende a infinito el porcentaje es de 6.8694 %, lo cual significa que cualquier ALKANO, al quemarlo con aire, deberá de tener un % en peso de reactantes entre 7.0 y 5.0%, para estar cerca de la razón estequiométrica.

Como el concepto de por ciento peso de reactantes no es muy común en este tipo de trabajos, se utilizará el concepto de fracción mezcla, la cual se puede expresar como :

$$f_m = \frac{\text{peso}_{comb}}{\text{peso}_{comb} + \text{peso}_{aire}}$$

Para una mezcla combustible - aire, cuya base de cálculo sean 100 gramos, la fracción mezcla  $f_m$  siempre será igual al porcentaje en peso de combustible.

En el desarrollo de este trabajo se tomó de la literatura el mecanismo cinético de reacción para 'n-heptano' propuesto por HAMID SARV et al. (51), el cual consta de 34 especies más nitrógeno que no reacciona, y solo se incluye en algunas de las reacciones como elemento que puede con su presencia modificar la velocidad de reacción (tercer cuerpo). Este mecanismo cinético de reacción representa la combustión de n-heptano con aire mediante 111 reacciones; las

## 76 CINÉTICA QUÍMICA DE LA MEZCLA AIRE - COMBUSTIBLE

especies, reacciones y constantes de velocidad de reacción se pueden ver en el APENDICE B.

Tomando una base de cálculo que sea fácilmente escalable se decidió hacer los cálculos con 100 grs. de mezcla combustible-aire a presión y volumen constantes, iniciando con 0 gramos de n-heptano y utilizando variaciones de 1 g entre 0 y 70 g; como los tiempos de cálculo para el intervalo de 50 a 70 g se incrementaron a más de 24 horas, se modificaron los incrementos a cada 10 gramos de combustible hasta llegar a tener únicamente 100 g de n-heptano, los valores intermedios se obtuvieron por interpolación. La mezcla se considera totalmente en fase gaseosa para cualquier combinación aire-combustible y como ecuación de estado usamos la ecuación general de los gases ideales con la cual se obtuvo la concentración de las especies reactantes.

Interactivamente se pide la fracción mezcla de n-heptano, como la base de cálculo son 100 g y la composición en peso del aire es de 79% de nitrógeno y 21 % de oxígeno, los moles de n-heptano, oxígeno y nitrógeno se calculan así :

$$n_{n\text{-heptano}} = f_m * 100. / PM_{n\text{-heptano}}$$

$$n_{N_2} = 0.79 * (100. - f_{mezcla} * 100.) / 28.$$

$$n_{O_2} = 0.21 * (100. - f_{mezcla} * 100.) / 32.$$

Como el peso molecular del n-heptano es igual a 100.

$$n_{n\text{-heptano}} = f_m$$

El número total de moles es :

$$n_{total} = n_{n\text{-heptano}} + n_{N_2} + n_{O_2}$$

Suponiendo que los reactantes están a las condiciones adecuadas, por lo cual las reacciones químicas de la mezcla n-heptano - aire se dan en forma inmediata, para obtener el valor de temperatura que tienen los productos de combustión y la mezcla n-heptano - aire remanente, se supone que el proceso se desarrolla en forma adiabática y así determinar los cambios de entalpía que se dan en el mismo. Las ecuaciones, condiciones, figuras y comparaciones para obtener la temperatura adiabática se encuentran en el APENDICE C.

Considerando que las reacciones se llevan a presión constante de 1

atmósfera, el volumen y la densidad de la mezcla son:

$$\text{Volumen} = \frac{82.05 n_{total} Temp}{1} \quad \text{en}(cm^3)$$

$$\text{Densidad} = \frac{100000}{\text{Volumen}} \quad \text{en}(g/l)$$

El cálculo de los tiempos de reacción para cada fracción mezcla se obtiene en una forma no analítica, de acuerdo con las velocidades de reacción en combustión. Para integrar las Ecuaciones Diferenciales Ordinarias (EDO) se toma un pequeño incremento de tiempo de  $1 \times 10^{-15}$  segundos, el cual es totalmente arbitrario. A partir de este intervalo de tiempo se integran las EDO, con lo cual se obtienen las concentraciones de las 34 especies del mecanismo cinético de reacción y el nitrógeno como tercer cuerpo. A partir de estas concentraciones y las constantes de velocidad de reacción, se calculan los tiempos de reacción  $t_r$ , considerando que con esa concentración la reacción fuera única y con de orden reacción '0' o '1' de acuerdo con BENSON (4) :

$$t_{f,0} = -\frac{1}{k} \ln(1-f) \quad 4.7$$

$$t_{f,1} = \frac{1}{kA_0} \frac{f}{1-f} \quad 4.8$$

En donde 'f' es la fracción que se ha completado de la reacción química. Como aproximación numérica se considera totalmente efectuada la reacción cuando  $f = 0.9999$ , por lo cual las ecuaciones 4.7 y 4.8 en forma numérica quedan como :

$$t_{0.9999,0} = \frac{16}{k}$$

$$t_{0.9999,1} = \frac{99990}{kA_0}$$

## 78 CINETICA QUIMICA DE LA MEZCLA AIRE - COMBUSTIBLE

En el APENDICE B, se pueden observar las variaciones de concentración contra el tiempo para las  $f_m$  de n-heptano : 0.04, 0.06 y 0.08.

Las concentraciones de los reactantes en moléculas/cm<sup>3</sup>-s son:

$$Y_{\text{Heptano}} = \frac{6.022 \times 10^{23} n_{\text{Heptano}}}{\text{Volumen}}$$

$$Y_{\text{O}_2} = \frac{6.022 \times 10^{23} n_{\text{O}_2}}{\text{Volumen}}$$

$$Y_{\text{N}_2} = \frac{6.022 \times 10^{23} n_{\text{N}_2}}{\text{Volumen}}$$

Los diagramas de cambio de concentración para las fracciones mezcla : 0.04, 0.06 y 0.08, se muestran en el APENDICE B, observando estos diagramas se ve que las concentraciones de las especies reactantes disminuyen rápidamente en tiempos cercanos a  $1.0 \times 10^{-3}$  segundos, como en esta implementación no se tiene control del tiempo, porque el paso de integración y los intervalos del tiempo los fija el método de 'GEAR' desarrollado por HINDMARSH (31), se propone como criterio de equilibrio o terminación del proceso de integración el valor de  $1.0 \times 10^{-10}$  moléculas-cm<sup>3</sup>/s en la concentración de cualquiera de los reactantes principales : n-heptano u oxígeno.

Si se realizan los cálculos de % en peso de reactantes o la fracción mezcla de n-Heptano - aire, de acuerdo con la reacción general de un Alcano con aire se tiene que : mientras la  $f_m$  sea menor de 0.06703, habrá exceso de aire y en caso contrario el combustible tendrá mayor presencia.

### 4.5 Resultados.

Con el problema planteado y las suposiciones hechas, se resolvió el sistema de EDO que representan el mecanismo cinético de reacción, para cada una de las combinaciones de n-heptano - aire, como ejemplo de los cálculos realizados y el análisis que se realizó se encontrará en el APENDICE B los valores de las constantes de reacción para una fracción mezcla de n-heptano - aire de 0.06, así como los tiempos de reacción calculados a partir de las concentraciones obtenidas al integrar el mecanismo cinético de reacción durante  $1 \times 10^{-06}$  s.

Adicionalmente se pueden observar en el APENDICE B, las figuras de tiempo contra concentración para las fracciones mezcla de n-heptano - aire : 0.04, 0.06 y 0.08, así como los diagramas de cambio de concentración para las mismas fracciones mezcla.

En las figuras 4.2 y 4.3 se compendian los cálculos que se hacen del mecanismo cinético de reacción, mostrando la fracción masa (concentraciones en % en peso) de las especies mencionadas contra la fracción mezcla.

Los resultados del mecanismo cinético de reacción para n-heptano -aire (figuras 4.2 y 4.3), se pueden comparar con los presentados por FAETH et al (18), para los mecanismos cinéticos de reacción de pentano (figura 4.4) y n-propano (figura 4.5). Si se consideran las fracciones mezcla para los tres diferentes hidrocarburos, se puede observar que el área de interés para los procesos de combustión se encuentra en fracciones mezcla menores a 0.2.

Las diferencias esenciales entre el mecanismo utilizado en este trabajo y los reportados por Faeth et. al. (18), se encuentran en que el mecanismo de reacción para n-Heptano de este trabajo incluye adicionalmente 23 especies combustibles (VER APENDICE B, especies 3 - 25) que con sus concentraciones y velocidades de reacción, presentará diferentes resultados en las emisiones de gases de combustión. En la figura 4.2, se encuentran graficadas las especies:  $N_2$ ,  $O_2$ , COMBUSTIBLE (se incluyen todas las especies que todavía tienen carbono que se pueda oxidar, excepto monóxido de carbono 'CO'),  $CO_2$ , CO,  $H_2O$  y  $H_2$ , en la figura 4.3 se muestra una ampliación de la sección inferior izquierda de la figura 4.2 en donde se puede observar más claramente el punto donde el oxígeno se agota e inicia la presencia del combustible. Es en esta composición donde la mezcla es estequiométrica.

La variación de las concentraciones en g/l de las especies como una función del tiempo, se presentan en la figura 4.6 para una mezcla con exceso de aire. La mezcla estequiométrica se presenta en la figura 4.7, y la mezcla con exceso de combustible se encuentra en la figura 4.8.

Utilizando las ecuaciones 4.7 y 4.8 se calcula el tiempo en que se agotarían los reactantes ( $f = 0.99$ ), después de haber dejado que estos reaccionen durante  $1 \times 10^{-15}$  s. Esto se calcula a partir de las constantes de velocidad de reacción (orden '0' o '1') y las temperaturas, los diagramas y tablas que obtienen para cada fracción mezcla se presentan en el APENDICE B. Para considerar numericamente terminada una reacción se aplica el criterio propuesto en la sección 4.4 (concentración del reactante en defecto menor a  $1.0 \times 10^{-10}$  moléculas-cm<sup>3</sup>/s), se supone en estas condiciones que se da el Equilibrio Químico Local (EQL), la figura 4.9 presenta los tiempos en que se llegó al (EQL), los saltos en la curvatura se deben a que hay variaciones en los pasos de integración que utiliza el integrador usado (31).

Finalmente se puede observar en la figura 4.10 la variación de la densidad

## 80 CINETICA QUIMICA DE LA MEZCLA AIRE - COMBUSTIBLE

(g/l) como una función de la fracción de mezcla.

La figura 4.2 compendia los resultados del estudio cinético de combustión de n-heptano - aire, obteniendo resultados similares a los que obtienen Faeth et al (18) para la combustión de propano y pentano con aire. Las figuras en donde varían la concentración o la fracción mezcla contra el tiempo o la densidad, complementan los resultados del estudio cinético y nos permite crear una base de datos para asociar las fracciones mezcla con las concentraciones.

El trabajo desarrollado contiene información y métodos que no existen en el trabajo científico del país y del que hay poco desarrollo a nivel internacional, ya que normalmente se está trabajando en formas alternativas como lo son los mecanismos de reacción globales.

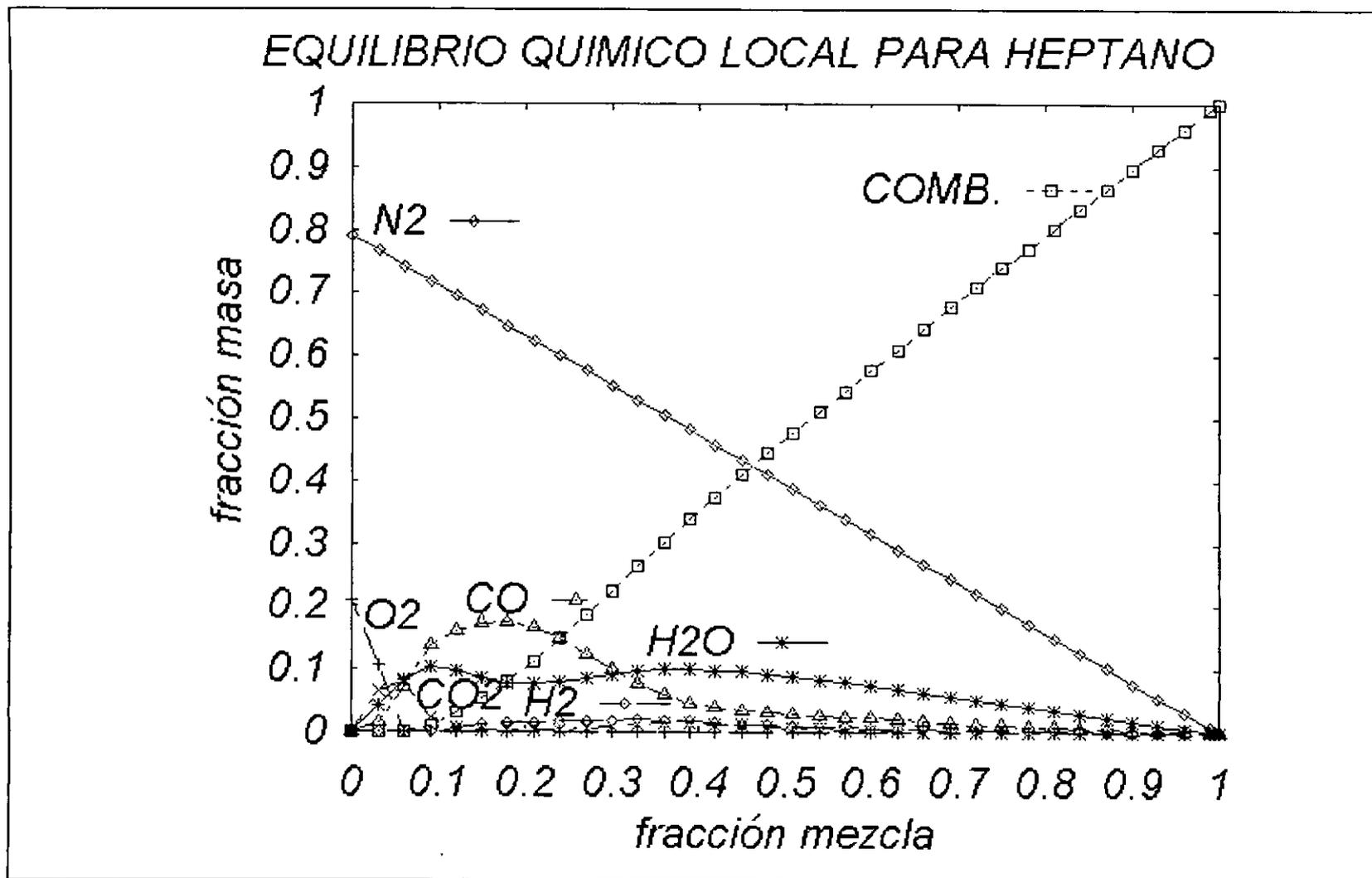


Figura 4.2 Fracción masa de los productos de combustión de n-Heptano con aire en función de la fracción mezcla.

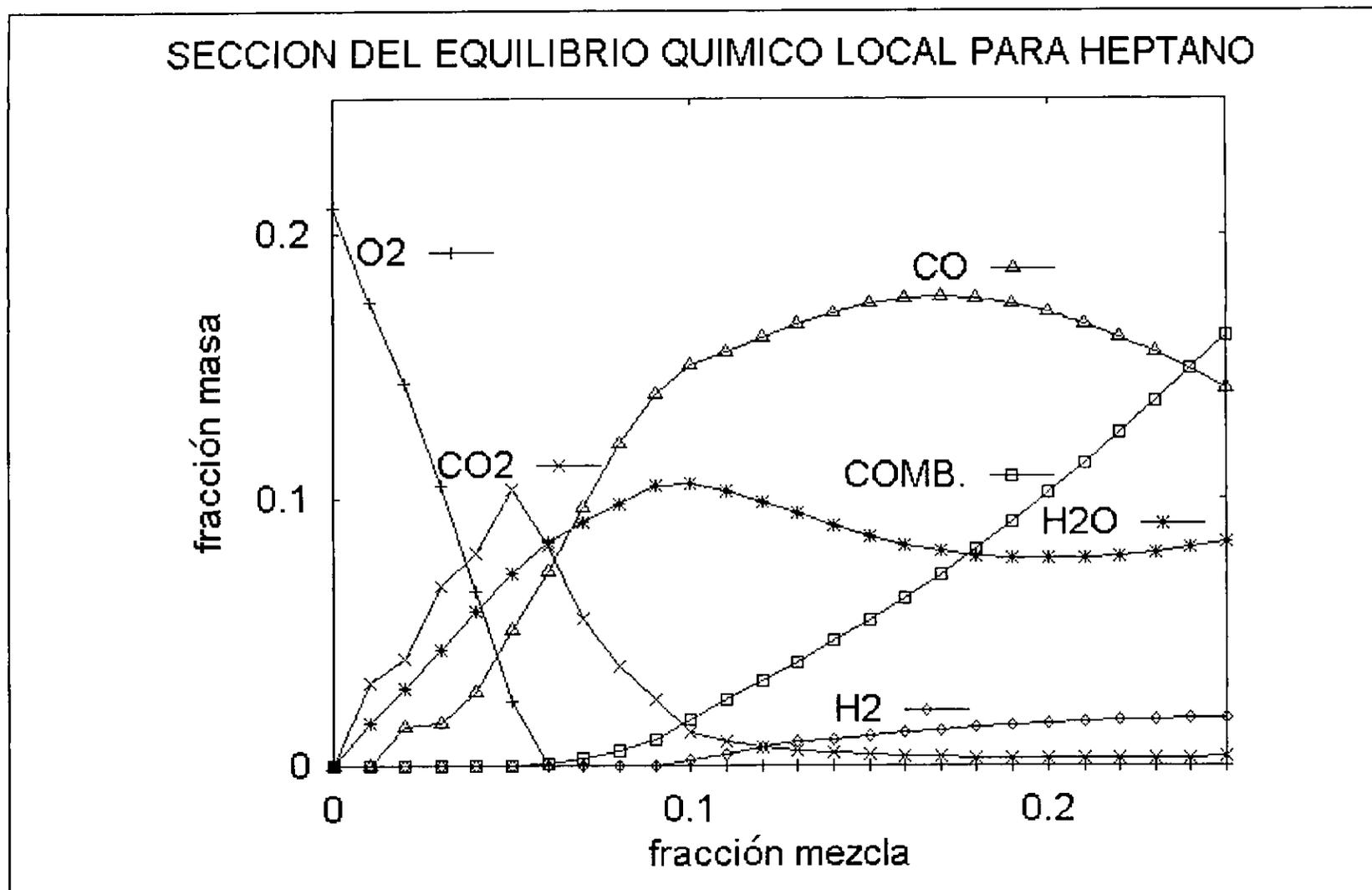


Figura 4.3 Acercamiento de la gráfica de Fracción masa de los productos de combustión de n-Heptano con aire en función de la fracción mezcla.

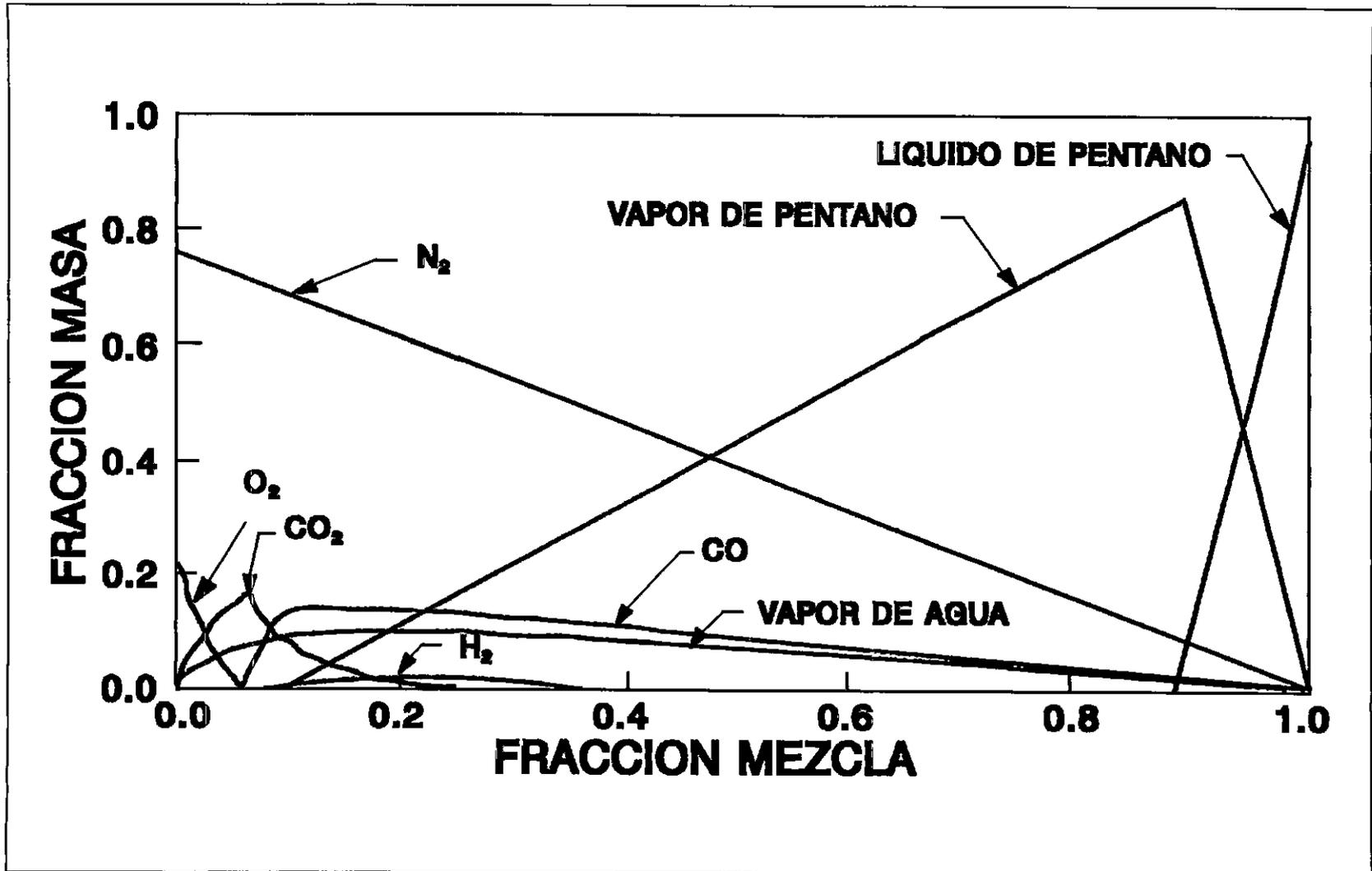


Figura 4.4 Fracción masa de los productos de combustión de n-Pentano con aire en función de la fracción mezcla (18).

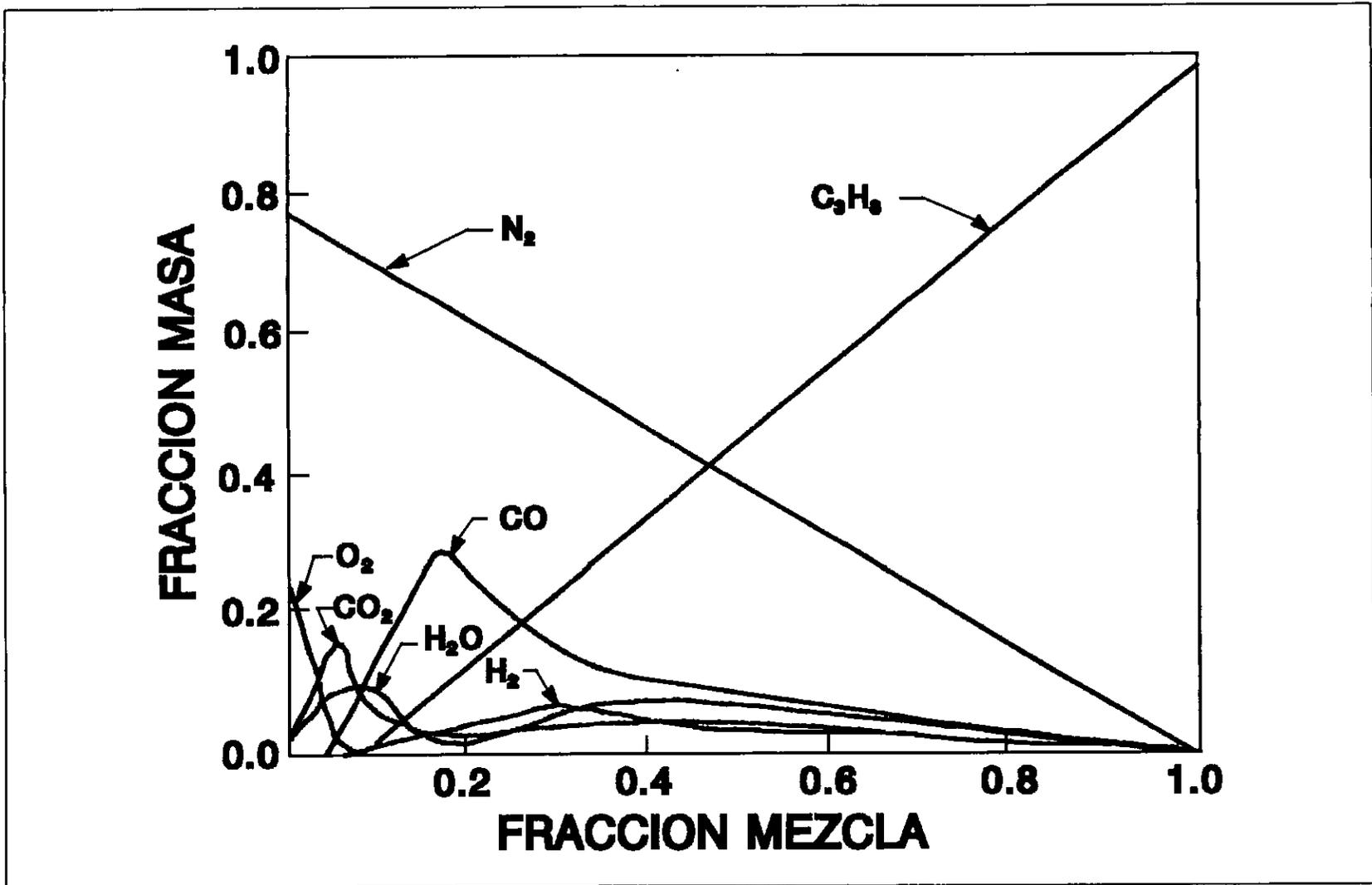


Figura 4.5 Fracción masa de los productos de combustión de n-Propano con aire en función de la fracción mezcla (18).

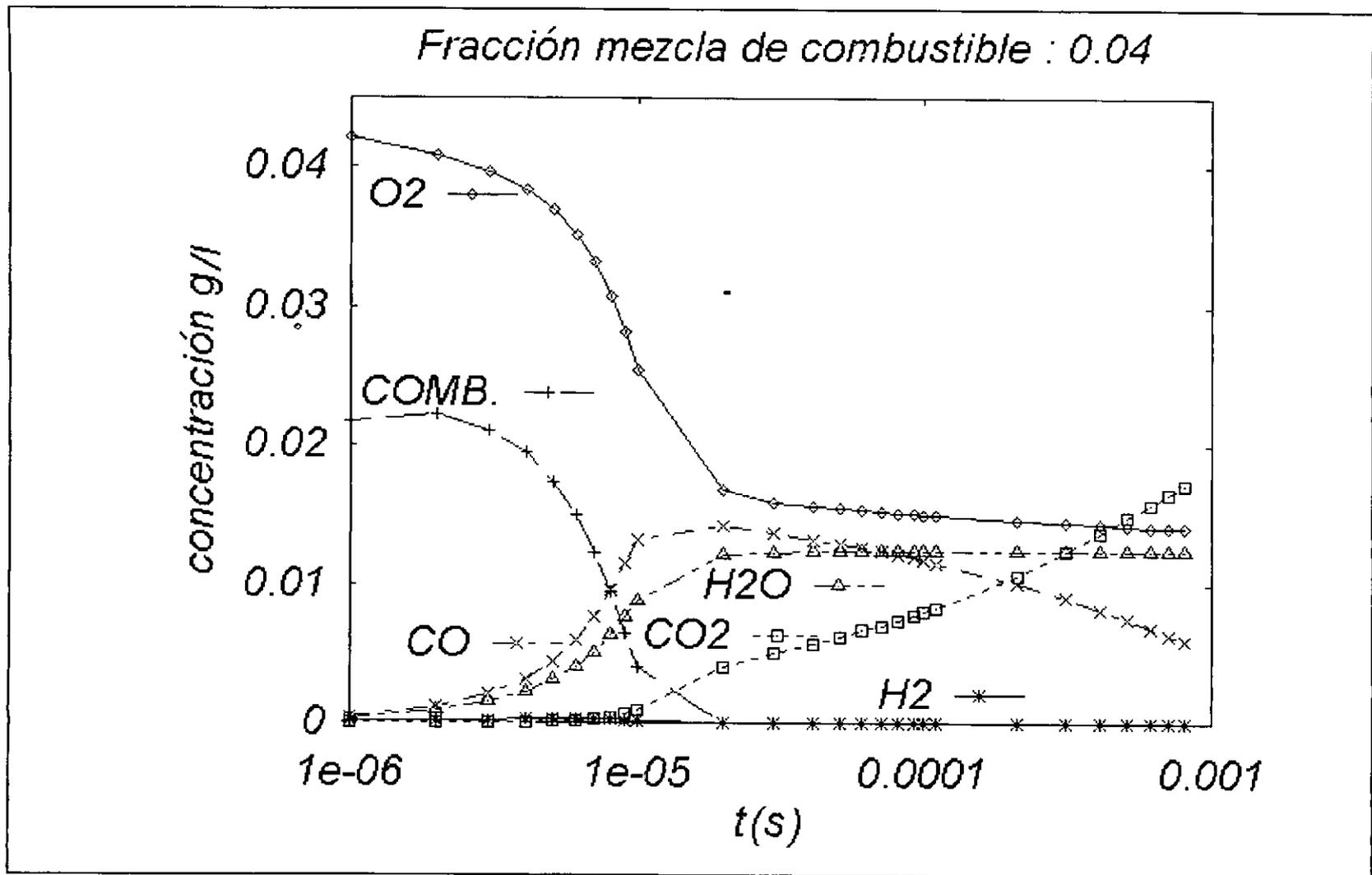


Figura 4.6 Variación de la concentración (grs/l) de las especies como una función del tiempo de reacción, para una mezcla con exceso de aire.

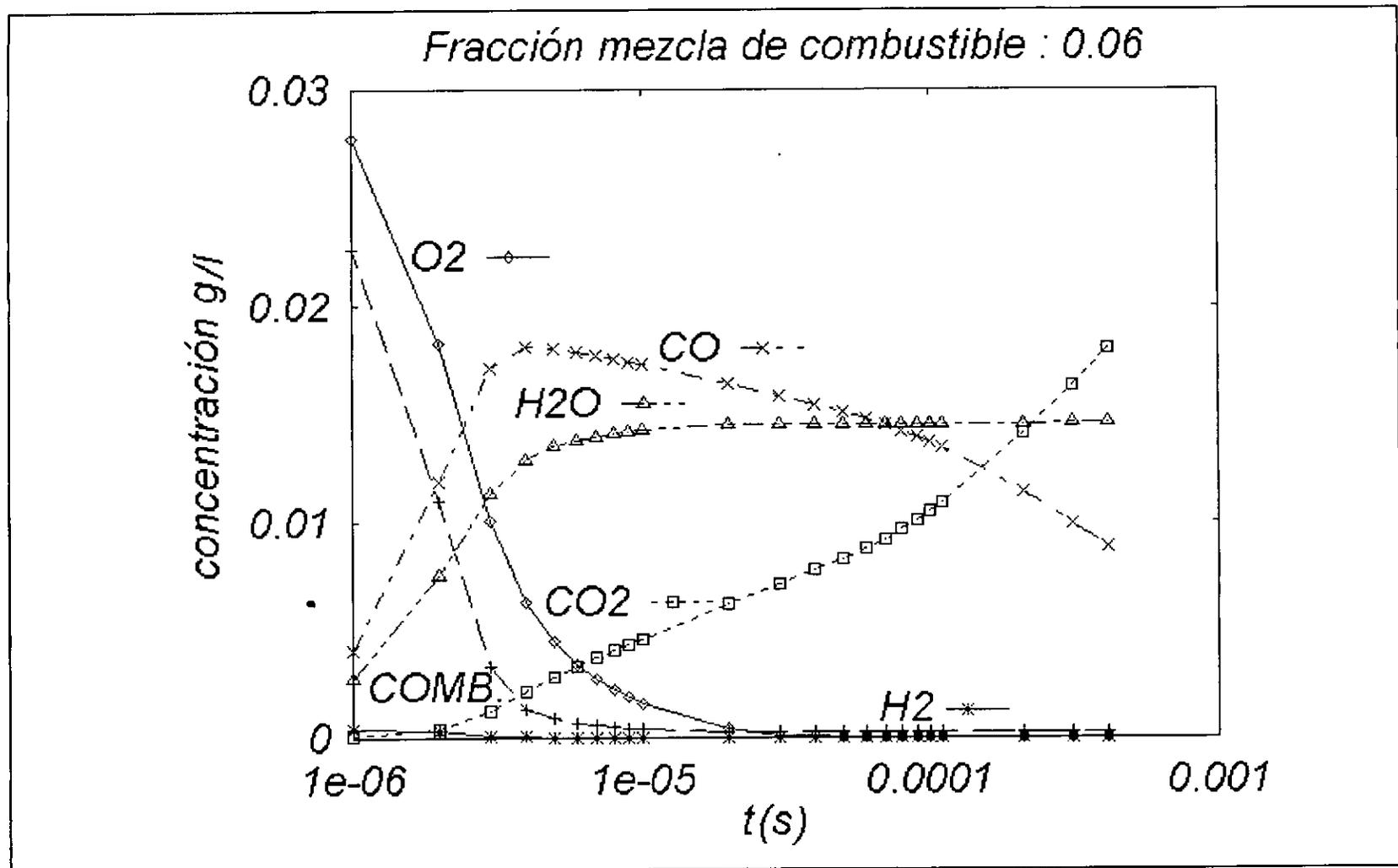


Figura 4.7 Variación de la concentración (grs/l) de las especies como una función del tiempo de reacción, para una mezcla estequiométrica.

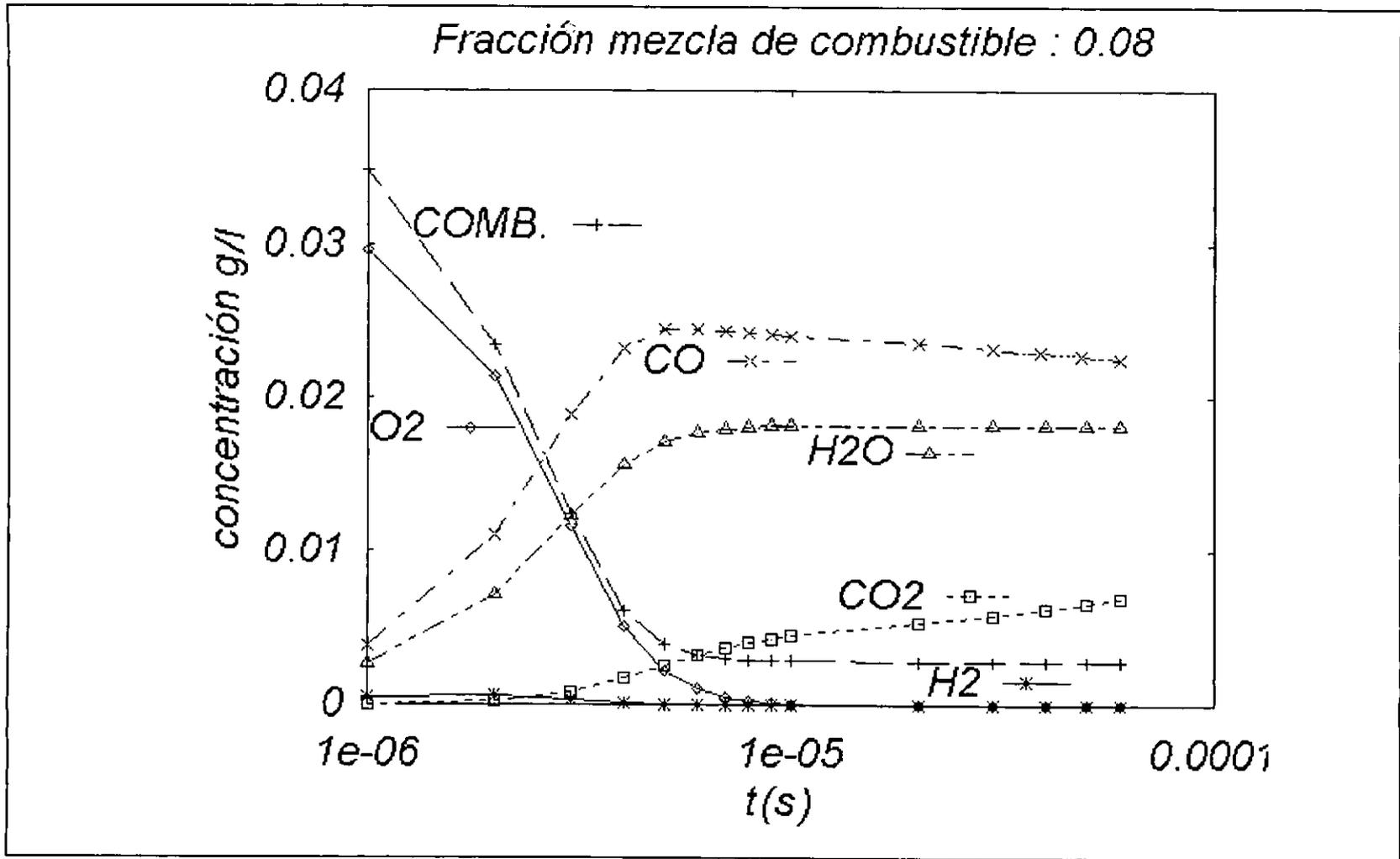


Figura 4.8 Variación de la concentración (grs/lit) de las especies como una función del tiempo de reacción, para una mezcla con exceso de combustible.

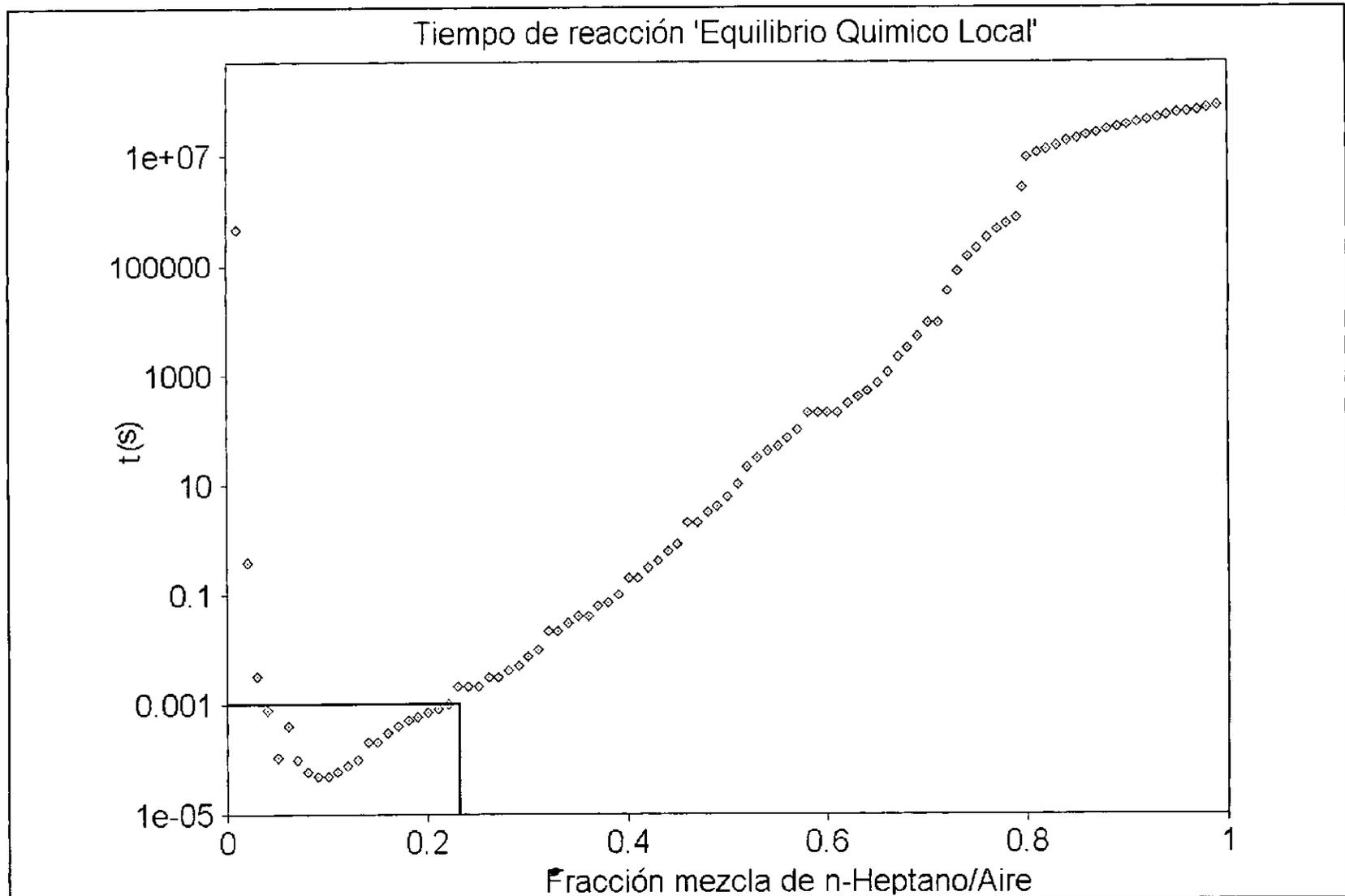


Figura 4.9 Tiempo de reacción para que la mezcla n-Heptano/Aire llegue al equilibrio químico.

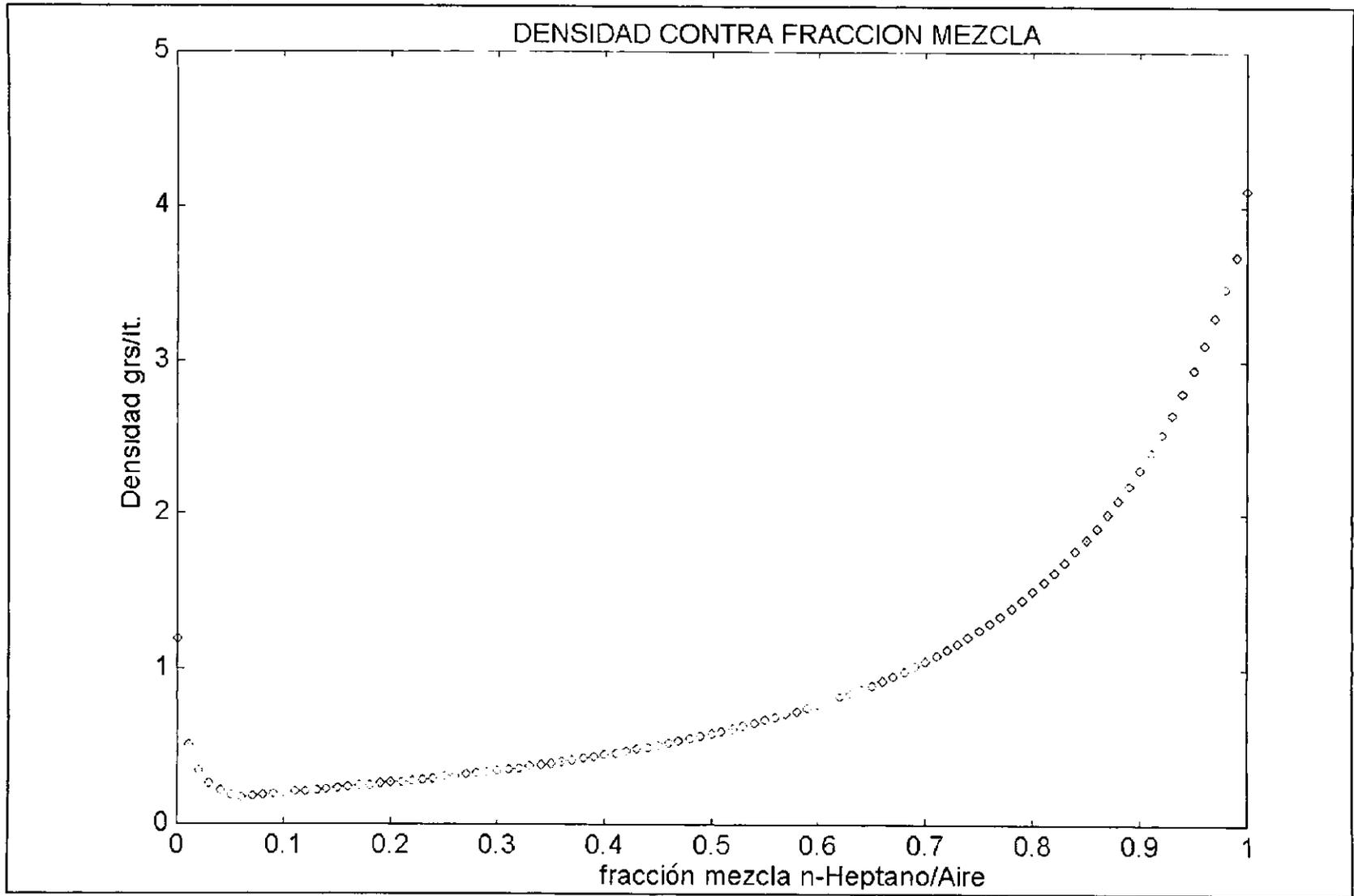


Figura 4.10 Densidad de mezcla de n-Heptano/Aire, si las reacciones se dan a temperatura adiabática.

## 5.- PROPUESTA DEL MODELO DE COMBUSTION.

En este capítulo se describe la forma como se integran los cálculos de la evolución de la mezcla aire - combustible y su cinética química de reacción. Los resultados de los capítulos 2, 3 y 4, se integran en el modelo de combustión que se propone, adicionalmente se incluyen los esfuerzos de Reynolds de la teoría estadística de la turbulencia. En los resultados se incluyen las comparaciones de la evolución de la mezcla aire - combustible, fracciones mezcla y perfiles de temperatura en función de la distancia del atomizador, con y sin considerar la turbulencia.

Los modelos para simular el proceso de combustión son sistemas demasiado complejos ya que llevan asociados los efectos de la transferencia de calor, masa ('momentum') y reacciones químicas que modifican la dinámica del flujo y normalmente producen un flujo turbulento (7, 65).

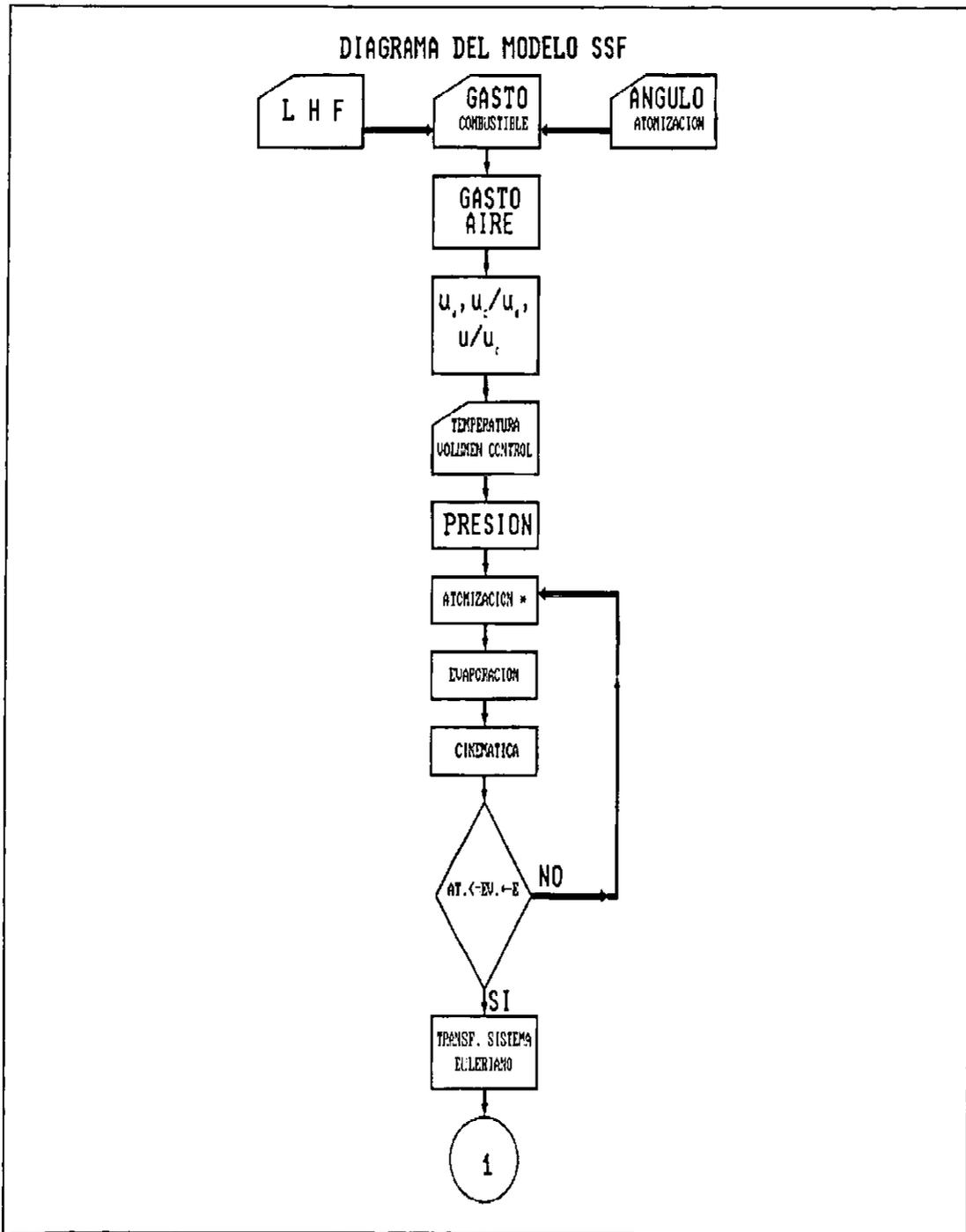
Por otro lado, la simulación numérica para el diseño y estudio del proceso de combustión es una poderosa herramienta, pero uno de los obstáculos para predecir con más realismo estos sistemas es la necesidad de aproximar el transporte turbulento dentro del área de combustión, la turbulencia normalmente es inducida en el combustor y juega un papel importante en el mezclado, oxidación y estabilización de la flama (47, 66).

Los dispositivos de atomización y quemado presentan condiciones localizadas que se dan en ciertos puntos de los sistemas de combustión, en donde las condiciones del flujo pueden no ser fácilmente simuladas. Normalmente se asume que el fluido es isotrópico, (no hay variación en la : geometría interna, aceleración centrífuga, reacción química, etc.), pero como la relación de dependencia entre la fracción mezcla, temperatura, composición y densidad no son lineales, existe siempre el problema para manejar este tipo de datos, por lo cual normalmente se aproxima mediante funciones de densidad de probabilidad (37, 66).

El modelo que se propone incluye la teoría estadística de la turbulencia, mediante los esfuerzos de Reynolds, en el estudio de la evolución del SPRAY; se compone de 2 aproximaciones diferentes : i).- un sistema LAGRANGIANO, para la evolución de las gotas; después de su emisión se guarda la información de número de gota, sus posiciones en 'x', 'y', el tamaño de la gota y la cantidad evaporada de combustible, que evoluciona en tiempo y espacio, ii).-en lo que respecta al flujo de gas (aire) se toma como un sistema EULERIANO, del cual se tienen las coordenadas fijas (celdas), y en cada una de ellas se tiene la misma cantidad de aire, temperatura, etc. a lo largo de toda la trayectoria donde evoluciona el SPRAY. En la figura 5.1 se muestra un diagrama general del proceso que se propone para analizar los efectos de los esfuerzos de REYNOLDS que definen un flujo turbulento; para determinar sus efectos, se

comparan los resultados contra un proceso en idénticas condiciones pero sin incluir en los cálculos correspondientes estos vectores.

5.1 Algoritmo Numérico (Diagramas y Procedimientos).



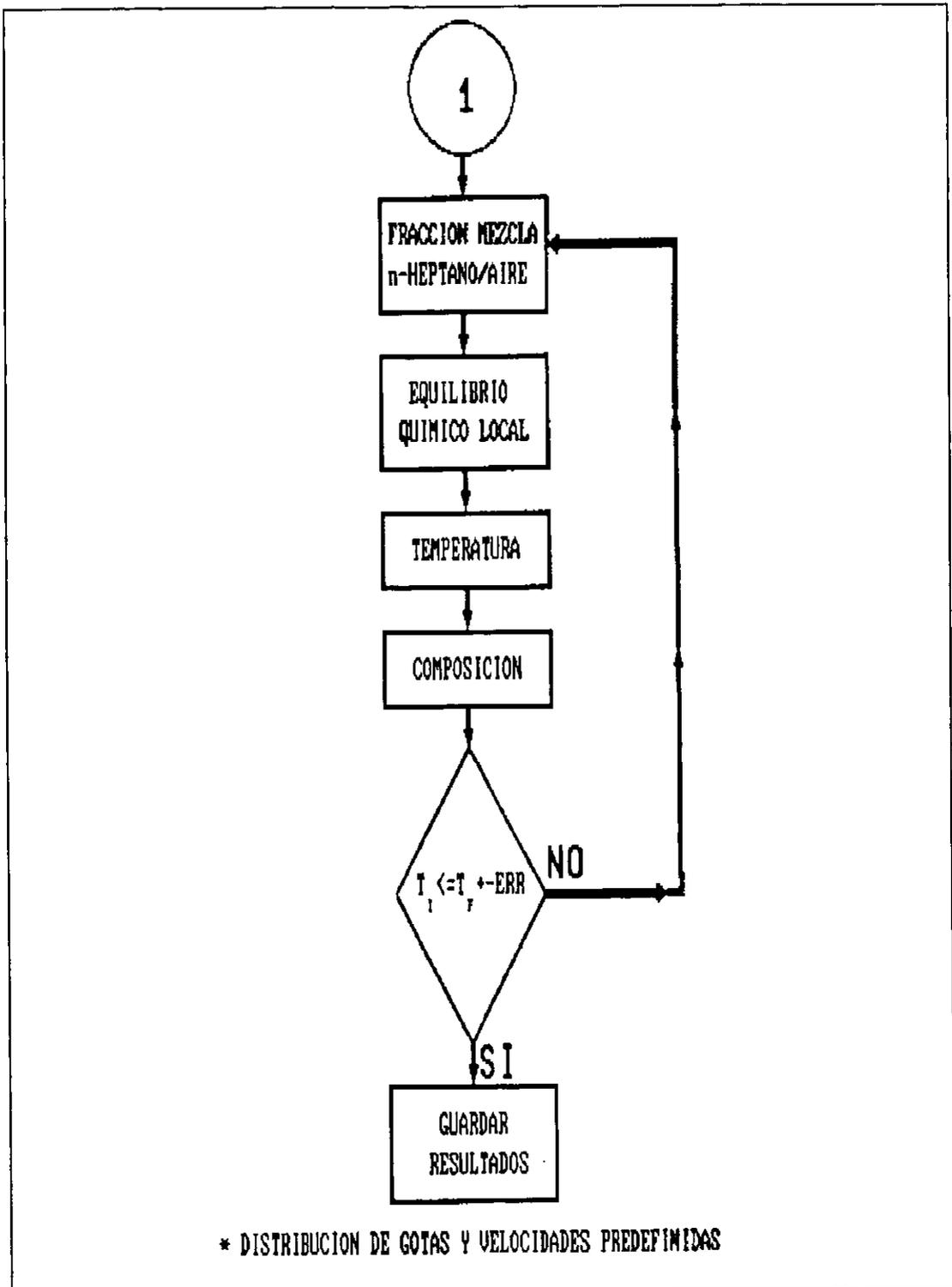


FIGURA 5.1 Diagrama del modelo estocastico para estudiar la evolución de un spray.

**5.2 Aproximación de la turbulencia (SSF).**

Con el fin de aproximar la turbulencia que se provoca en la inyección del combustible en un flujo a alta velocidad, se consideraran los esfuerzos de REYNOLDS, los cuales numéricamente se expresan como el producto de los vectores de velocidad axial y radial  $\bar{u}'\bar{v}'$ . En el trabajo de Faeth et al 1983 (18), existen gráficas que representan estos esfuerzos como función de las distancias radial y axial, para experimentos y simulaciones de la evolución de SPRAYES, con combustión y sin ella. Considerando el teorema de similaridad, (Pi de BUCKINGHAM), tomamos adimensionalmente los parámetros del trabajo de Faeth et al (18), con los cuales se resuelve el modelo propuesto y se obtiene una solución aproximada de los procesos de atomización, evaporación, evolución del flujo aire - combustible y combustión.

Como datos experimentales o base, se necesita la variación de la velocidad de flujo de aire en el centro o eje de simetría, entre la velocidad inicial con que se inyecta el flujo de aire; ésta se calcula mediante la ecuación 2.28, haciendo notar que por cuestiones del flujo y estabilidad del mismo solo se pueden hacer determinaciones de velocidad del fluido a valores mayores a 15 veces el diámetro del difusor, ( $x/d \geq 15$  unidades), que es donde se presenta el fluido líquido ya atomizado, la velocidad de flujo de aire se calcula mediante las ecuaciones 2.24 y 2.29.

Los perfiles de velocidad resultantes de las ecuaciones 2.28, 2.24 y 2.29, se muestran en las figuras 5.2\*, en donde se observa la variación axial de la velocidad central del flujo de aire dividida entre la velocidad inicial del mismo. En la figura 5.3, se puede ver el perfil de velocidad radial en función de la velocidad central.

La figura 5.4 muestra los esfuerzos de Reynolds presentados en el trabajo de Faeth et al (18), esta información se incluye como parte de la simulación hecha de los esfuerzos de REYNOLDS, los cuales se ajustan a la siguiente ecuación trascendente :

$$\frac{\bar{u}'\bar{v}'}{u_c^2} = \exp\left(-815\left(\frac{r}{x}\right)^2 + 73\frac{r}{x} - 5.9\right) \quad 5.1$$

---

\* Hay que hacer notar que la línea punteada entre 1 y 13 unidades de 'x/d' no necesariamente representa el posible valor numérico 'u<sub>c</sub>/u<sub>o</sub>', en este trabajo no se calculan valores en este rango.

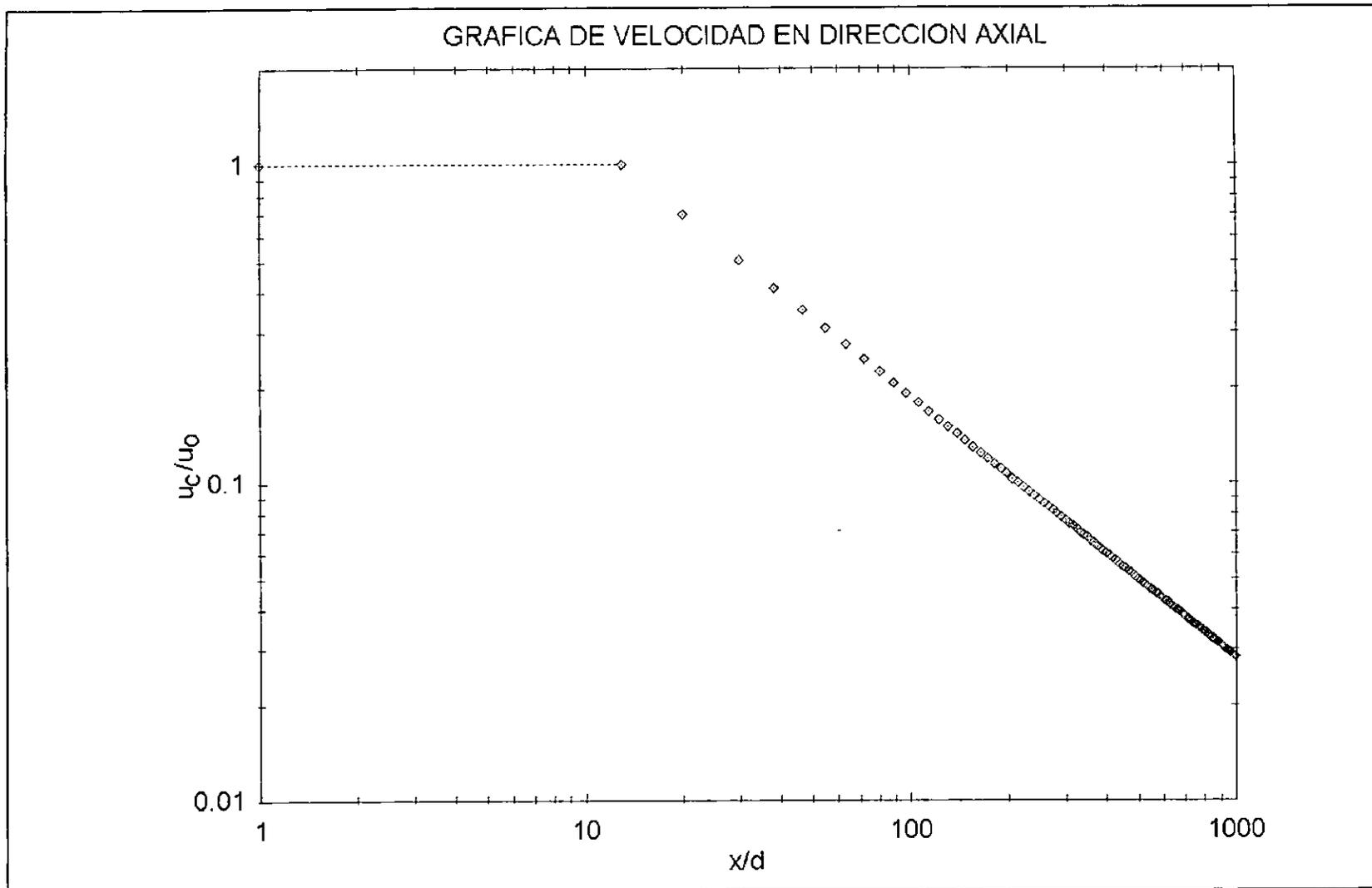


FIGURA 5.2 Variación de la velocidad central de flujo de aire con respecto a la velocidad inicial en dirección axial.

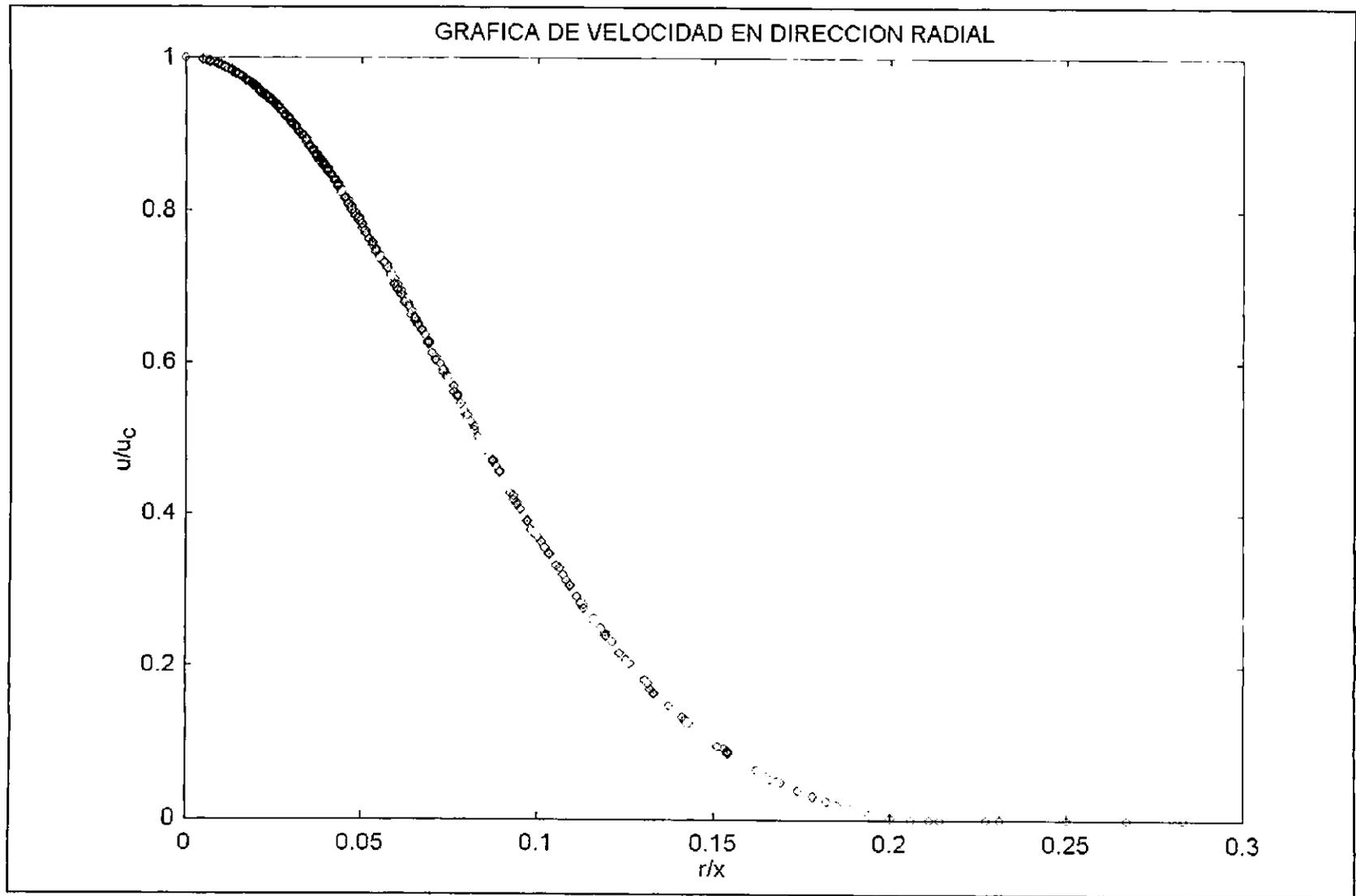


FIGURA 5.3 Variación de la velocidad con respecto a la velocidad central en dirección radial.

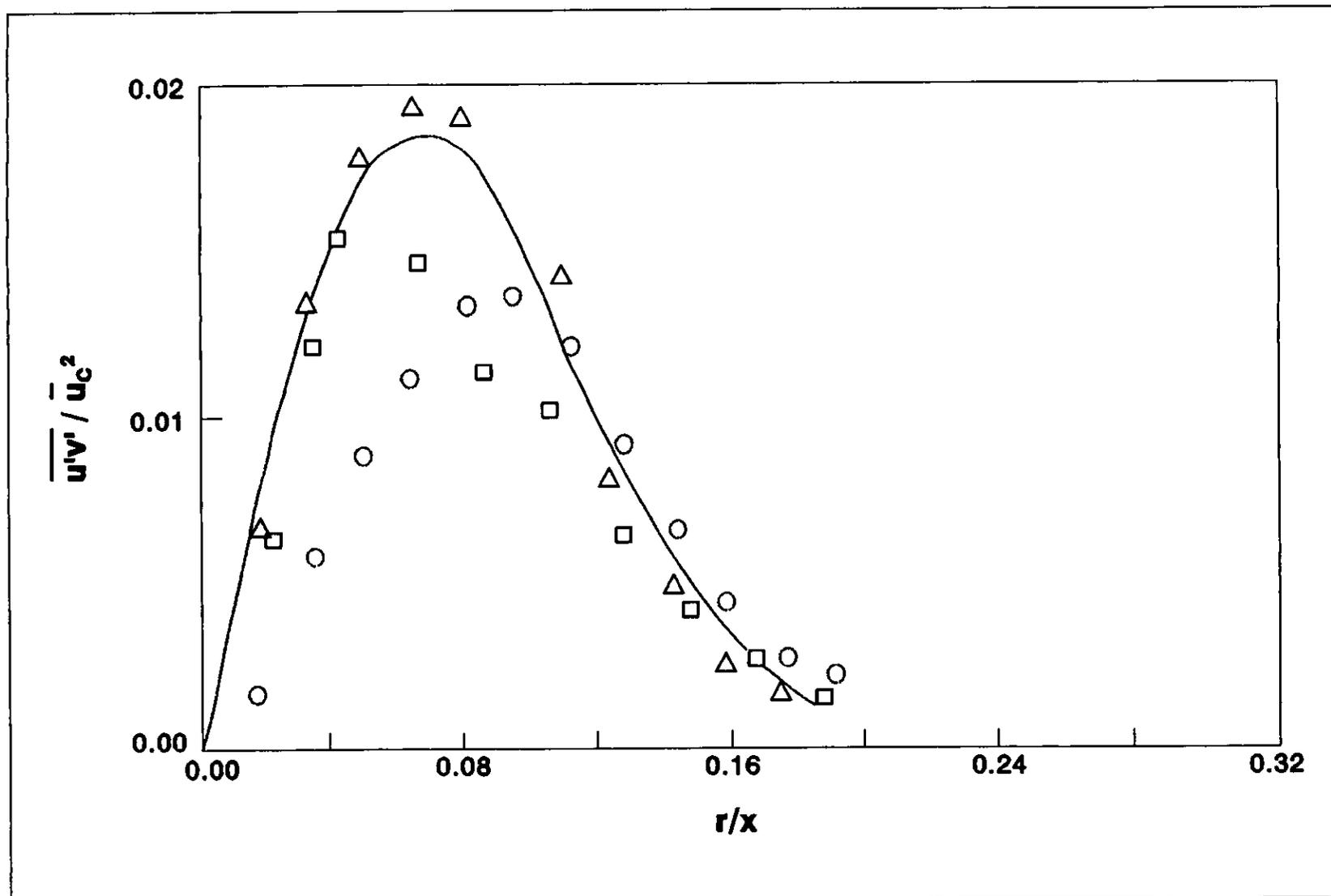


FIGURA 5.4 Campos de esfuerzos de Reynolds en dirección radial para un spray evaporándose.

De la figura 5.4, tomada de Faeth et al (18) se supone que el producto de los vectores de velocidad  $\bar{u}'$  y  $\bar{v}'$  originan la turbulencia, para generar los datos necesarios en este modelo, se utiliza el producto de los vectores de velocidad como función de 'r/x' en conjunto con la velocidad axial en el centro del ducto  $\bar{u}_c$ , ajustando estos datos, se obtiene la ecuación 5.1, con la cual podemos calcular los esfuerzos de REYNOLDS ( $E_R$ ) :

$$E_R = \frac{\bar{u}'\bar{v}'}{\bar{u}_c^2}$$

Para calcular el valor del vector de velocidad axial  $\bar{u}'$ , se propone arbitrariamente que esta tenga un valor en el campo de velocidades que se están manejando, para lo cual se supone un valor aleatorio entre los siguientes limites :

$$0.001E_R < \bar{u}' \leq \sqrt{E_R}$$

Una vez asignado el valor de la velocidad axial se despeja el valor de la velocidad radial, una vez que se tienen los valores de  $\bar{u}'$  y  $\bar{v}'$ , se incluyen estos en la ecuación 4.6 que calcula la fuerza de Stokes en dirección 'x' y 'y' :

$$F_x = 3\pi\mu d(\bar{u} - v_x + \bar{u}') \tag{5.2}$$

$$F_y = 3\pi\mu d(\bar{v}' - v_y) \tag{5.3}$$

En donde :

d = diámetro de la gota.

$\mu$  = viscosidad.

$v_x$  = velocidad de la gota en dirección x.

$v_y$  = velocidad de la gota en dirección y.

$\bar{u}'$  = velocidad por esfuerzo de Reynolds en dirección x.

$\bar{v}'$  = velocidad por esfuerzo de Reynolds en dirección y.

98 PROPUESTA DEL MODELO DE COMBUSTION

$g$  = velocidad del flujo gaseoso (aire/combustible).

Lo cual incide en la aceleración, velocidad y posición de las gotas de combustible en las direcciones axial 'x' y radial 'y' :

$$a_x = \frac{(F_x - v_x \dot{m})}{m_0} \quad 5.4$$

$$a_y = \frac{(F_y - v_y \dot{m})}{m_0} \quad 5.5$$

En donde :

$F_x$  = Fuerzas de Stokes en dirección x, calculada con ec. 5.2.

$F_y$  = Fuerzas de Stokes en dirección y, calculada con ec. 5.3.

$m_0$  = masa inicial de la gota líquida.

$\dot{m}$  = masa de líquido que se evaporó en un período de tiempo.

$$v_x = v_{x_0} + a_x \Delta t \quad 5.6$$

$$v_y = v_{y_0} + a_y \Delta t \quad 5.7$$

En donde :

$v_x$  = velocidad en dirección 'x'.

$v_y$  = velocidad en dirección 'y'.

$a_x$  = aceleración en dirección 'x'.

$a_y$  = aceleración en dirección 'y'.

$v_{x_0}$  = velocidad inicial en dirección 'x'.

$v_{y_0}$  = velocidad inicial en dirección 'y'.

$\Delta t$  = incremento de tiempo.

$$x_f = x_0 + v_{x_0} \Delta t + \frac{a_x}{2} (\Delta t)^2 \quad 5.8$$

$$y_f = y_0 + v_{y_0} \Delta t + \frac{a_y}{2} (\Delta t)^2 \quad 5.9$$

En donde :

$x_0$  = posición inicial en dirección 'x'.

$y_0$  = posición inicial en dirección 'y'.

$x_f$  = posición final en dirección 'x'.

$y_f$  = posición final en dirección 'y'.

### 5.3 RESULTADOS.

En este trabajo se simula la combustión de un spray de n-heptano con un gasto determinado, distribuciones de tamaños y velocidades de gotas de combustible inyectadas en el flujo estequiométrico de aire, la velocidad de flujo de aire se determina a partir del tamaño máximo del sistema de flujo localmente homogéneo (LHF).

La secuencia para resolver el problema es la siguiente :

- 1.- Se propone un gasto de combustible en (1 - 50 g/s).
- 2.- A partir del gasto de combustible se obtiene el gasto estequiométrico de aire (15.9 g de aire por g de combustible).
- 3.- Se obtiene el alcance máximo del spray (1 - 10 m).
- 4.- En función del alcance máximo del spray, la geometría del atomizador (diámetro = 5 x/d) y el difusor (diámetro = 20 x/d) se calculan gasto y flujo de aire, así como la velocidad máxima del mismo.
- 5.- Se analiza el spray y su evolución en una sección bidimensional cónica con ángulo  $\Theta$  entre 1 y 10 °.
- 6.- Se determina como criterio el limite donde  $u_0$  llega a un valor mínimo, esto es un resultado del problema planteado.
- 7.- La sección cilíndrica se representa por medio de un arreglo bidimensional (malla) que abarca el alcance máximo del spray 'LHF', el cual en unidades adimensionales es de 1000 x/d.
- 8.- Se utiliza el perfil de temperatura determinado en el tratamiento del spray (ver figura 2.14), la cual se ha discretizado para cada celda de la malla, estos valores se respaldan en un archivo de datos que es donde el programa que calcula la evaporación los toma, acotando que en las posiciones r/x mayores a las que determinan el perfil de la flama se suponen con 350 K.
- 9.- Acoplado los perfiles de velocidad del 'LHF', los campos de esfuerzos de Reynolds y el perfil de temperaturas de la flama, se simula la evolución del SPRAY (sin combustión), hasta que alcanza el estado pseudo-estacionario,

## 100PROPUESTA DEL MODELO DE COMBUSTION

(aproximadamente las 100 gotas que se generan en el spray cada milésima de segundo, se evaporan en el mismo período de tiempo).

10.- Una vez alcanzado el estado pseudo-estacionario se determinan las distancias máximas en las direcciones 'x' y 'y', a partir de lo cual se pueden tener dos acciones definidas que son :

a).- Si el alcance máximo es menor que el dominio de 'LHF' que se propuso, se prosigue con el análisis de la evolución del spray.

b).- Si el alcance del dominio del spray es mayor que el del 'LHF' propuesto, se modifican las características del spray o el tamaño del 'LHF' propuesto, reiniciando siempre los cálculos de velocidad del flujo de aire, la condición es que el dominio del spray sea siempre menor que el 'LHF' propuesto.

11.- Una vez que se obtiene el alcance del spray dentro del 'LHF' propuesto, se inicia la simulación de la combustión, para lo cual se usa una milésima de segundo, (0.001 s), como incremento de tiempo, el cual se determinó para el equilibrio químico local en el capítulo 3 de tratamiento cinético-químico, para las fracciones mezcla de combustible - aire.

12.- La evolución temporal lleva asociada la dinámica de fluidos, en donde se analiza el cambio de velocidad y posición del combustible así como del flujo de aire, en tanto que en el avance del spray se determinan la evaporación y la concentración al final de cada milésima de segundo. Estos cálculos se realizan en cada elemento de la malla en donde se determina la fracción mezcla de combustible - aire, asociando a esta la temperatura y concentración de especies del equilibrio químico local, en este momento se tiene el acoplamiento del sistema SPRAY - CINETICA QUIMICA - LHF.

En las figuras 5.5 y 5.6, se puede ver la diferencia en la evaporación para dos grupos de gotas en las mismas condiciones iniciales (tamaño de gotas, velocidad de gotas, velocidad de flujo de aire y perfil de temperatura), variando únicamente en que uno de ellos se considera el flujo normal y en otra en el cálculo de la evolución del flujo, se le adicionan los esfuerzos de Reynolds que se muestran en la figura 5.4. En estas figuras podemos observar que al incluir esfuerzos de Reynolds, el promedio de vida de las gotas desciende, debido a que las velocidades  $\bar{u}'$  y  $\bar{v}'$ , modifican la trayectoria de las mismas y llevan

las gotas a regiones del 'LHF' con diferente temperatura y por lo tanto con diferente evaporación. Habrá que hacer notar que cuando las gotas son de tamaños entre 200 y 150 micras, la evaporación es mayor en el proceso de flujo sin esfuerzos de Reynolds, lo cual se puede ver en las figuras 5.5 y 5.6.

La figura 5.7 muestra la acumulación de la mayor evaporación al usar la teoría estadística de la turbulencia (inclusión de los esfuerzos de Reynolds), ya que en una secuencia de generación del spray durante 500 milésimas de

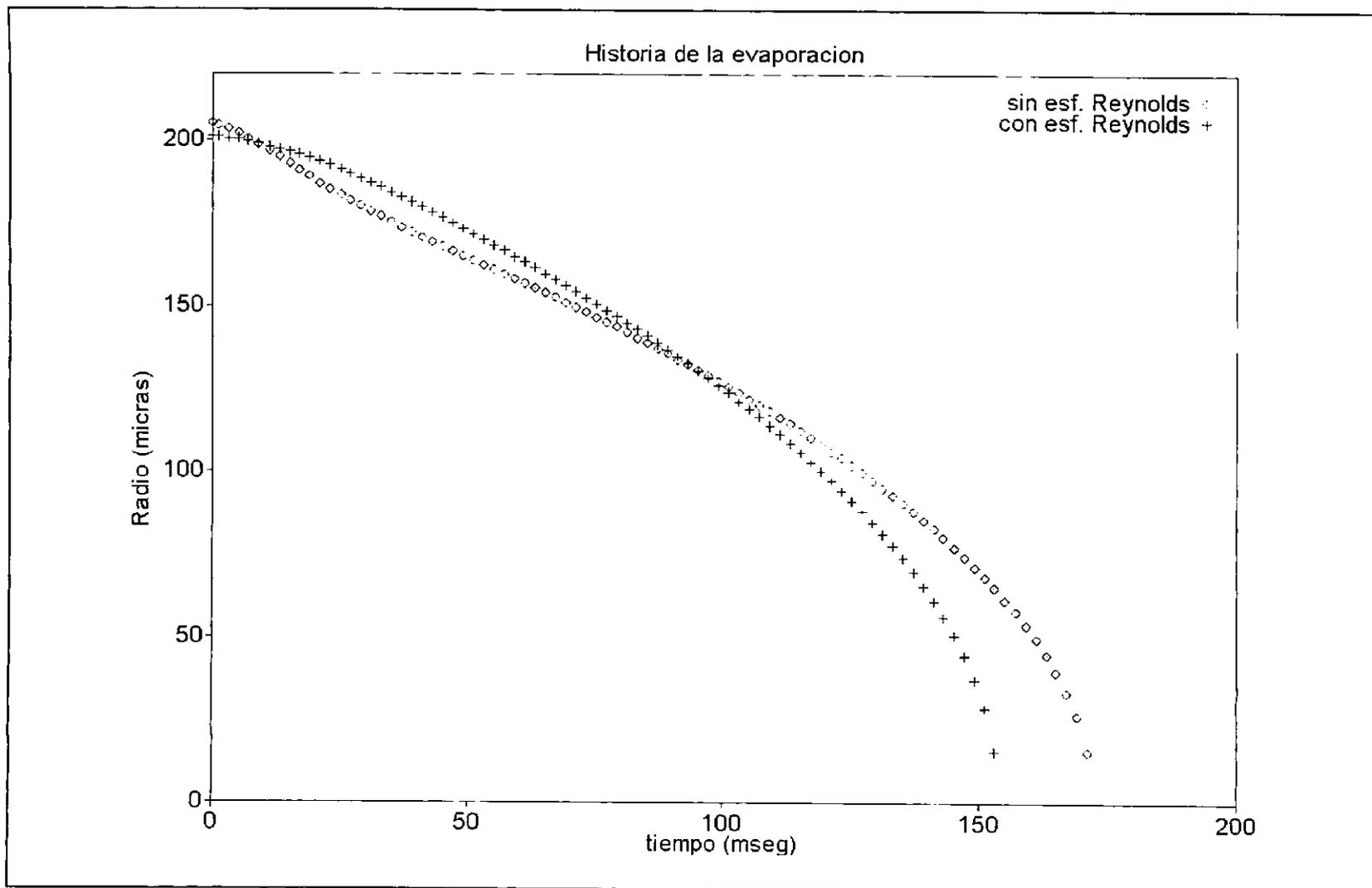


FIGURA 5.5 Evaporación de las gotas de n-heptano en función del tiempo, para flujo normal y flujo considerando esfuerzos de REYNOLDS.

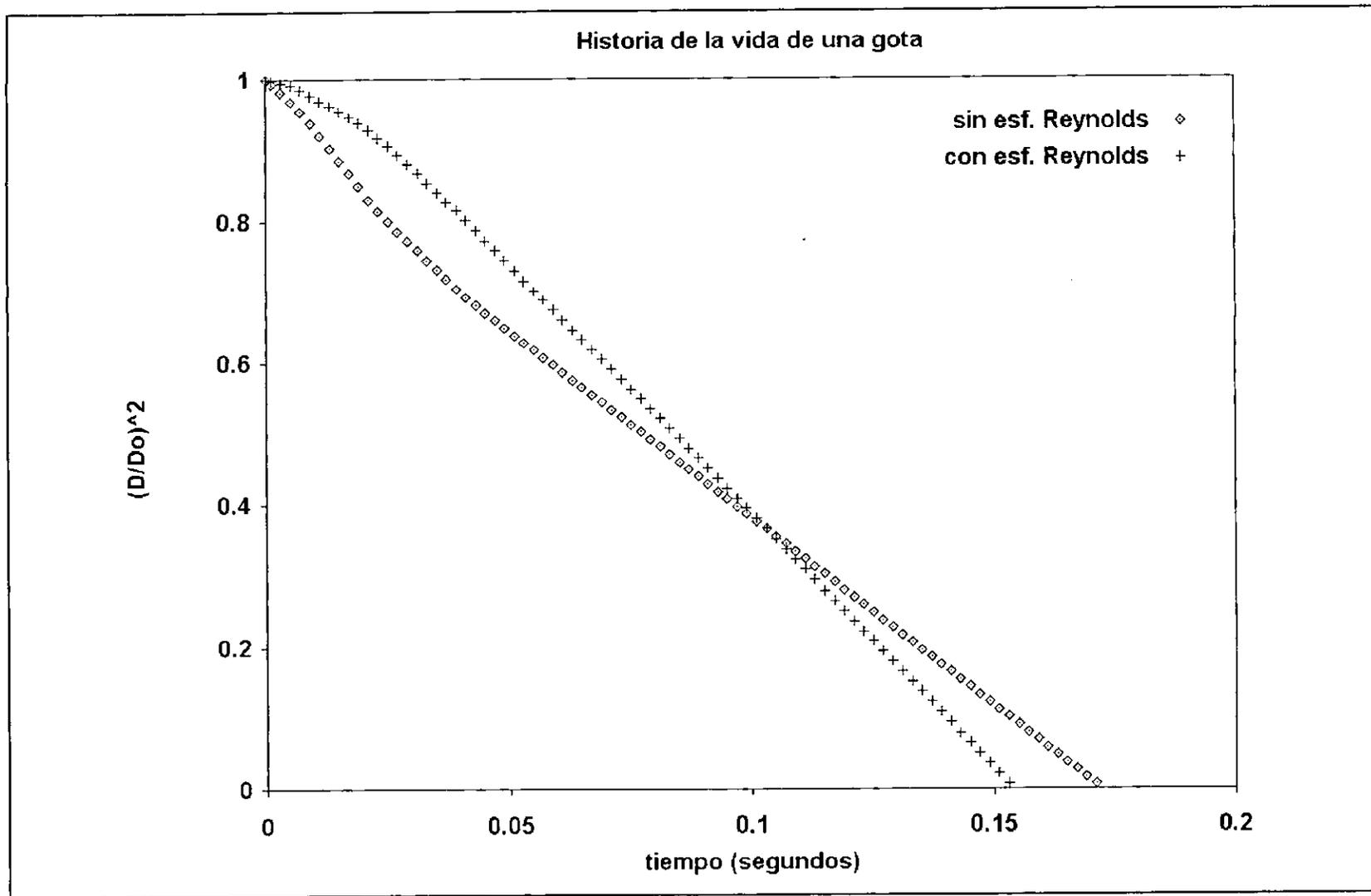


FIGURA 5.6 Variación del tamaño de gotas de n-heptano en relación con el tamaño inicial y como una función del tiempo.

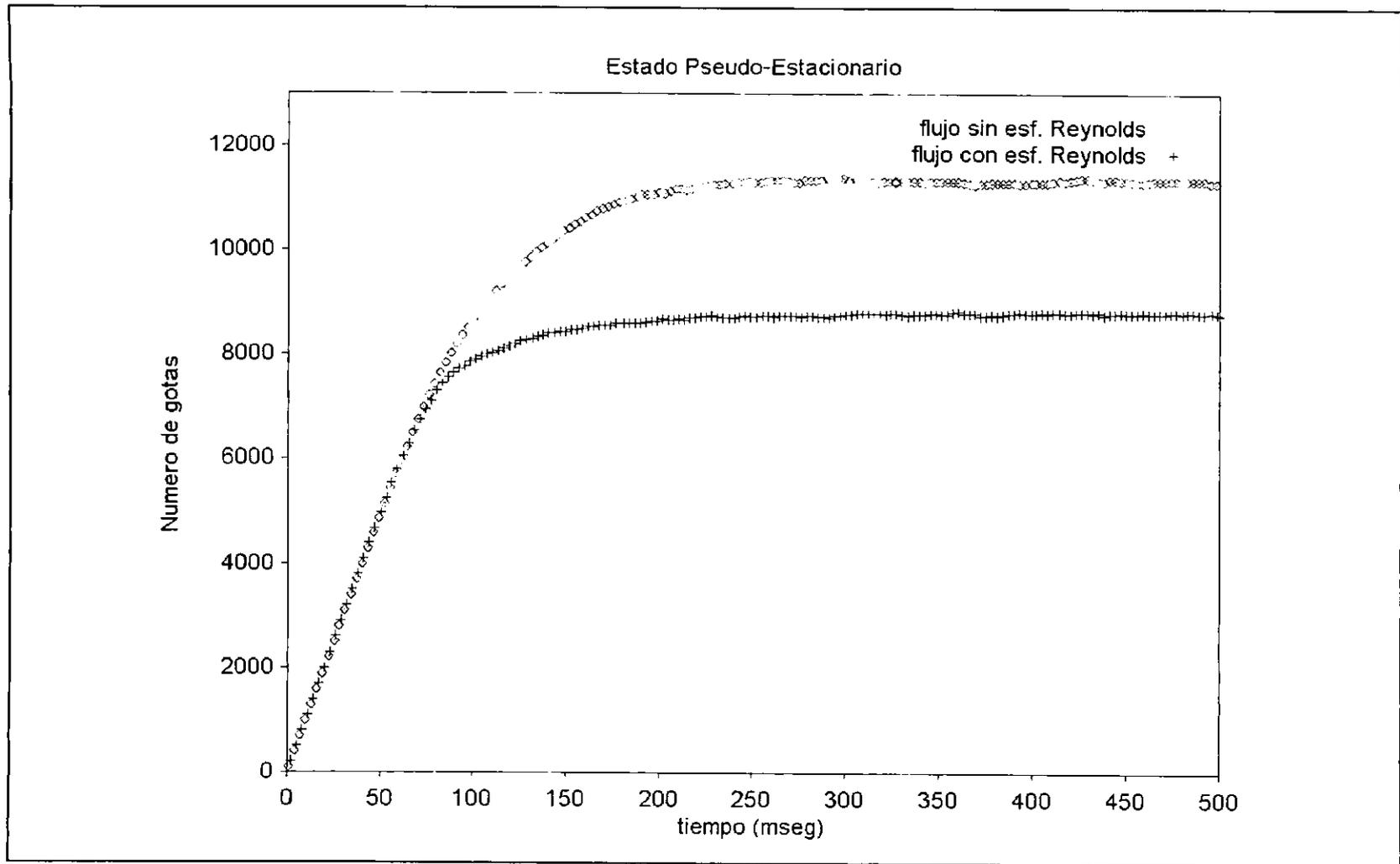


FIGURA 5.7 Evolución temporal del número de gotas de n-heptano en las condiciones de flujo señaladas en la figura 5.5, sin considerar el proceso de combustión.

segundo, con iguales características en cuanto a la distribución de tamaños y velocidades de gotas, la acumulación en el estado pseudo-estacionario es menor en cerca de 3000 unidades cuando se incluyen los esfuerzos de Reynolds. Una vez alcanzado el estado pseudo-estacionario, en donde se supone que la generación de gotas durante cada milésima de segundo, es equivalente al número de gotas que se integran al 'LHF' en el mismo período de tiempo y que el flujo de aire y la distribución del combustible tienen valores que no varían en función del tiempo; en estas condiciones se realizan los cálculos de: número de gotas, fracción mezcla, Diámetro Medio Sauter (SMD) y volumen, que se muestran en las figuras 5.8 a 5.19.

En las figuras 5.8 y 5.9 se muestran las distribuciones de gotas en el estado pseudo-estacionario con respecto a la distancia radial y normalizadas con respecto a los valores obtenidos en el eje de simetría. La comparación se hace para tres distancias axiales y considerando en el primer caso, un flujo sin incluir en el cálculo los esfuerzos de REYNOLDS y en el segundo caso, se incluyen este tipo de esfuerzos. De las gráficas podemos observar que su comportamiento es similar, pero con la inclusión de los esfuerzos de Reynolds, la relación del número de gotas se presenta a radios mayores, lo que sugiere es que el cono donde se contiene el spray tiene una dispersión mayor cuando se incluyen los esfuerzos de Reynolds.

A partir de la distribución de gotas y su volumen en cada punto se calcula la cantidad de combustible, el cual sumado al aire que entra para formar el 'LHF', da la fracción mezcla de combustible para cada celda de la malla normalizada con respecto a la celda central, razón por lo cual algunos valores a radios pequeños tienen valores mayores a la unidad, como se puede ver en las figuras 5.10 y 5.11, en estas se muestran los valores de fracción mezcla en función de la distancia radial para tres de las distancias axiales que se muestran en la distribución de gotas de combustible. Las figuras 5.10 y 5.11 complementan a las figuras 5.8 y 5.9, de donde se puede concluir que en los radios mayores del ducto, existen las gotas más pequeñas y que esto explica el porque la relación de fracción mezcla es menor cuando se incluyen los esfuerzos de Reynolds, aunque la relación del número de gotas sea a la inversa.

Las figuras 5.12 y 5.13 nos muestran la distribución del Diámetro Medio Sauter (SMD) en dirección radial, para las tres distancias axiales seleccionadas en las figuras anteriores, para flujos con y sin esfuerzos de Reynolds incluidos. Como el diámetro medio Sauter es la relación de área sobre volumen, en estas figuras se incluyen los efectos descritos en las figuras 5.8 a 5.11.

La variación de los productos de combustión en dirección axial para flujos de aire-combustible, incluyendo la teoría estadística de la turbulencia y comparada con un flujo en donde no es considerada se muestran a continuación :

Las figuras 5.14 y 5.15 muestran la relación normalizada del número de

gotas en dirección axial normalizado con respecto al número de gotas que se producen en el difusor. En estas gráficas se puede ver que la relación calculada desciende rápidamente hasta valores menores al 0.5, esto se debe a que a menores distancias axiales ( $x/d$ ), las gotas tienen una mayor diferencia de velocidad y posteriormente las gotas se van evaporando, se integran al 'LHF' y su velocidad va disminuyendo. En el flujo gaseoso que forman el vapor de combustible más el aire, la diferencia de aplicar los esfuerzos de Reynolds muestra que la acumulación de gotas a distancias mayores a  $100x/d$ , es menor debido a que hay una mejor distribución.

Las figuras 5.16 y 5.17 muestran la relación de volúmenes en dirección axial y normalizados con respecto al volumen original. El descenso rápido de la relación, indica una distribución alargada (tipo elíptica), del perfil de distribución; en la parte final, hay un incremento a partir de los  $700 x/d$ , probablemente debido a que hay gotas que viajaron en el 'LHF' a temperaturas muy bajas, entre 350 - 450 K, (ver figura 4.4), y son gotas que sufren poca evaporación, ya su velocidad como gotas es muy poca y son arrastradas por el flujo gaseoso. El número de gotas no es muy alto, puesto que las gráficas 5.14 y 5.15 no registran un incremento en la relación de gotas, pero si son grandes y por ello se incrementa notablemente el volumen.

En las figuras 5.18 y 5.19 se muestran los diámetros medios Sauter (SMD) en dirección axial, los cuales como ya se ha mencionado, dependen de la relación área sobre volumen. Al ver la variación entre los cálculos cuando se aplican los esfuerzos de Reynolds a las gotas de combustible en aire, lo que se observa es que la relación de volúmenes es menor, (comparar figura 5.17 con 5.16) y el SMD es mayor, (comparar figura 5.19 con figura 5.18) a cuando no se incluyen este tipo de fuerzas en los cálculos. Esto indica que aunque la relación del número de gotas sea similar, los tamaños de gotas sí tienen diferencias apreciables entre uno y otro caso.

A partir de este punto se considera que el proceso de combustión ya se ha efectuado y que como resultado del mismo hay una generación de calor, el cual modifica la temperatura (para obtener esta variación se supone un proceso adiabático y se calcula como se indica en el APENDICE C), así como la disminución de los reactantes (comburente oxígeno y combustible n-heptano) y el incremento de los productos de combustión.

Se puede ver en las figuras 5.10 y 5.11, que la fracción mezcla se relaciona con el equilibrio químico local (EQL) en donde de forma discreta se obtuvo una base de cálculo que relaciona la figura 3.2 que contiene por, cada 0.01 de fracción mezcla, una temperatura y distribución de productos de combustión, considerando que las fracciones mezcla están entre 0.02 y 0.25 de combustible, por lo cual reaccionan a tiempos menor a 0.001 segundos (ver figura 3.9).

Como resultado de las distribuciones de gotas y fracciones mezcla de combustible-aire, se calcula la variación de la temperatura que se muestra en las figuras 5.20 y 5.21, en donde se puede observar la variación de la temperatura en dirección radial para 3 diferentes cortes en el sistema 'LHF'. De estas gráficas podemos observar que solo para distancias de  $100 x/d$ , se nota una diferencia apreciable en los resultados, suponiendo en este caso que las velocidades son las que producen la diferencia en las fracciones mezcla y estas en el cálculo de la temperatura.

Las figuras 5.22 y 5.23, contribuyen a reforzar la suposición anterior, ya que muestran la variación de temperatura en el eje de simetría a lo largo de la dirección axial. Estas gráficas muestran que al utilizar los esfuerzos de Reynolds en los cálculos, el máximo de la temperatura se desplaza en cerca de  $100 x/d$  más, lo mismo que el comportamiento inicial, en donde la gráfica de los resultados de temperatura con esfuerzos de Reynolds, siempre es menor a la gráfica que no los incluye, sucediendo lo contrario después del mínimo. Esto indica una variación en la parte central de los perfiles de concentración-temperatura, pero esto no sería visible en los perfiles de concentración-temperatura externos.

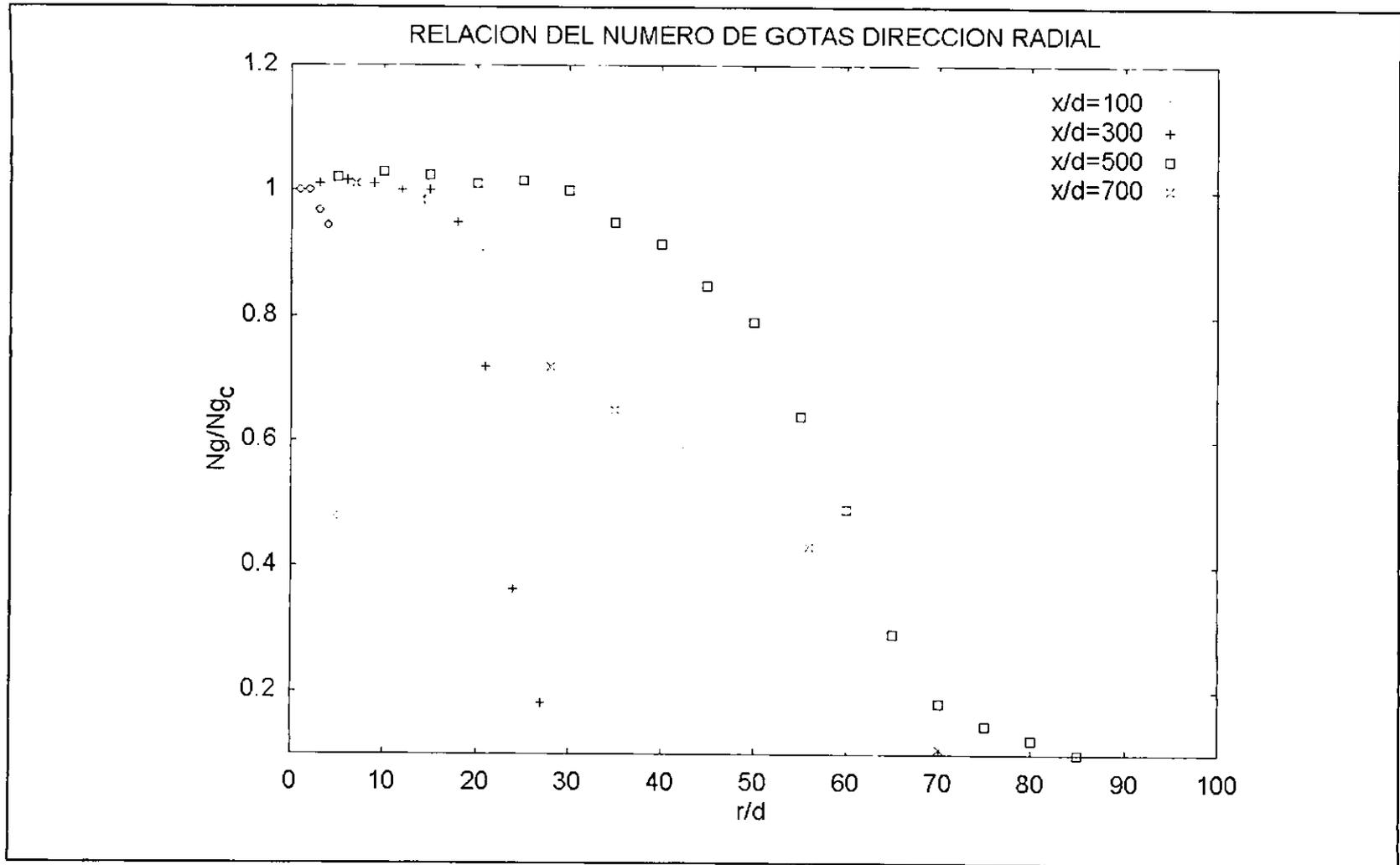


FIGURA 5.8 Distribución de tamaños de gotas con respecto al valor central y en función de la distancia radial, para un flujo sin combustión.

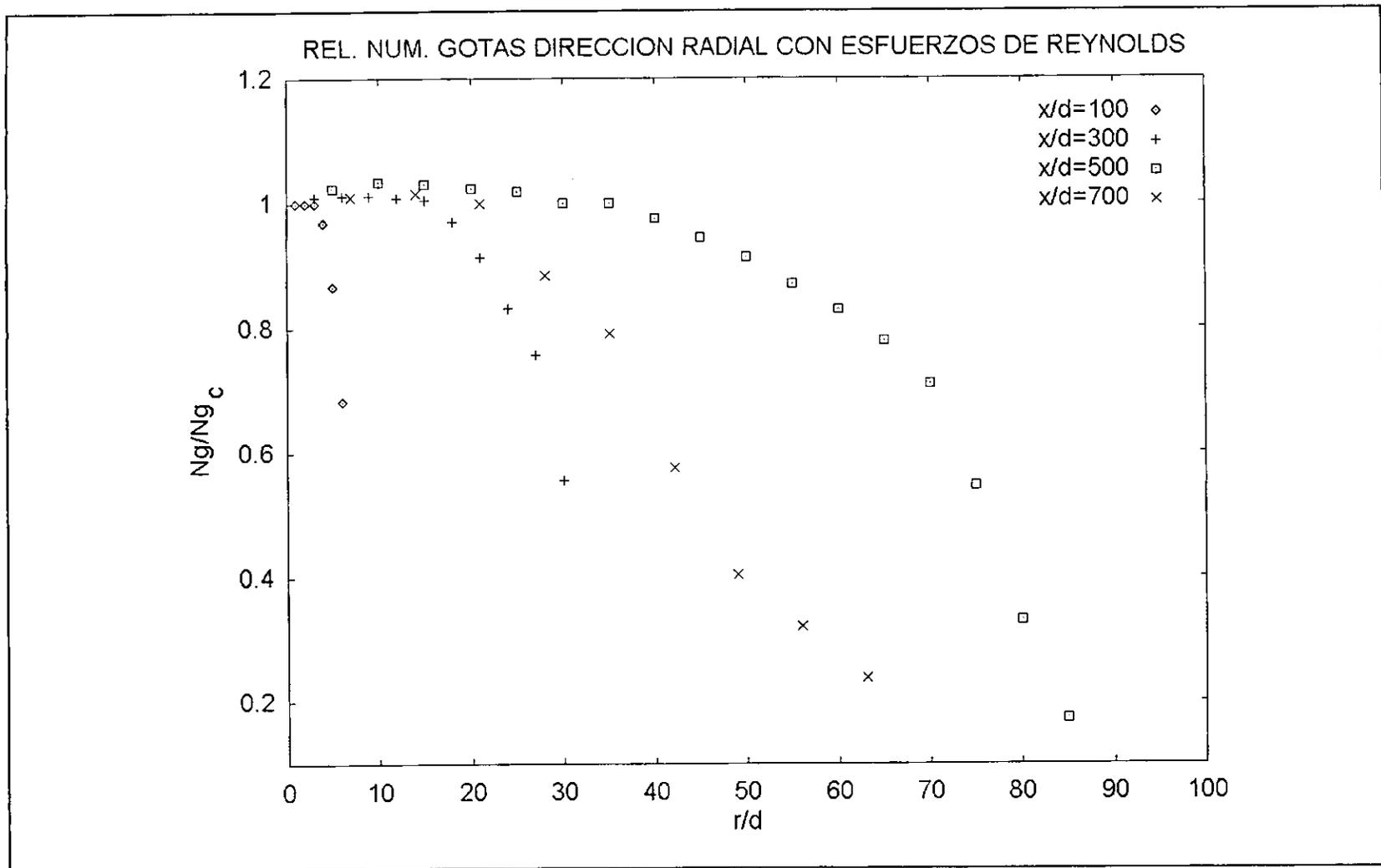


FIGURA 5.9 Distribución de tamaños de gotas con respecto al valor central y en función de la distancia radial, para un flujo con Esfuerzos de Reynolds, sin combustión.

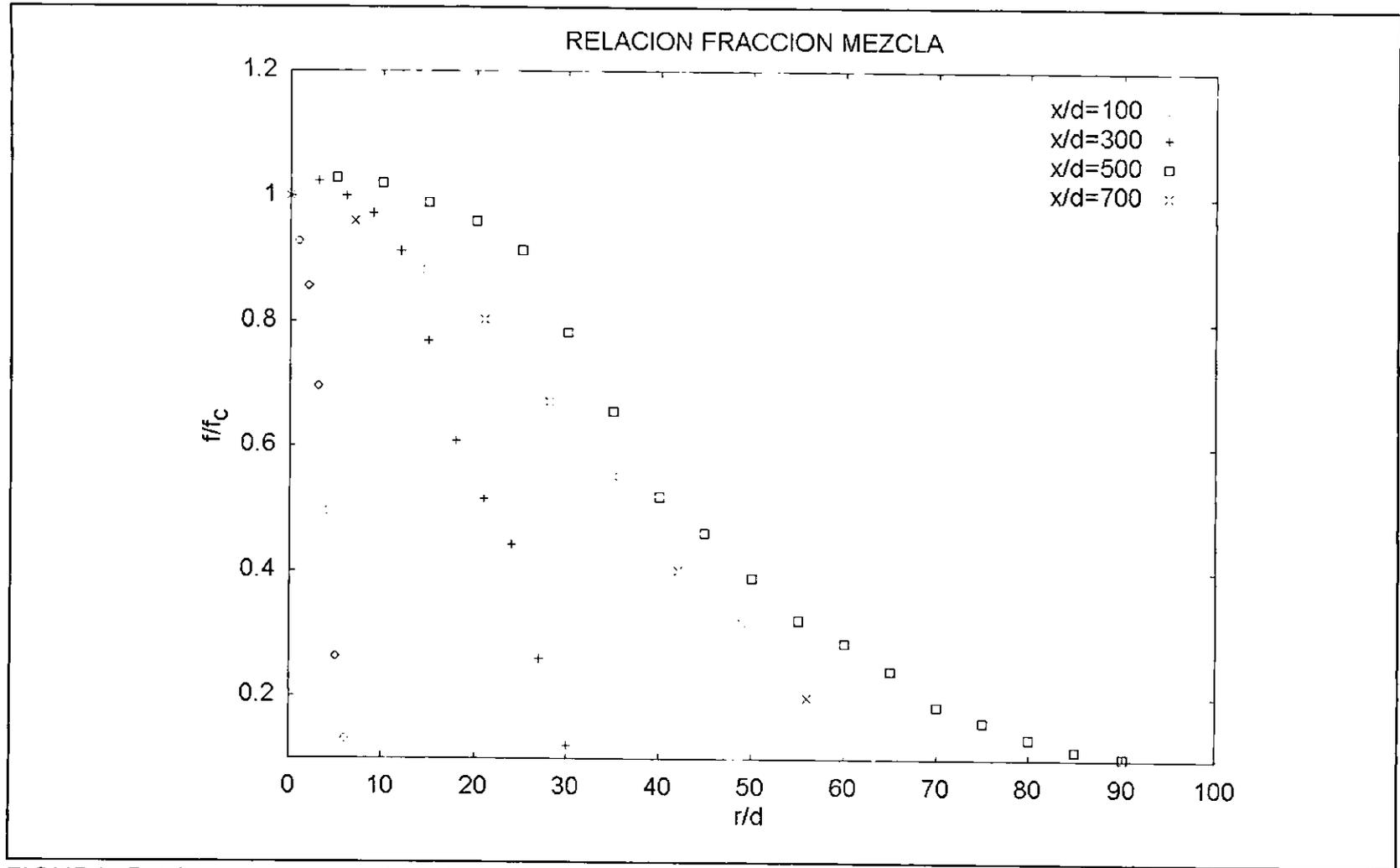


FIGURA 5.10 Variación de la relación de fracciones mezcla en dirección radial y como función de la distancia axial.

110 PROPUESTA DEL MODELO DE COMBUSTION

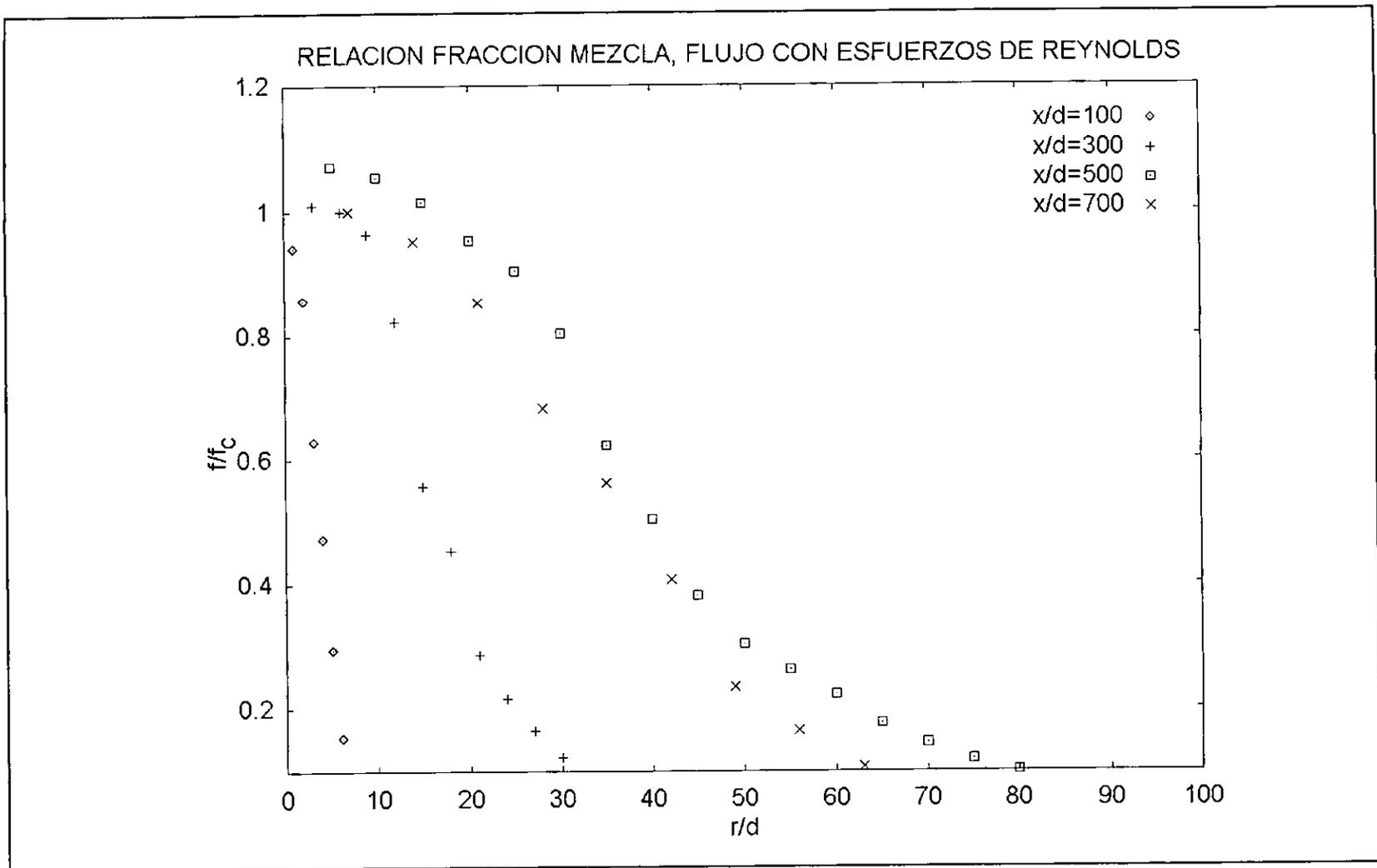


FIGURA 5.11 Variación de la relación de fracciones mezcla en dirección radial y como función de la distancia axial, incluyendo Esfuerzos de Reynolds en el flujo.

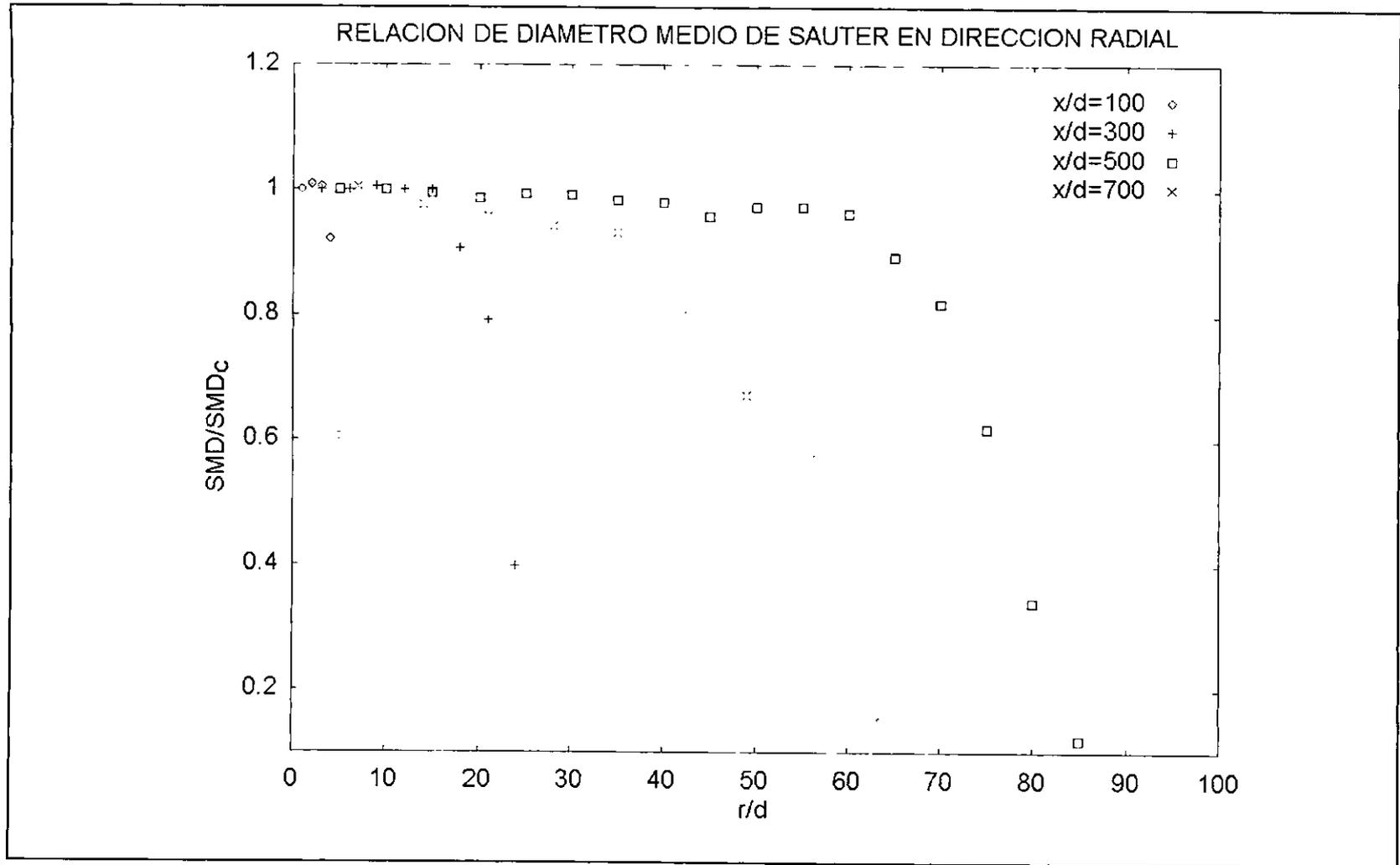


FIGURA 5.12 Variación de la relación de los Diámetros Medios Sauter (SMD) en dirección radial y como función de la distancia axial.

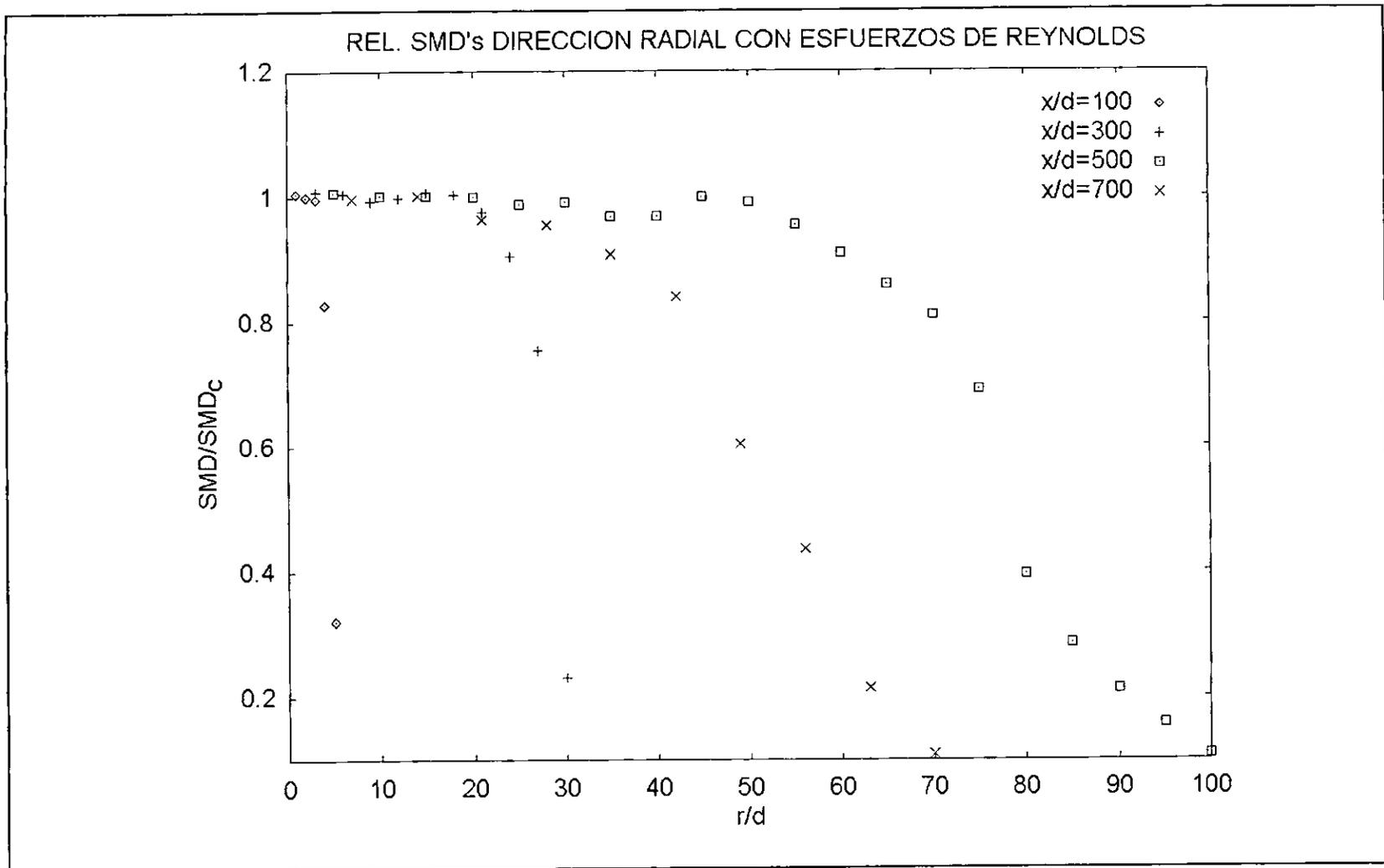


FIGURA 5.13 Variación de la relación de los Diámetros Medios Sauter (SMD) en dirección radial y como función de la distancia axial, incluyendo Esfuerzos de Reynolds en el flujo.

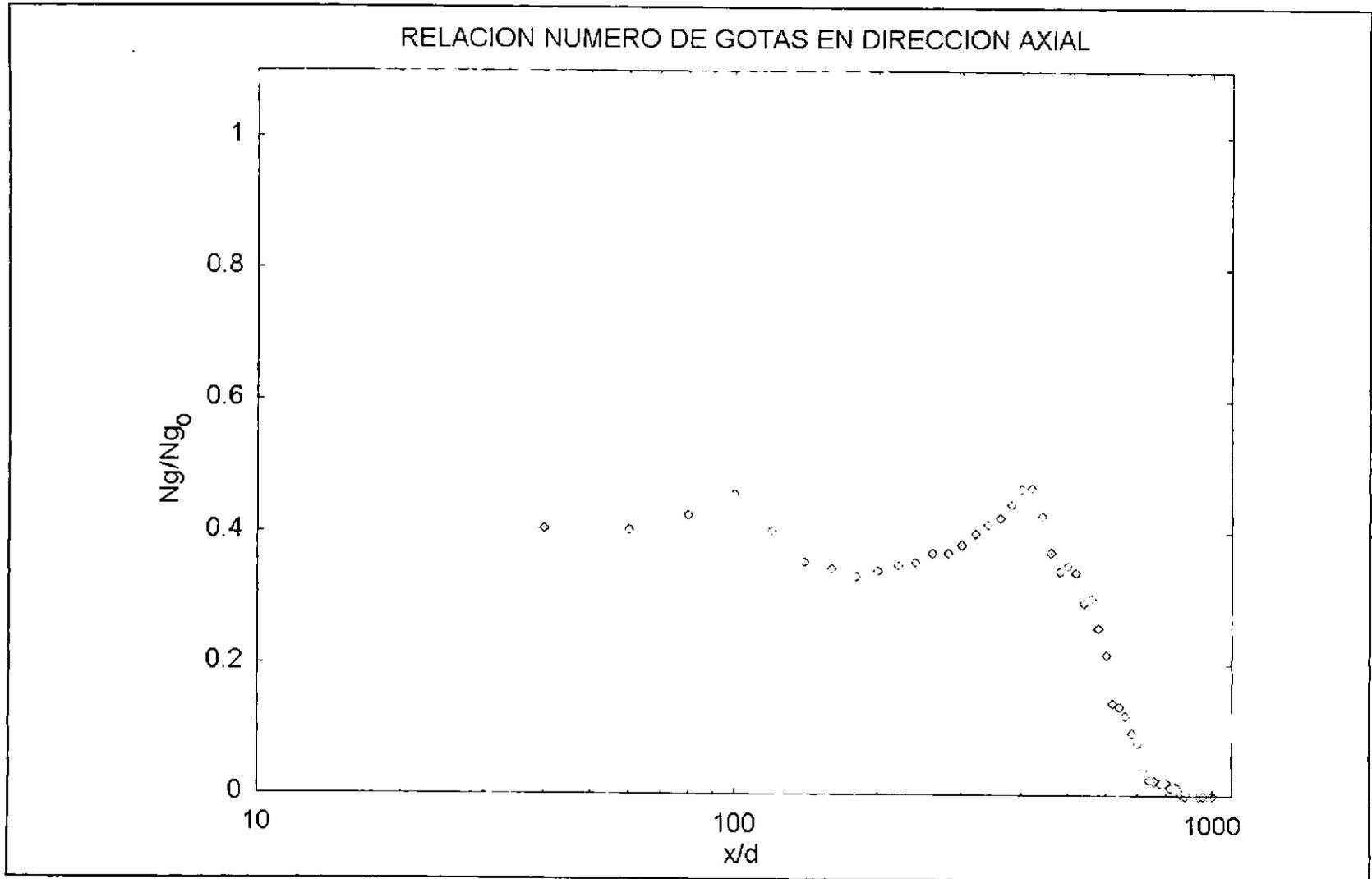


FIGURA 5.14 Variación de la relación del número de gotas con respecto al número de gotas de la primera celda y en función de la distancia axial.

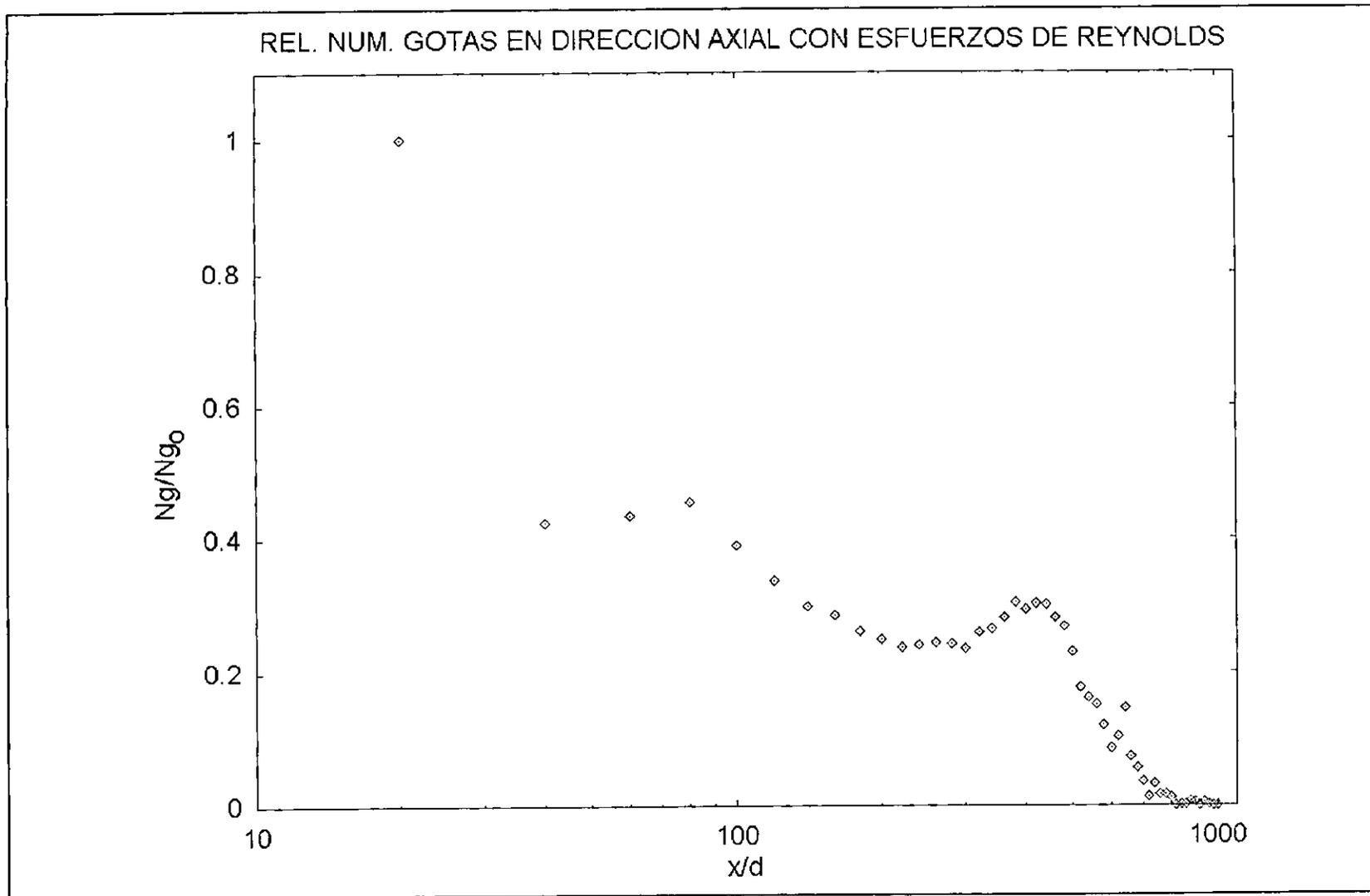


FIGURA 5.15 Variación de la relación del número de gotas con respecto al número de gotas en la primer celda como función de la distancia axial, incluyendo esfuerzos de Reynolds.

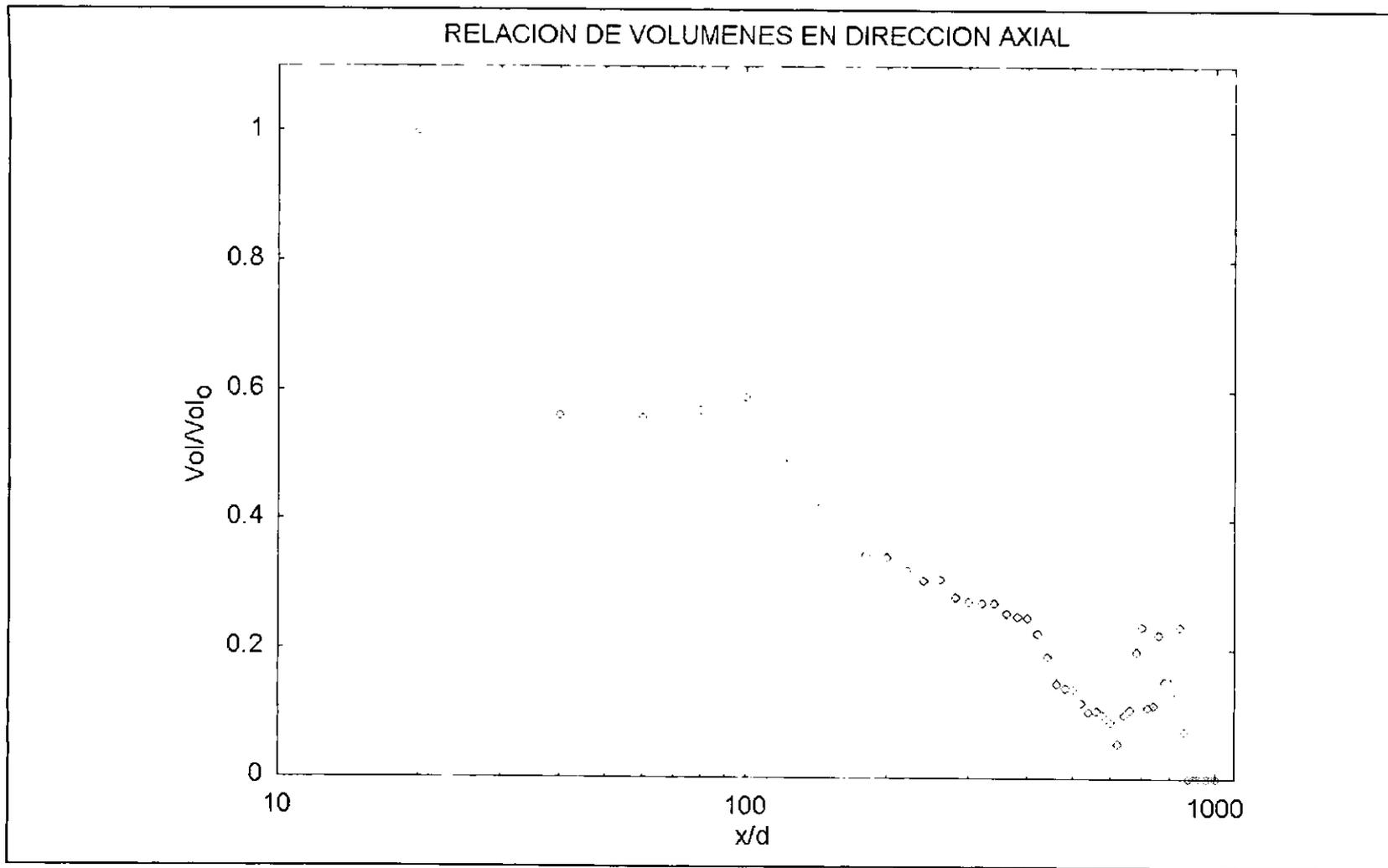


FIGURA 5.16 Variación de la relación de volúmenes con respecto al volumen de la primer celda y en función de la distancia axial.

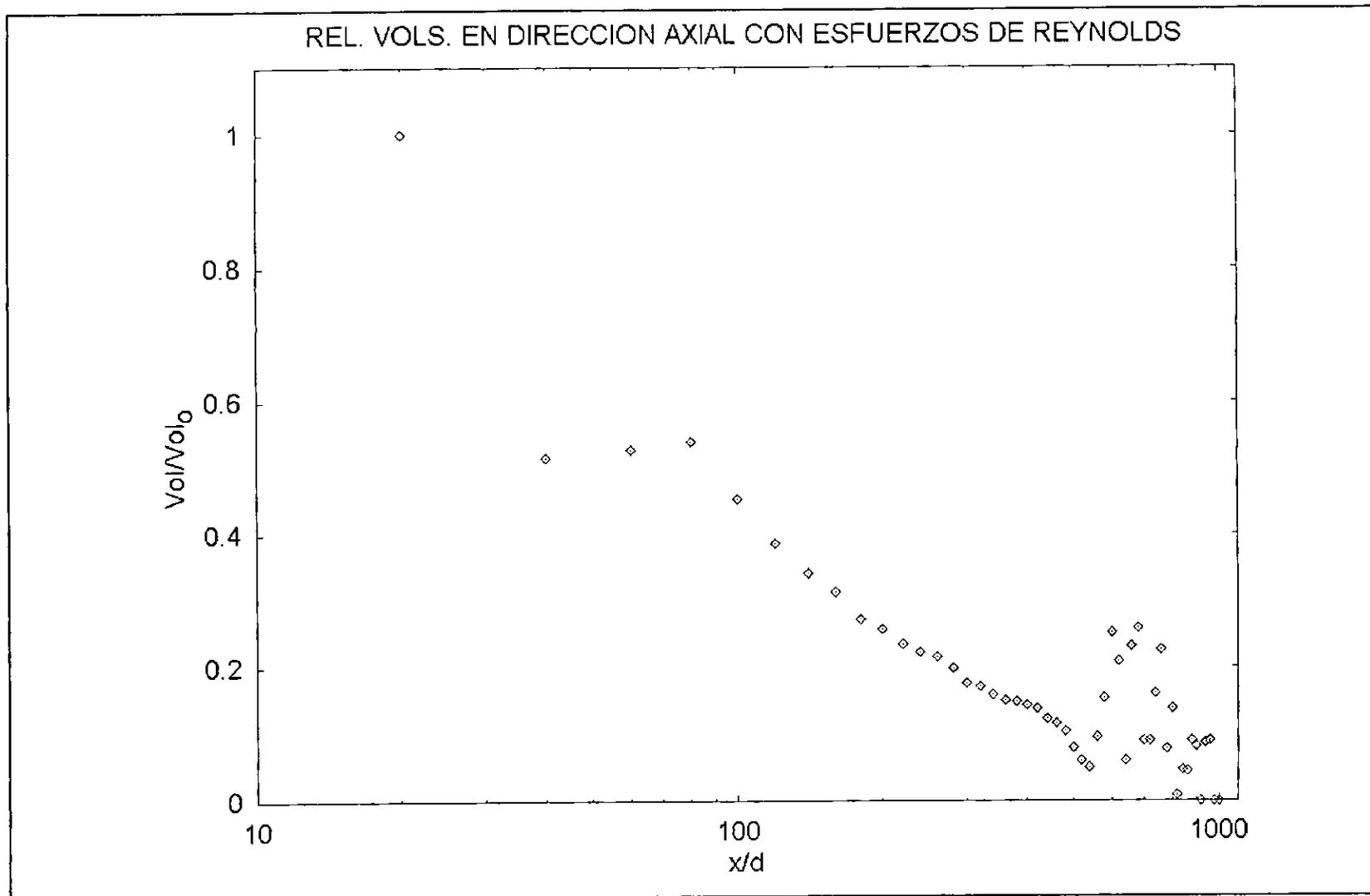


FIGURA 5.17 Variación de la relación de volúmenes con respecto al volumen de la primer celda y como función de la distancia axial, incluyendo esfuerzos de Reynolds.

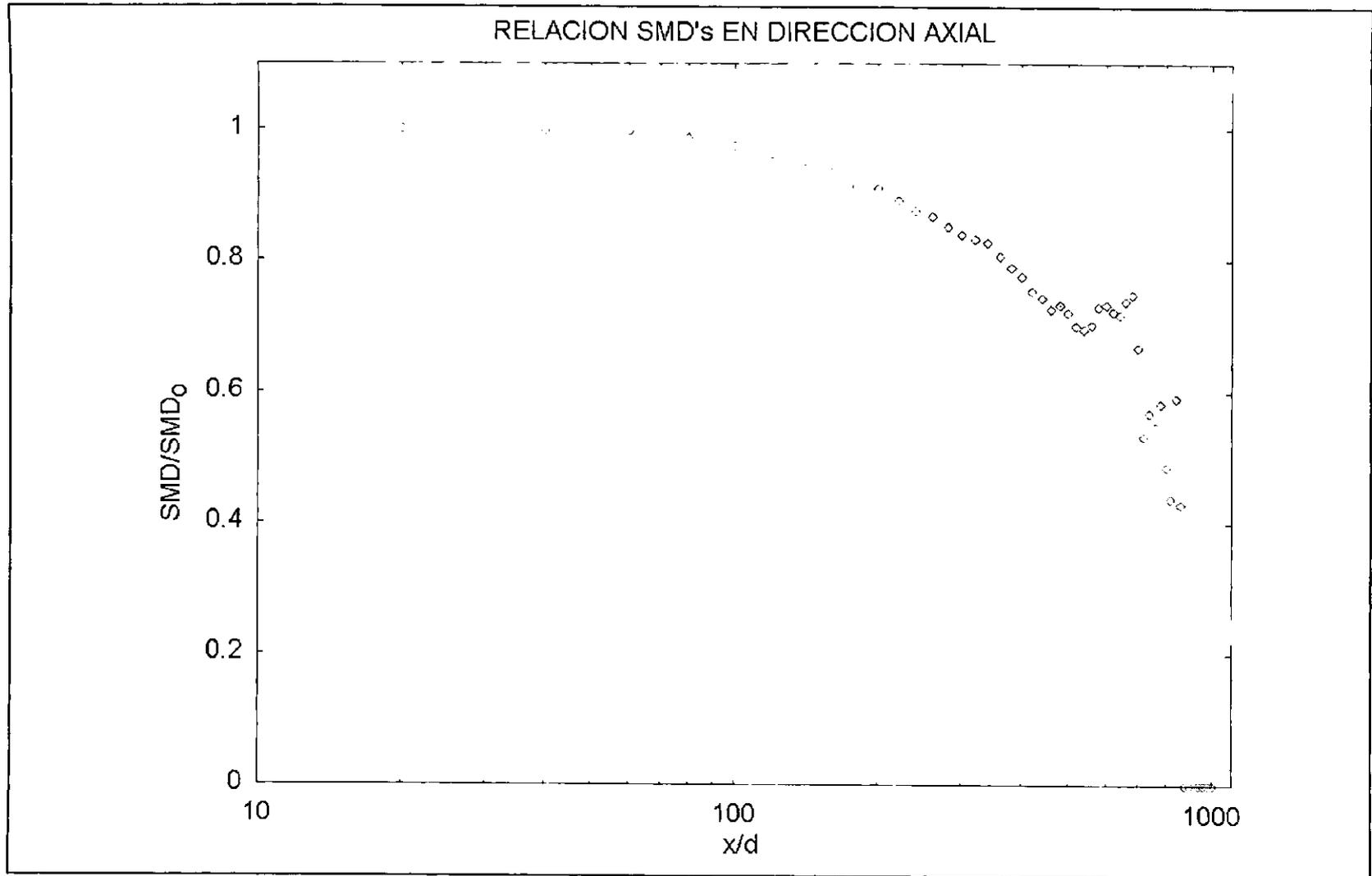


FIGURA 5.18 Variación de la relación del Diámetro Medio Sauter (SMD) con respecto al Diámetro Medio Sauter de la primer celda y como función de la distancia axial.

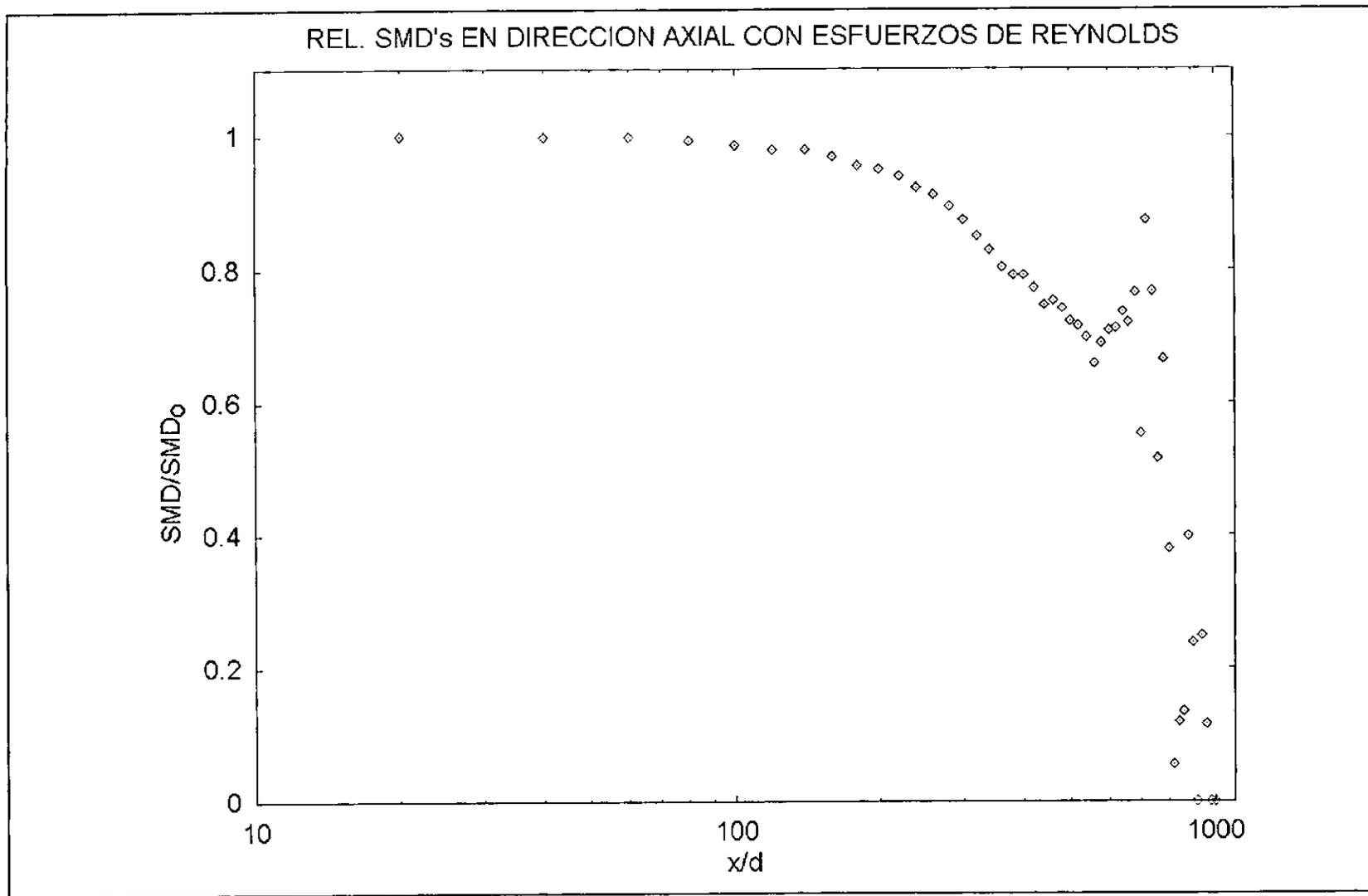


FIGURA 5.19 Variación de la relación del Diámetro Medio Sauter (SMD) con respecto al Diámetro Medio Sauter de la primera celda y como función de la distancia axial, incluyendo esfuerzos de Reynolds.

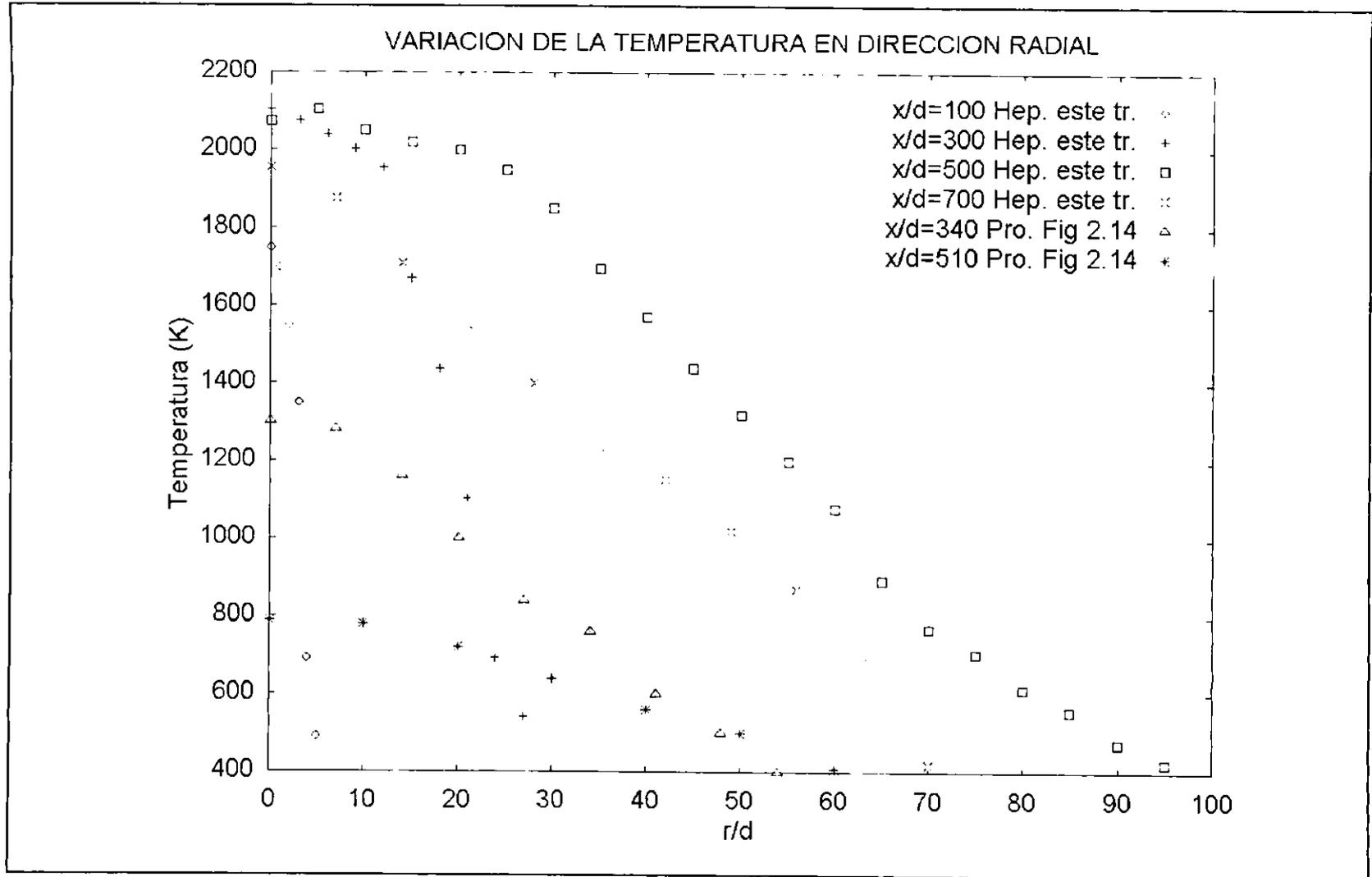


FIGURA 5.20 Variación de la temperatura en dirección radial calculada a partir del proceso de combustión.

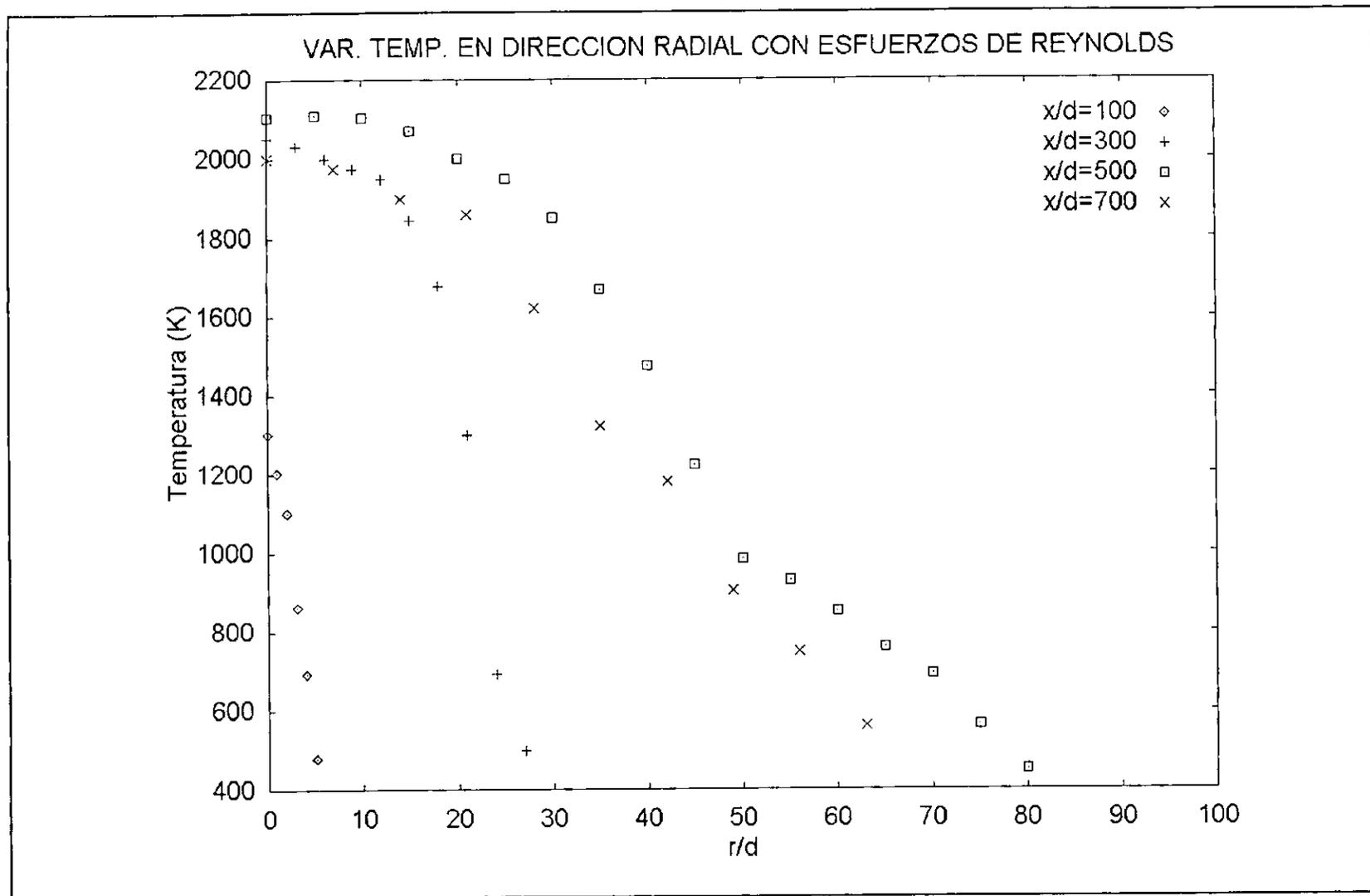


FIGURA 5.21 Variación de la temperatura en dirección radial calculada a partir del proceso de combustión, incluyendo esfuerzos de Reynolds.

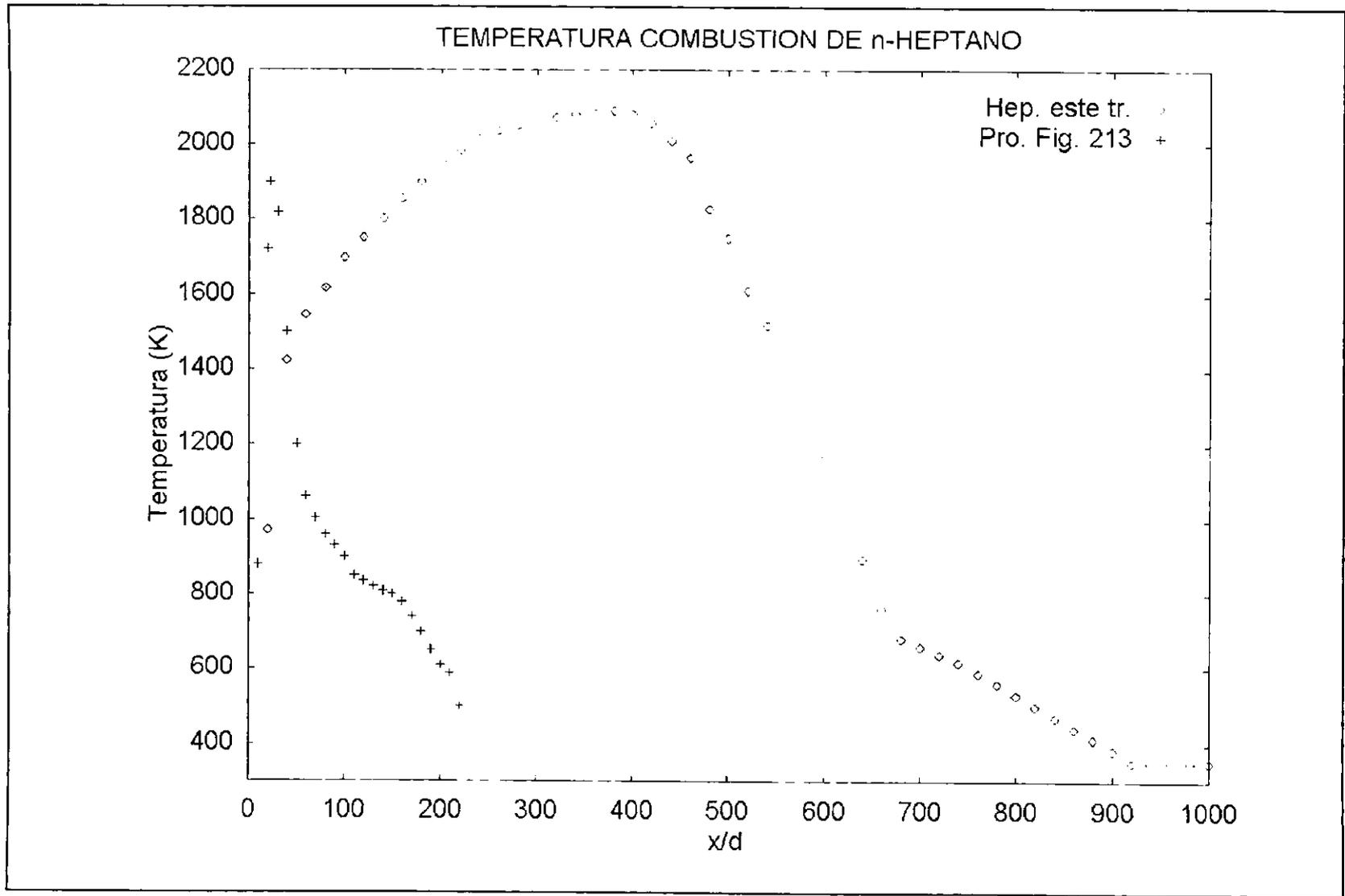


FIGURA 5.22 Variación de la temperatura en dirección axial calculada a partir del proceso de combustión.

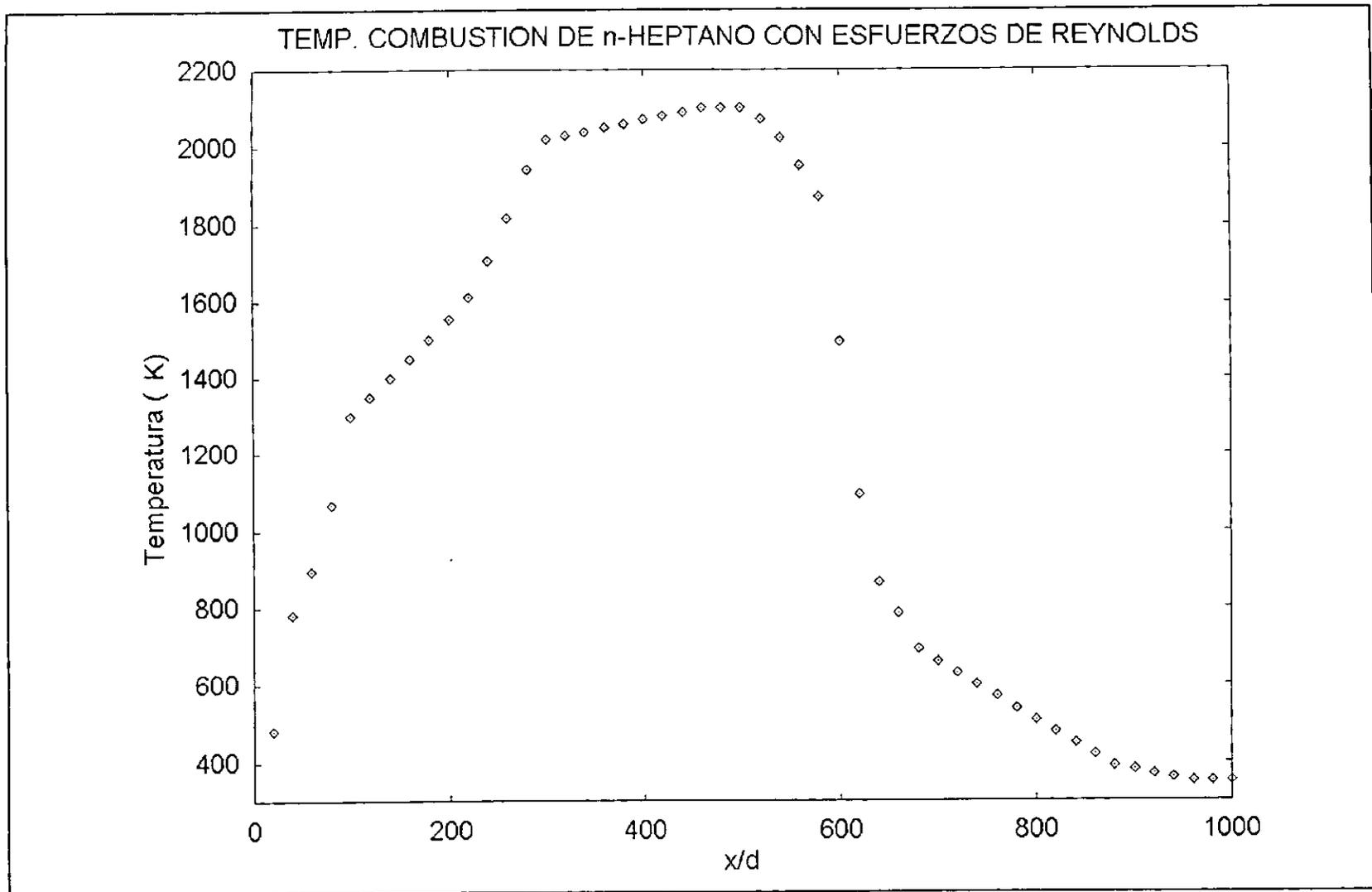


FIGURA 5.23 Variación de la temperatura en dirección axial calculada a partir del proceso de combustión, incluyendo esfuerzos de Reynolds.

## 6.- DISCUSION DE RESULTADOS.

En el sistema desarrollado para este trabajo hay que hacer notar que las suposiciones generales en las que se basa son :

El proceso se efectúa a presión atmosférica constante.

Las variaciones en las propiedades termodinámicas del flujo gaseoso se calculan como si fuera un gas ideal.

Se utiliza un SPRAY diluido, no se toma en cuenta la interacción entre gotas, por lo tanto, no hay coalescencia de gotas y tampoco se considera el fraccionamiento de las gotas de mayor tamaño.

Las reacciones químicas deben de efectuarse totalmente en :  $1 \times 10^{-3} < \text{tiempo} < 1 \times 10^{-8}$  segundos.

El tiempo de  $1 \times 10^{-8}$  segundos, se toma del trabajo de Glassman (23) con el fin evitar los cambios físicos que sufre el flujo en el momento que hay una explosión por una reacción química violenta.

El tiempo de  $1 \times 10^{-3}$  segundos es para asegurarse que las reacciones químicas se han completado. Este tiempo se determinó en el capítulo 4, haciendo uso de los cálculos y diagramas del apéndice 'C' y es básicamente el tiempo en que el reactante (combustible o aire) con concentración menor a la estequiométrica llega a  $1.0 \times 10^{-10}$  moléculas/cm<sup>3</sup> - segundo o menos, en este punto se asume que se da el equilibrio químico local.

Con los criterios anteriores, en este trabajo se obtuvo la gráfica de fracción mezcla de n-heptano contra la fracción masa lo cual se puede ver en las figuras 4.2 y 4.3, también se debe aclarar que el tiempo de  $1 \times 10^{-3}$  segundos señalado para que las reacciones químicas cumplan con el criterio de que uno de los reactantes llegue a una concentración menor a  $1.0 \times 10^{-10}$  moléculas/cm<sup>3</sup> - segundo, solo se cumple realmente para fracciones mezcla de n-heptano - aire entre 0.02 y 0.25 (ver el cuadro marcado en la figura 4.9). Finalmente se debe apuntar que la mezcla n-heptano - aire que se simula inyectar durante todo el proceso de formación y evolución del SPRAY, siempre es igual a la fracción mezcla estequiométrica cuyo valor es 0.067.

Tomando el tiempo de  $1 \times 10^{-3}$  segundos se inicia el proceso de formación y evolución del SPRAY.

El proceso de combustión se inicia una vez que se ha alcanzado el estado pseudo-estacionario en la formación/evolución del SPRAY, suponiendo que los reactantes combustible y aire están en las condiciones adecuadas de temperatura, presión y concentración para reaccionar, a partir de lo cual se hace el análisis posterior, para calcular las concentraciones de los productos y la temperatura, para lo cual se considera que el proceso se da adiabáticamente.

La parte de computo que se desarrollo en este trabajo, se realizo en lenguaje

de programación FORTRAN (SVS V2.8.2 1992), para una computadora personal, (IBM compatible con procesador 80486 a 33 Megahertz y con 8 Megabytes de Memoria RAM, con sistema operativo DOS 6.20), pero se hicieron pruebas adicionales en otra PC, (IBM compatible 80586 a 100 Megahertz y 12 Megabytes de RAM, con sistema operativo WINDOWS 95) y en una computadora MICRO VAX 3100 con 20 Megabytes de RAM 10.6 MEGAFLOPS, sistema operativo OPEN VMS VER. 7.00 y FORTRAN VMS 5.4). Los resultados en las tres computadoras cada una con su propio sistema operativo, son idénticos en cuanto a precisión; en cuanto a tiempo de trabajo, este es proporcional a la velocidad de su procesador. Por otro lado, se debe de anotar, que el único cambio necesario para ejecutar los programas en FORTRAN, es modificar las rutinas de llamado de los números aleatorios que se generan a partir del reloj integrado en las computadoras (la semilla que se ocupa para generar un número aleatorio puede leer hasta las milésimas de segundo del reloj integrado).

El trabajo se presenta como la unión o acoplamiento de dos grandes procesos (dinámica de fluidos y equilibrio químico local) que se desarrollan en forma independiente y como parte final se ve su interacción.

### 6.1.- EVOLUCION DE LA MEZCLA AIRE - COMBUSTIBLE.

El sistema en que evoluciona el spray necesita de la determinación del tamaño de gota mínimo que existe como tal antes de evaporarse e integrarse totalmente al flujo localmente homogéneo 'LHF', para obtener este criterio, se tomo una distribución de tamaños de 100 gotas, la cual tiene asociada una distribución de velocidades de gotas, generando así el SPRAY, al cual se le varia la velocidad de inyección del aire en un rango de 5 m/s hasta 35 m/s, con intervalos de 1 m/s. Se trazaron cuatro variables que son :

Tiempo en milisegundos, Radio de gota en micras, Velocidad de gota en m/s y Fuerza de Stokes en décimas de Newton ( $\text{kg/m}\cdot\text{s}^2$ ). A partir de estas variables se obtienen las correlaciones de :

Tiempo contra tamaño de gota.

Tiempo contra velocidad.

Tiempo contra fuerza de Stokes.

Radio contra velocidad.

Radio contra fuerza de Stokes.

Velocidad contra fuerza de Stokes.

Las principales observaciones de estas correlaciones son :

El tamaño de gota desciende como una función de temperatura - tiempo y es independiente de la velocidad con que se inyecte el aire, ya que se obtiene una pendiente inversamente proporcional al tamaño de gota.

La velocidad de las gotas no varía directamente como una función del tiempo, depende más de factores asociados a el, como la velocidad del aire y la evaporación.

En la correlación de tiempo contra radio se puede determinar que a mayor tiempo menor tamaño de gota, hasta llegar a un valor mínimo que podemos suponer asintótico, (esto no se puede determinar ya que la evaporación a radios pequeños es muy elevada y cuando se calcula la misma aplicando la ley del diámetro cuadrado a gotas de radio menor a 15 micras, en una milésima de segundo el radio da un valor negativo (este resultado solo tiene significado numérico no físico), en este momento es cuando se puede observar mas claramente que la ley del diámetro cuadrado y el modelo de KELVIN (2) que relaciona la tensión superficial con la evaporación concuerdan.

Al analizar las variación de tiempo contra fuerza de Stokes se obtienen diferencias con respecto a la velocidad del gas, esto debido a que la distribución de tamaños de gota y velocidades se mantuvo fija, lo que se puede observar es que si la velocidad del aire es menor e igual a 15.0 m/s se encuentran fuerzas de Stokes negativas (sin significado físico).

La variación de radio contra velocidad muestran que, independientemente del tamaño y de la velocidad inicial de la gota, se llega a un valor mínimo de velocidad para radios menores de 40 micras, mientras que la relación de radio contra fuerza de Stokes presentan siempre el primer valor mínimo, la fuerza empieza a incrementarse, llega a un máximo y luego vuelve a descender. Independientemente del tamaño inicial de la gota para radios menores a 40 micras, presentan la misma fuerza de Stokes.

La velocidad contra fuerza de Stokes, presenta que la disminución de la velocidad de las gotas, se incrementa la fuerza de Stokes, hasta llegar a un máximo, descendiendo posteriormente hasta llegar a una velocidad de gotas aproximadamente al 30% de la velocidad del flujo gaseoso. Esto sucede para diámetros menores a 40 micras y por lo tanto esto da una fuerza de Stokes cercana a cero (siempre con valor positivo).

De estas observaciones se puede, en forma general, expresar que las gotas con radios menores a 40 micras tienen una velocidad que es aproximadamente el 30% de la velocidad inicial del flujo gaseoso y que la evaporación es inversamente proporcional al tamaño de la gota.

## **6.2.- CINETICA QUIMICA DE LA MEZCLA AIRE - COMBUSTIBLE.**

Por cada gramo de combustible (n-heptano), se necesitan 15.106 gramos de oxígeno, razón por lo cual, ligeras variaciones en la cantidad de combustible hacen que el oxígeno sufra un descenso acelerado y que solo fracciones mezcla de combustible menores a 0.067 presenten exceso de oxígeno; después de lo

cual el combustible empieza a incrementar su presencia, lo mismo que la cantidad de monóxido de carbono que tiene mayor concentración que el dióxido de carbono (ver figuras 4.6, 4.7 y 4.8), lo cual indica que la combustión ya no es eficiente.

Si observamos las gráficas de la evolución temporal de la concentración de los productos y reactantes principales que intervienen en el mecanismo cinético de reacción para fracciones de mezcla en el estequiométrico y cercanas (0.03 - 0.25, ver figuras 4.6, 4.7 y 4.8), el tiempo para alcanzar el equilibrio químico local (EQL) es menor a 0.001 segundos. Esto es importante en este sistema, ya que con el se hace la generación y evolución del spray, en base a ello podemos considerar que la temperatura y concentración de especies la podemos obtener si conocemos la fracción mezcla de combustible.

Las temperaturas adiabáticas, se muestran en las figuras C.1 y C.2 del APENDICE C, los resultados para combustión de n-heptano y propano calculados se comparan con datos de propano y pentano de la literatura (18, 39). Las temperaturas calculadas tienen un valor entre 5 y 30 % mayor al que se reporta en la literatura (18, 39). La diferencia se debe a que para calcular la temperatura adiabática (ecuación C.2), se considera un cambio total de entalpía igual a cero, por lo tanto la entalpía de los reactantes se iguala a la entalpía de los productos. Como la entalpía de los reactantes es constante para ambos casos, pero la sumatoria de la entalpía de los productos es diferente habrá una diferencia en las temperaturas calculadas. En este trabajo solo se consideran como productos dióxido de carbono ( $\text{CO}_2$ ) y agua ( $\text{H}_2\text{O}$ ), más aire, n-heptano o propano en exceso; en cambio para los resultados de Faeth (18) y Kuo (39) se incluyen entre los productos finales de combustión la concentración de especies como : heptilo  $\text{C}_7\text{H}_{15}$ , isoamilo  $\text{C}_5\text{H}_{11}$ , butilo  $\text{C}_4\text{H}_9$ , buteno  $\text{C}_4\text{H}_8$ , radical buteno  $\text{C}_4\text{H}_7$ , butadieno, propil  $\text{C}_3\text{H}_7$ , propileno  $\text{C}_3\text{H}_6$ , etc. los cuales tienen diferentes calores estándar de formación, desprenden o absorben diferentes cantidades de calor, dando como resultado final una diferente temperatura adiabática.

La figura 4.7 donde se muestra  $t(\text{s})$  contra concentración para la fracción mezcla (0.06) estequiométrica, se puede observar que el descenso en las concentraciones de oxígeno y combustible para un tiempo cercano a  $2 \times 10^{-5}$  segundos. En estas condiciones se tiene la mayor cantidad de dióxido de carbono, vapor de agua y monóxido de Carbono.

El vapor de agua tiene un tiempo de formación aproximado de  $1 \times 10^{-5}$  segundos en el cual alcanza el máximo, a partir de donde se mantiene constante el resto del tiempo.

### 6.3.- PROPUESTA DEL MODELO DE COMBUSTION.

El modelo propuesto para este trabajo, muestra en la figuras 2.15 y 3.5

perfiles de temperaturas contra distancia con simetría axial y radial, de acuerdo con las figuras 5.8 y 5.9 que presentan los resultados de la distribución de gotas en este trabajo (de aquí dependen la fracción mezcla y a través de esta la temperatura), se puede observar que los resultados a las distancias  $x/d = 300$  y  $x/d = 700$ , no muestran el comportamiento que debiera de esperarse en distancias con simetría axial como los son  $x/d = 300$  y  $x/d = 700$ . De las figuras 5.10 y 5.11 se observa que a la distancia de  $x/d = 700$  los valores de fracción mezcla se presentan a valores mayores de  $r/d$ , que para la distancia  $x/d = 300$ . Comportamiento similar se encuentra en las figuras 5.12 y 5.13, lo cual sugiere que los perfiles del número de gotas, fracción mezcla y diámetro medio de Sauter (SMD) para  $x/d = 700$  tienen una forma diferente (más redondeada) hacia el final de los mismos, esto se debe a que no se consideran las fuerzas de gravedad, ni la aceleración centrífuga en la evolución y distribución de las gotas de combustible y por lo tanto se presenta una mayor dispersión de la que se esperaría de acuerdo con la simetría del perfil originalmente propuesto.

El proceso de evolución del spray muestra que en un flujo con esfuerzos de Reynolds, siempre habrá un menor tiempo de evolución antes de evaporarse totalmente las gotas, lo cual se puede ver en la figura 5.5, en donde a tiempos muy pequeños, (menores a 0.1 segundos), la mayor evaporación es para flujo sin esfuerzos de Reynolds. Como confirmación de los resultados de esta figura se pueden ver las figura 5.6 y 5.7. En la figura 5.6 en donde la relación de tamaños con respecto al tamaño inicial, muestra el tiempo en que las gotas se integran totalmente en el flujo gaseoso, en la figura 5.7 se puede observar que en un flujo sin esfuerzos de Reynolds hay un mayor tiempo y número de gotas para alcanzar el estado pseudo-estacionario.

Las distribuciones del número de gotas (ver figuras 5.8 y 5.9) que se tienen en el centro de simetría del sistema, no muestran una variación determinante en flujo con o sin esfuerzos de Reynolds.

En las relaciones de fracción mezcla, se puede ver en las figuras 5.10 - 5.11, que para los cálculos con esfuerzos de Reynolds y valores  $x/d$  iguales o mayores a 100 la relación de fracción mezcla se dan a un valor mayor de  $r/d$ .

Las relaciones de Diámetro Medio Sauter mostradas en las figuras 5.12 - 5.13, indican que sí tiene influencia la inclusión de los esfuerzos de Reynolds, ya que para las mismas distancias en la coordenada axial ' $x/d$ ' hay un desplazamiento a valores mayores de ' $r/d$ ' cuando se incluyen los esfuerzos de Reynolds.

Las relaciones de # gotas en las figuras 5.14 - 5.15, volúmenes 5.16 - 5.17 y Diámetro Medio Sauter 5.18 - 5.19, muestran que sí tiene influencia la inclusión de los esfuerzos de Reynolds en la coordenada axial ' $x/d$ '. En forma general, los parámetros analizados # de gotas, Volumen y Diámetro Medio Sauter, presentan la misma tendencia pero con menores variaciones cuando no

están presentes en la simulación los esfuerzos de Reynolds.

La temperatura calculada en función de la coordenada radial (ver figuras 5.20 y 5.21), muestra que la temperatura calculada para un flujo con esfuerzos de Reynolds, a una distancia de 100 diámetros del atomizador, es menor en aproximadamente en 400 K para cada punto que se calcula para los radios ' $r/d$ ' menores a 0.04. Esto se debe a que el número de gotas y el volumen de combustible en las mismas es menor en esa posición, lo cual concuerda con la temperatura en dirección axial que se calcula para el centro del ducto, esto se puede ver en la figura 5.22 que tiene el máximo de temperatura aproximadamente a 400 diámetros del atomizador y en la figura 5.23 cuyo máximo de temperatura se localiza alrededor de los 500 diámetros del atomizador.

Como se carece de datos experimentales, la comparación de los resultados del modelo propuesto se hace mediante los datos de combustión de propano que se encontraron en la literatura (18). Para poder analizar los resultados hay que tener en cuenta la siguiente información de los combustibles :

Presión de vapor de propano = 760 mm Hg a  $-42.1\text{ }^{\circ}\text{C}$  (48).

Presión de vapor de n-heptano = 760 mm Hg a  $98.4\text{ }^{\circ}\text{C}$  (48).

Calor de combustión de propano = 12.059 Kcal/g (48).

Calor de combustión de n-heptano = 11.513 Kcal/g (48).

Diferencia en las temperaturas adiabáticas entre n-heptano y propano calculados y los resultados presentados en la literatura (18, 39), porque consideran diferentes productos finales para calcular el balance entalpico, ver APENDICE C.

Las 0.546 Kcal de más que presenta el propano por gramo al compararlo con el n-heptano, se puede ver que incide en el calculo de una mayor temperatura adiabática (ver APENDICE C), sin embargo al calcular los balances por mol de combustible, el n-heptano aporta 1151 Kcal/mol, mientras que el propano solo proporciona 530.625 Kcal/mol, esta diferencia de calor se aporta a los productos de la reacción química y por ello es diferente la distribución de temperaturas tanto en dirección axial como radial.

Teniendo en cuenta esta información se puede observar en la figura 5.20 que para distancias similares de  $x/d$  (300 y 340) ó  $x/d$  (500 y 510) con estos combustibles la temperatura en la dirección radial muestra una diferencia de hasta 1000 K, la cual probablemente se deba a las diferencias en el calor de combustión y la distribución radial de la mezcla aire - combustible.

En la figura 5.22 se presentan los perfiles de temperatura para la combustión de propano y n-heptano en el centro del ducto, de esta figura se puede inferir que los perfiles de temperatura en dirección axial, no tienen la misma longitud, porque el n-heptano tiene un tiempo de evolución espacio temporal debido a que presenta una fase líquida a temperaturas menores a  $98.4\text{ }^{\circ}\text{C}$ , mientras que

el propano es totalmente gaseoso a temperaturas mayores a  $-42.1\text{ }^{\circ}\text{C}$ . Esta diferencia origina que el máximo de temperaturas de los perfiles no coincida en la distancia ( $x/d$ ) que hay al difusor de aire-combustible (atomizador).

#### **6.4 ACOPLAMIENTO.**

El modelo desarrollado en este trabajo, nos permite simular y estudiar la combustión de sprays, en donde se puede incluir un spray real con su distribución de tamaños y velocidades, el cual puede ser modificado por las variables de dinámica de fluidos mediante el método desarrollado por Faeth et al (18) y es aquí en donde pueden incorporarse algunas características de la turbulencia. En forma general se pueden incluir una cinética química mas detallada que la que se encontró en la literatura e incorporar un método iterativo para resolver ecuaciones diferenciales ordinarias (EDO).

## 7.- CONCLUSIONES.

Se ha desarrollado un sistema de cómputo mediante el cual se pueden estudiar los cambios en la dinámica de fluidos que ocurren antes de que se dé la mezcla aire - combustible, con los fenómenos y reacciones que se dan durante el mezclado. El sistema de cómputo se ha implementado en tres diferentes plataformas, (procesador -sistema operativo), y puede modelar la dinámica de fluidos basado en las ecuaciones de balance, acopladas con algunas suposiciones que le permiten incluir el proceso de evaporación y analizar el flujo de aire - combustible líquido durante todo el proceso de combustión.

En la simulación de los procesos de combustión que hay en la literatura, normalmente se utilizan mecanismos cinéticos de reacción global, que en cuatro o cinco reacciones químicas describen todo el proceso, en este trabajo el proceso de combustión se simula con mecanismo cinético de reacción con 35 especies y 111 reacciones.

Se encontró la relación de las fracciones mezcla de aire - combustible y los intervalos de tiempo que nos permiten el acoplamiento del equilibrio químico local con la evolución dinámica del fluido, a partir de esto se puede simular el proceso de combustión de hidrocarburos líquidos ligeros.

En el desarrollo de la parte química, se encontró que con el mecanismo utilizado, las fracciones mezcla de combustible (n-heptano) entre 0.02 y 0.25, reaccionan totalmente en menos de 0.001 segundos, a partir de esta información se desarrolló el sistema de atomización en donde se considera que se inyecta la mezcla aire-combustible estequiométrica (0.067), por lo cual, es muy probable, que la mayoría de las celdas con que se analiza la dispersión del spray contengan fracciones mezcla de n-heptano en ese rango.

A partir de los resultados que se han obtenido podemos afirmar que :

La ley del diámetro cuadrado que se usó para modelar el proceso de evaporación presenta una mayor evaporación a menor tamaño de gota, lo cual concuerda con el modelo de KELVIN (2) que indica que la tensión superficial disminuye proporcionalmente al tamaño de gota y por lo tanto hay mayor evaporación. Se encontró que el proceso de atomización- evaporación se puede evaluar con facilidad y precisión cada milésima de segundo (0.001 segundos).

El tamaño de gota decrece únicamente como función de la temperatura, el tiempo y el tamaño de la misma antes de efectuar el calculo, siendo la evaporación inversamente proporcional al tamaño, e independiente de la

## **OBSERVACIONES Y SUGERENCIAS**

En este trabajo se ha modelado la combustión de los Hidrocarburos con menos de 10 Carbones, pero si se quiere ampliar la utilidad y aplicación de este trabajo se requieren dos modificaciones principales que son :

En la parte de cómputo, se requiere que la presentación gráfica de los resultados muestre en forma interactiva la evolución del flujo así como los perfiles de temperatura y concentración.

En la parte química es necesario incluir un mecanismo cinético de reacción para aceites residuales pesados, ya que en la actualidad, más del 60% de la generación eléctrica del país se hace con este tipo de combustible.

La línea de trabajo que se desarrolló no esta terminada, sino al contrario, lo que se ha obtenido es una herramienta básica que nos permitirá estudiar otros mecanismos, otros combustibles, etc. Una modificación inmediata y de gran utilidad sería incluir y caracterizar las reacciones de oxidación de nitrógeno ya que es uno de los compuestos que más incide en la formación de contaminantes como el OZONO ANTROPOGENICO, la LLUVIA ACIDA, etc.

velocidad inicial del flujo.

La evolución del radio mínimo de la gota que se puede determinar numéricamente es de 15 micras, aunque la velocidad de la gota se aproxima al 30% de la velocidad del flujo de aire correspondiente a partir de las 40 micras.

En la parte de equilibrio químico local se propone que cuando la concentración de uno de los reactantes tenga un valor menor a  $1 \times 10^{-10}$  moléculas/cm<sup>3</sup>-s, se de por terminado el proceso de reacción química. Esto se puede corroborar con las tablas de velocidad de reacción y las gráficas correspondientes en el APENDICE C. Esto es lo que se considera como Equilibrio Químico Local (EQL) homogéneo y a partir de éste se generan los diagramas de composición, densidad, temperatura, concentración, etc. Esto permite de una forma fácil y rápida, manejar la parte química del proceso de combustión.

Como la cantidad de oxígeno necesaria para reaccionar con cada gramo de combustible (HIDROCARBURO-ALKANO) es mayor de 12 a 1, la velocidad de disminución del oxígeno se incrementa rápidamente para las fracciones mezcla de combustible-aire mayores a la fracción mezcla estequiométrica.

Finalmente se ha generado una interfase entre el sistema de dinámica de fluidos y la técnica para analizar el equilibrio químico local (EQL), que permite modificar interactivamente los parámetros de producción del spray y los mecanismos cinéticos de reacción, lo cual es importante para estudiar diferentes sistemas de combustión (combustible, atomización, etc.).

En la evaluación del sistema acoplado se ha encontrado que :

La evolución del spray con esfuerzos de Reynolds presenta un menor tiempo de evolución antes de evaporarse totalmente las gotas.

Las distribuciones de tamaños, con respecto a la gotas que se tienen en el centro de simetría del sistema, no muestran una variación determinante en flujo con o sin esfuerzos de Reynolds.

La temperatura calculada en la dirección radial muestra que siempre es mayor cuando al flujo se le considera afectado por esfuerzos de Reynolds.

El número de gotas, volumen y Diámetro Medio Sauter en dirección axial, muestran una menor dispersión de las variables cuando se le incluyen los esfuerzos de Reynolds.

## BIBLIOGRAFIA

- 1.- Abramzon B. and Sirignano W.; "Approximate Theory of a Single Droplet Vaporization in a Convective Field: Effects of Variable Properties, Stefan Flow and Transient Liquid Heating"; *INT. J. Heat Mass Transfer* 32(9), 1605-1618 (1989).
- 2.- Aveyard R. and Haydon D.; "An Introduction to the Principles of Surface Chemistry"; Cambridge University Press (1973).
- 3.- Bender E.; "An Introduction to Mathematical Modelling"; John Wiley and Sons (1978).
- 4.- Benson Sidney W.; "The Foundations of Chemical Kinetics."; Mc. Graw Hill (1960).
- 5.- Benson Sidney W.; "Calculos Químicos una Introducción al uso de las Matemáticas en la Química"; Limusa (1965 - 1978).
- 6.- Benson Sidney W.; "Thermochemical Kinetics, Methods for the Estimation of Thermochemical Data and Rates Parameters"; John Wiley and Sons, (1976).
- 7.- Bilger R.; "Turbulent Jet Diffusion Flames"; *Prog. Energy Combust. Sci.* 1, 87-109 (1976).
- 8.- Bird R., Stewart W., Lightfoot E.; "Fenómenos de Transporte"; Reverte (1978).
- 9.- Birkan M. and Law C.; "Asymptotic Simulation of the Four-Step Global Kinetics of Hydrocarbon/Air Mixtures Under Flow Reactor Conditions"; *Comb. Sci. and Tech.* 51, 145-207 (1987).
- 10.- Brzustowski T.; "The Effect of Fluctuations in Temperature and Oxygen Concentration on the Lifetime of a Fuel Droplet"; *Comb. Sci. and Tech.* 35, 59-79, (1983).
- 11.- Carnahan B., Luther H., Wilkes J.; "Calculo Numérico (métodos, aplicaciones)"; Rueda (1979).
- 12.- Chen J., Card J., Day M. and Mahalingam S.; "Direct Numerical Simulation of Turbulent Non-Premixed Methane-Air Flames"; 8th International Symposium on Transport Phenomena in Combustion, July 17 - 20 (1995).

- 13.- Cliffe K., Lever D. and Winters K.; "Comparison of a Continuum Model of Spray Combustion with Experiment"; Theoretical Physics Division, AERE Harwell, (1979).
- 14.- Constantinides A.; "Applied Numerical Methods with Personal Computers"; Mc. Graw Hill (1987).
- 15.- De Groot S., Mazur P.; "Non-Equilibrium Thermodynamics"; North Holland (1962).
- 16.- Echehki T., Chen J., Card J. Mahalingam S.; "Direct Numerical Simulations of Turbulent Premixed Methane-Air Flames Modeled with Reduced Kinetics"; Tenth Symposium on Turbulent Shear Flows, August 14 - 16 (1995).
- 17.- Faeth G.; "Current Status of Droplet and Liquid Combustion"; Prog. Energy Combust. Sci., 3, 191, 224 (1977).
- 18.- Faeth G.; "Evaporation and Combustion of Sprays"; Prog. Energy Combust. Sci., 9, 1, 76, (1983).
- 19.- Faeth G.; "Mixing, Transport and Combustion in Sprays"; Prog. Energy Combust. Sci., 13, 293-345 (1987).
- 20.- Gardiner W. Jr., Olson D.; "Chemical Kinetics of High Temperature Combustion"; Ann. Rev. Phys. Chem., 31, 377-379 (1980).
- 21.- Gardiner W. Jr.; "Combustion Chemistry"; Springer-Verlag (1984).
- 22.- Gear W.; "Numerical Initial Value in Ordinary Differential Equations"; Prentice Hall (1971).
- 23.- Glassman I.; "Combustion"; Academic Press (1987).
- 24.- Godsave G.; "Studies of the Combustion of Drops in a Fuel Spray, the Burning of Single Drops of Fuel"; Fourth Symp. Int. on Combustion, 813-830 (1953).
- 25.- Gosman A., Ionnides D., Lever A. and Cliffe A.; "A Comparison of "Continuum" and "Discrete Droplet" Finite-Difference Models Used in the Calculation of Spray Combustion in Swirling, Turbulent Flows"; Theoretical physics division, AERE Harwell, Oxfordshire (1980).
- 26.- Gopal P., Sirignano W., Dwyer H. and Sanders B.; "A Numerical

Technique for the Solution of a Vaporizing Fuel Droplet"; 10th Icders, Berkeley California (1985).

27.- Hedley B., Nuruzzman S., Martin F.; "Combustion of Single Droplets and Simplified Spray Systems"; Jou. Ins. Fuel, 44, 38-54, (1971).

28.- Hidaka Y., Gardiner, W. Jr. and Eubank S.; "Shock Tube and Modeling Study of the Ignition Chemistry of Small Hydrocarbons" ; J. Mol. Sci. 2, 141-189, (1982).

29.- Hindmarsh C.; "Gear : Ordinary Differential Equation System Solver"; Lawrence Livermore Laboratory, Report UCID-30001 (1974).

30.- Hindmarsh C. Byrne D.; "Episode : An Experimental Package for Integration of Systems of Ordinary Differential Equations"; Lawrence Livermore Laboratory, Report UCID-30112 (1975).

31.- Hindmarsh C. Byrne D.; "Application of Episode : An Experimental Package for Integration of Systems of Ordinary Differential Equations"; Numerical Methods for Differential Systems; Lapidus and Schiesser eds. Academic Press (1976).

32.- Hoffmann A.; "Computational Fluid Dynamics for Engineers"; Engineering Education System. (1989).

33.- Huges W.; "Dinámica de los Fluidos"; Serie Schaum Mc Graw Hill (1970).

34.- Ingebo D.; "Atomization, Aceleration and Vaporization of Liquid Fuels"; Sixth Symp. Int. on Combus., 684-687 (1956).

35.- Ionades E., Gosman D.; "A Survey of the Literature Relating to Oil Spray Combustion"; Mech. Eng. Dept., Fluids Section, Imperial College (1978).

36.- Janz J.; "Thermodynamic Properties of Organic Compounds"; Academic Press (1967).

37.- Kennedy M. and Kent H.; "Measurements of a Conserved Scalar in Turbulent Jet Diffusion Flames"; Seventeenth Symposium Int. on combustion, Combustion Institute, 279-287 (1979).

38.- Kent H. and Bilger W.; "The Prediction of Turbulent Diffusion Flame Fields and Nitric Oxide Formation"; Sixteenth Symposium Int. on Combustion,

Combustion Institute, 1643-1656 (1977).

39.- Kuan-Yun Kuo K.; "Principles of Combustion"; Wiley Interscience Publication (1986).

40.- Langmuir I.; "The Evaporation of Small Spheres"; Phys. Rev., 12(5), 368-370 (1918).

41.- Lefebvre H.; "Atomization and Sprays"; Hemisphere Publishing Corporation (1989).

42.- Lefebvre H.; "Properties of Sprays"; Part. Syst. Charact. 6, 176-186 (1989).

43.- Leo T., Shin W., Jiung M. and Huang H.; "A Numerical Investigation of Multiple Flame Configurations in Convective Droplet Gasification"; Combustion and Flame 103, 221-238 (1995).

44.- Ley Koo M.; "Programas de Computo para Calcular las Propiedades del Agua"; Instituto de Investigaciones Electricas (1992).

45.- Miller A. and Kee J.; "Chemical Kinetics and Combustion Modeling"; Annu. Rev. Phys. Chem., 41, 345-387 (1990).

46.- Muñoz Ledo R., Varela J.R., Reyes Lopez C., Ley Koo M.; "Ozone Isopleths for Mexico City Using CBM4 Within Aquami"; Air Pollution 1994, Computational Mechanics Publications Southampton Boston, 401-407 (1994).

47.- Ohtsuka M; "Numerical Analysis of Swirling Non-Reacting and Reacting Flows by the Reynolds Stress Differential Method"; Int. J. Heat mass Transfer, 38(2) 331-337 (1995).

48.- Perry H., Chilton H.; "Manual del Ingeniero Químico"; Mc Graw Hill (1985).

49.- Raju S. and SIRIGNANO W.; "Unsteady Navier-Stokes Solution for Two Interacting, Vaporizing Droplets"; AIAA 25th Aerospace Sciences Meeting (1987).

50.- Reyes Lopez C., Ley Koo M., Muñoz Ledo R., Varela R.; "A Multicell Computer Model for Ozone and Its Photochemical Reactions" ; Air Pollution 1993, Computational Mechanics Publications Southampton Boston 313-321 (1993).

- 51.- Sarv H. and Cernansky P.; "NO<sub>x</sub> Formation from Combustion of Monodisperse n-Heptane Sprays Doped with Fuel-Nitrogen Additives"; *Combustion and Flame*, 76, 265-283 (1989).
- 52.- Silverman I., Greenberg B. and Tambour Y.; "Stoichiometry and Polydisperse Effects in Premixed Spray Flames"; *Combustion and Flame*, 93, 97-118 (1993).
- 53.- Sirignano W.; "Spray Combustion Simulation"; *Symposium on Numerical Simulation of Combustion Phenomena*, (1985).
- 54.- Sirignano W.; "The Formulation of Spray Combustion Models : Resolution Compared to Droplet Spacing"; *Jou. of Heat Transfer*, 108, 33-639 (1986).
- 55.- Shih Ann T. and Megaridis M.; "Suspended Droplet Evaporation Modeling in a Laminar Convective Environment"; *Combustion and Flame* 102, 256-270 (1995).
- 56.- Sloane M.; "Ignition and Flame Propagation Modeling with an Improved Methane Oxidation Mechanism"; *Combust. Sci. And Tech.*, 63, 287-313 (1989).
- 57.- Spalding B.; "The Combustion of Liquid Fuels"; *Fourth Symp. Int. on Combustion* 847-865 (1953).
- 58.- Spalding B.; "A General Theory of Turbulent Combustion"; *J. Energy* 2(1), 16-23 (1978).
- 59.- Spalding B.; "Combustion and Mass Transfer"; *Pergamon International Library* (1979).
- 60.- Spiegel R.; "Manual de Formulas y Tablas Matemáticas"; *Mc Graw Hill* (1970).
- 61.- Strehlow R.; "Combustion Fundamentals"; *Mc Graw Hill* (1987).
- 62.- Stokes G.; "On the Effect of the Internal Friction of Fluids on the Motion of Pendulums"; *Trans. Camb. Phyl. Soc.*, 9, 8-106 (1851).
- 63.- Tambour Y.; "Vaporization of Polydisperse Fuel Sprays in a Laminar Boundary Layer Flow : A Sectional Approach"; *Combustion and Flame*, 58, 103-114 (1984).

- 64.- Tambour Y.; "A Lagrangian Sectional Approach for Simulating Droplet Size Distribution of Vaporizing Fuel Sprays in a Turbulent Jet"; *Combustion and Flame*, 60, 15-28 (1985).
- 65.- Takagi T., Shin Hyun-Dong and Ishio Akira; "Properties of Turbulence in Turbulent Diffusion Flames"; *Combustion and Flame*, 40, 121-140 (1981).
- 66.- Takagi T., Shin Hyun-Dong and Ishio A.; "A Study on the Structure of Turbulent Diffusion Flame : Properties of Fluctuations of Velocity, Temperature and Ion Concentration"; *Combustion and Flame*, 41, 261-271 (1981).
- 67.- Torijano E., Vazquez A., Muñoz Ledo R., Ley Koo M.; "Simulación de Episodios de Ozono Durante 48 Horas para la Zona Metropolitana de la Ciudad de México"; *Contaminacion Atmosferica*, Colegio Nacional (1996).
- 68.- Tsang W. and Hampson R.; "Chemical Kinetic Data Base for Combustion Chemistry Part I. Methane and Related Compounds"; *J. Phys. Chem. Ref. Data.*, 15(3) 1087-279 (1986).
- 69.- Varela R.; "Atomizacion y Combustion de Hidrocarburos Líquidos"; Tesis Doctoral, UAM-I, (1989).
- 70.- Varela R., Torijano E., Vazquez A., Muñoz Ledo R., Ley Koo M.; "Computer Code Generator for Chemical Reactions"; *Air Pollution 1993*, Computational Mechanics Publications Southampton Boston, 305-312 (1993).
- 71.- Warnatz J.; "Rate Coefficients in C/H/O System"; *Book Combustion Chemistry*, edit. Gardiner W. Jr., Springer Verlag (1984).
- 72.- Weicheng F.; "Computer Modelling of Combustion Processes"; *International Academic Publishers/Pergamon Press* (1991).
- 73.- Williams A.; "Fundamentals of Oil Combustion"; *Prog. Ener. and Combust. Sci.*, 2, 167-179 (1976).
- 74.- Williams A.; "Combustion of Sprays of Liquid Fuels"; *Elek. Sci.*, 1-63 (1976).
- 75.- Williams A.; "Combustion Theory"; Edit. BENJAMIN CUMMINGS, (1985-1988).

## APENDICE A

### ECUACIONES GENERALES DE BALANCE (8):

Ecuación de conservación de masa (continuidad).

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + (\nabla \cdot \rho \vec{u}) = 0 \quad A.1$$

En donde :

$\rho$  Densidad del fluido.

$\vec{u}$  Vector de velocidad del fluido.

t tiempo.

$\nabla \cdot \rho \vec{u}$  velocidad neta con que disminuye la densidad de flujo de materia por unidad de volumen.

Una forma particular de esta ecuación es cuando se considera fluido incompresible, lo cual significa densidad constante.

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0 \quad A.2$$

$$\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial z} = 0 \quad A.3$$

Ecuación de conservación de cantidad de movimiento.

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho \vec{u} = -(\nabla \cdot \rho \vec{u} \vec{u}) - \nabla p - (\nabla \cdot \vec{\tau}) + \rho \vec{a}_g \quad A.4$$

En donde :

$\frac{\partial}{\partial t} \rho \vec{u}$  Velocidad de aumento de cantidad de movimiento por unidad de volumen.

$[\nabla \cdot \rho \vec{u} \vec{u}]$  Velocidad de ganancia de cantidad de movimiento por convección

## II APENDICE A

y por unidad de volumen.

$p$  Presión.

$\nabla p$  fuerza de presión que actúa sobre el elemento por unidad de volumen.

$\tau$  Tensor de esfuerzos.

$[\nabla \cdot \tau]$  velocidad de ganancia de cantidad de movimiento por transporte viscoso, por unidad de volumen.

Los componentes del tensor de esfuerzos son :

$$\tau_{ij} = \left(\mu' - \frac{2}{3}\mu\right) \frac{\partial u_k}{\partial k} \delta_{ij} + \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial j} + \frac{\partial u_j}{\partial i}\right) \quad A.5$$

En donde :

$\mu$  Viscosidad dinámica.

$\mu'$  Viscosidad volumetrica.

$i, j$  y  $k$ , varían entre  $x, y, z$ .

$$\delta_{ij} = 1, \text{ si } i=j; \text{ y } \delta_{ij} = 0, \text{ si } i \neq j;$$

Si el fluido es isotrópico :  $\tau_{xy} = \tau_{yx}$ ,  $\tau_{xz} = \tau_{zx}$  y  $\tau_{yz} = \tau_{zy}$

$\vec{a}_g$  Aceleración de la gravedad.

$\rho \vec{a}_g$  fuerza de gravedad que actúa sobre el elemento por unidad de volumen.

Si se consideran viscosidad y densidad como constantes, mediante la ecuación de continuidad  $(\nabla \cdot \vec{u}) = 0$ , se reducen las ecuaciones del tensor de esfuerzos, y si se reagrupan términos y usando derivadas substanciales y notación vectorial se obtiene la ecuación de Navier-Stokes :

$$\rho \frac{D\vec{u}}{Dt} = -\nabla p + \mu \nabla^2 \vec{u} + \rho \vec{a}_g \quad A.6$$

Si se considera despreciable el gradiente del tensor de esfuerzos  $[\nabla \cdot \vec{\tau}] = 0$ , usando derivadas substanciales y notación vectorial se obtiene la ecuación de Euler :

$$\rho \frac{D\vec{u}}{Dt} = -\nabla p + \rho \vec{a}_g \quad A.7$$

Ecuación de conservación de energía (A.8).

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{1}{2} \rho u^2 \right) = -(\nabla \cdot \frac{1}{2} \rho u^2 \vec{u}) - (\nabla \cdot p \vec{u}) - p(-\nabla \cdot \vec{u}) - (\nabla \cdot [\vec{\tau} \cdot \vec{u}]) - (-\vec{\tau} : \nabla \vec{u}) + \rho (\vec{u} \cdot \vec{a}_g)$$

En donde :

$\frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{1}{2} \rho u^2 \right)$  Velocidad de incremento de energía cinética por unidad de volumen.

$\nabla \cdot \frac{1}{2} \rho u^2 \vec{u}$  Velocidad neta de entrada de energía debida al flujo global.

$-(\nabla \cdot p \vec{u})$  Velocidad de trabajo producido por la presión externa sobre el elemento de volumen.

$-p(-\nabla \cdot \vec{u})$  Velocidad de conversión reversible en energía interna.

$-(\nabla \cdot [\vec{\tau} \cdot \vec{u}])$  Velocidad de trabajo producido por las fuerzas viscosas que actúan sobre el elemento de volumen.

$(-\vec{\tau} : \nabla \vec{u})$  Velocidad de conversión irreversible en energía interna.

$\rho (\vec{u} \cdot \vec{a}_g)$  Velocidad de trabajo producido por la fuerza de gravedad que actúa sobre el elemento de volumen.

#### COORDENADAS CILINDRICAS (60)

$$z = r \cos(\Theta), \quad y = r \sin(\Theta), \quad x = x.$$

#### IV APENDICE A

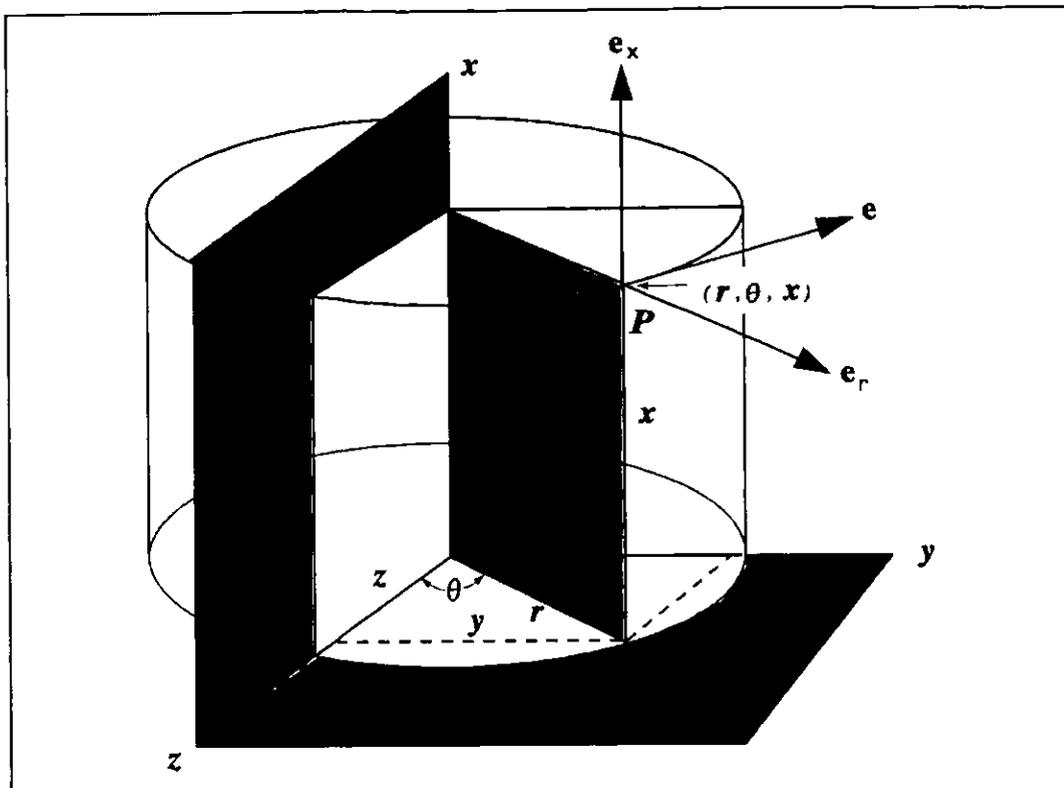


Figura # 1. Coordenadas cilíndricas  $(r, \theta, x)$ .

En coordenadas cilíndricas  $(r, \theta, x)$ ,  $\rho = cte.$  y  $\mu = cte.$ , las ecuaciones generales de balance se expresan así :

Ecuación de continuidad.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(\rho r u_r) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta}(\rho u_\theta) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u_x) = 0 \quad A.9$$

Ecuación de movimiento (A.10).

$$\rho \left( \frac{\partial u_r}{\partial t} + u_r \frac{\partial u_r}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r} \frac{\partial u_r}{\partial \theta} - \frac{u_\theta^2}{r} + u_x \frac{\partial u_r}{\partial x} \right) =$$

$$-\frac{\partial p}{\partial r} + \mu \left[ \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r u_r) \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 u_r}{\partial \theta^2} - \frac{2}{r^2} \frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} + \frac{\partial^2 u_r}{\partial x^2} \right] + \rho a_{g_r}$$

Los componentes del tensor de esfuerzos son :

$$\tau_{rr} = \mu \left[ 2 \frac{\partial u_r}{\partial r} - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \mathbf{v}) \right] \quad \text{A.11}$$

$$\tau_{\theta\theta} = \mu \left[ 2 \left( \frac{1}{r} \frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} + \frac{u_r}{r} \right) - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \mathbf{v}) \right] \quad \text{A.12}$$

$$\tau_{xx} = \mu \left[ 2 \frac{\partial u_x}{\partial x} - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \mathbf{v}) \right] \quad \text{A.13}$$

$$\tau_{r\theta} = \mu \left[ r \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{u_\theta}{r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial u_r}{\partial \theta} \right] \quad \text{A.14}$$

$$\tau_{\theta x} = \mu \left[ \frac{\partial u_\theta}{\partial x} + \frac{1}{r} \frac{\partial u_x}{\partial \theta} \right] \quad \text{A.15}$$

$$\tau_{xr} = \mu \left[ \frac{\partial u_x}{\partial r} + \frac{\partial u_r}{\partial x} \right] \quad \text{A.16}$$

En donde :

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (ru_r) + \frac{1}{r} \frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} + \frac{\partial u_x}{\partial x} \quad \text{A.17}$$

Si el fluido es isotrópico :  $\tau_{x\theta} = \tau_{\theta x}$  ,  $\tau_{xr} = \tau_{rx}$  y  $\tau_{r\theta} = \tau_{\theta r}$  .

Ecuación de energía, en términos de  $h(cp, T)$  :

VI APENDICE A

$$\begin{aligned}
 & \rho C_p \left( \frac{\partial T}{\partial t} + u_r \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r} \frac{\partial T}{\partial \theta} + u_x \frac{\partial T}{\partial x} \right) - \left( \frac{\partial p}{\partial t} + u_r \frac{\partial p}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r} \frac{\partial p}{\partial \theta} + u_x \frac{\partial p}{\partial x} \right) = \\
 & \lambda \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 T}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \right] - \sum_{i=1}^N w_i \Delta h_{f,i}^0 \\
 & \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \rho T \sum_{i=1}^N C_{p,i} Y_i V_{ir} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \rho T \sum_{i=1}^N C_{p,i} Y_i V_{i\theta} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left( \rho T \sum_{i=1}^N C_{p,i} Y_i V_{ix} \right) \right] \\
 & + \mu \left\{ 2 \left[ \left( \frac{\partial u_r}{\partial r} \right)^2 + \left( \frac{1}{r} \frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} + \frac{u_r}{r} \right)^2 + \left( \frac{\partial u_x}{\partial x} \right)^2 \right] + \left[ r \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{u_\theta}{r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial u_r}{\partial \theta} \right]^2 + \right. \\
 & \left. \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial u_x}{\partial \theta} + \frac{\partial u_\theta}{\partial x} \right]^2 + \left[ \frac{\partial u_r}{\partial x} + \frac{\partial u_x}{\partial r} \right]^2 - \frac{2}{3} \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r u_r) + \frac{1}{r} \frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} + \frac{\partial u_x}{\partial x} \right]^2 \right\} \\
 & + \rho \sum_{i=1}^N Y_i (f_{ir} V_{ir} + f_{i\theta} V_{i\theta} + f_{ix} V_{ix}) \quad \text{A.18}
 \end{aligned}$$

ECUACIONES DE BALANCE PARA UN SISTEMA MULTICOMPONENTE (39) :

En forma practica un fluido normalmente no es de un solo componente y por lo tanto las ecuaciones anteriormente mostradas deberán de modificarse para poder representar un sistema multicomponente:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + (\nabla \cdot \rho \vec{u}) = 0 \quad \text{A.19}$$

Para la cual expresamos :

$$\rho \bar{u} = \sum_{i=1}^{N_c} \dot{m}_i \quad y \quad \sum_{i=1}^{N_c} \dot{m}_i = 0$$

$N_c$  Número de componentes.

$m_i$  Masa del iesimo componente.

Para un fluido con densidad constante :

$$\nabla \cdot \bar{u} = 0 \quad \text{A.20}$$

Las ecuaciones de movimiento (momentum A.21) se escriben así :

$$\rho \left[ \frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right] = - \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \mu \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right] + \rho \sum_{k=1}^{N_c} (Y_k f_k)_i$$

$Y_k$  Fracción masa de la kesima especie.

$f_k$  Fuerza externa por unidad de masa sobre la especie kesima.

Ecuación de energía :

$$\rho \frac{De}{Dt} + \rho \frac{\partial u_j}{\partial x_j} = - \nabla \cdot \bar{q} + \Phi + \dot{Q} + \rho \sum_{k=1}^{N_c} Y_k f_k \cdot \bar{V}_k \quad \text{A.22}$$

$e$  Energía interna.

$\bar{q}$  Vector de flujo de calor (difusión, conducción, Dufour<sup>(39)</sup>).

$\dot{Q}$  Calor de combustión.

$\Phi$  Disipación por esfuerzos viscosos.

$\bar{V}_k$  Velocidad de difusión de masa de la kesima especie.

Ecuación de la especies.

## VIII APENDICE A

$$\frac{\partial Y_i}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla Y_i + \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \rho Y_i \vec{V}_i = \frac{w_i}{\rho} \quad i=1,2,\dots,N_c \quad \text{A.23}$$

### APROXIMACION SHVAB-ZELD'OVICH.

Al modelar un sistema multicomponente de fluidos el comportamiento no es totalmente ideal, por lo que se tendrán que hacer suposiciones que permitan reducir los términos de algunas ecuaciones o adicionar algunas ecuaciones complementarias que se conocen como : ecuaciones de cerradura o fenomenológicas, entre las que se incluyen la de energía cinética turbulenta, velocidad de energía cinética turbulenta, fluctuaciones de concentración, etc.

Shvab-Zeld'ovich (39) proponen que para modelar un sistema multicomponente se desprecien los siguientes términos de las ecuaciones de balance. :

- 1).- Los campos de fuerza externa (términos  $f_k$ ).
- 2).- Efectos de Soret y Dufour (del vector de flujo de calor).
- 3).- El gradiente de difusión generado por la presión.
- 4).- Viscosidad volumetrica ( $\mu'$ ).

Estos términos se pueden omitir en gran parte de los problemas de combustión sin que por ello se introduzca un error apreciable :

A las ecuaciones resultantes al eliminar estos términos se le denomina formulación de Shvab-Zel'dovich, para un problema específico se pueden adicionar algunas otras suposiciones o hipótesis que simplifican más su representación numérica.

Si se usa la formulación de SHVAB-ZEL'DOVICH, para un problema particular en un sistema axisimétrico, sin recirculación (SWIRL), fluido incompresible y en estado estacionario descrito en FAETH (18), se puede representar el modelo matemático del fluido con una ecuación general en donde la diferencia la hace el término fuente  $\phi$  :

$$\frac{\partial}{\partial x} (\bar{\rho} \bar{u} \phi) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \bar{\rho} \bar{v}^0 \phi) = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\mu_t}{\sigma_\phi} \frac{\partial \phi}{\partial r} \right) + S_\phi \quad \text{A.24}$$

Los valores testados  $\bar{(\phi)}$  son cantidades promediadas en el tiempo,  $\mu_t$  es la viscosidad turbulenta,  $v^0$  es la velocidad radial pesada y  $\sigma_\phi$  número turbulento

Prandtl/Schmidt.

En donde :

$$\overline{\rho v^0} = \overline{\rho v} + \overline{\rho'v'} \quad A.25$$

Los términos fuente  $\phi$ , para las ecuaciones particulares son :

Balance de masa  $\phi = 1$  :

$$\frac{\partial}{\partial x}(\overline{\rho u}) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r \overline{\rho v^0}) = 0 \quad A.26$$

Velocidad Axial  $\phi = \overline{u}$  (A.27) :

$$\frac{\partial}{\partial x}(\overline{\rho u^2}) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r \overline{\rho v^0 u}) = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\mu_t}{\sigma_u} \frac{\partial \overline{u}}{\partial r} \right) \pm a_g(\rho_\infty - \overline{\rho})$$

Fracción mezcla  $\phi = \overline{f}$  (A.28) :

$$\frac{\partial}{\partial x}(\overline{\rho u f}) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r \overline{\rho v^0 f}) = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\mu_t}{\sigma_f} \frac{\partial \overline{f}}{\partial r} \right)$$

Energía cinética turbulenta  $\phi = k$  (A.29) :

$$\frac{\partial}{\partial x}(\overline{\rho u k}) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r \overline{\rho v^0 k}) = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\mu_t}{\sigma_k} \frac{\partial k}{\partial r} \right) + \mu_t \left( \frac{\partial \overline{u}}{\partial r} \right)^2 - \overline{\rho \epsilon}$$

Velocidad de disipación de energía cinética turbulenta  $\phi = \epsilon$  (A.30) :

$$\frac{\partial}{\partial x}(\overline{\rho u \epsilon}) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r \overline{\rho v^0 \epsilon}) = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \frac{\partial \epsilon}{\partial r} \right) + \frac{\epsilon}{k} (C_{\epsilon_1} \mu_t \left( \frac{\partial \overline{u}}{\partial r} \right)^2 - C_{\epsilon_2} \overline{\rho \epsilon})$$

Fluctuaciones de concentración  $\phi = g$  (A.31) :

X APENDICE A

$$\frac{\partial}{\partial x}(\bar{\rho}\bar{u}g) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r\bar{\rho}\bar{v}^0g) = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}\left(r \frac{\mu_t}{\sigma_g} \frac{\partial g}{\partial r}\right) + C_{g1}\mu_t \left(\frac{\partial \bar{f}}{\partial r}\right)^2 - C_{g2}\bar{\rho} \frac{\epsilon g}{k}$$

Balance de energía  $\phi = \bar{H}$  (A.32) :

$$\frac{\partial}{\partial x}(\bar{\rho}\bar{u}\bar{H}) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r\bar{\rho}\bar{v}^0\bar{H}) = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}\left(r \frac{\mu_t}{\sigma_{\bar{H}}} \frac{\partial \bar{H}}{\partial r}\right) + S_{rad}$$

Balance de especies  $\phi = Y_i$  (A.33) :

$$\frac{\partial}{\partial x}(\bar{\rho}\bar{u}Y_i) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r\bar{\rho}\bar{v}^0Y_i) = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}\left(r \frac{\mu_t}{\sigma_{Y_i}} \frac{\partial Y_i}{\partial r}\right) + C_i R_f$$

De acuerdo con la condiciones y constantes empíricas, a numeros de Reynolds relativamente altos (ignorando el transporte laminar), la viscosidad turbulenta se puede definir como :

$$\mu_t = \frac{C_\mu \bar{\rho} k^2}{\epsilon} \quad \text{A.34}$$

Las constantes turbulentas normalmente se determinan de algunos resultados experimentales, y sus valores típicos son :

$$C_\mu = 0.09$$

$$C_{\epsilon 1} = 1.44$$

$$C_{g1} = 1.84$$

$$C_{\epsilon 2} = 1.84$$

$$C_{g2} = 1.89$$

Y los números turbulentos PRANDTL/SCHMIDT :

$$\sigma_k = 1.00$$

$$\sigma_\epsilon = 1.30$$

$$\sigma_f = 0.70$$

$$\sigma_g = 0.70$$

## APENDICE B

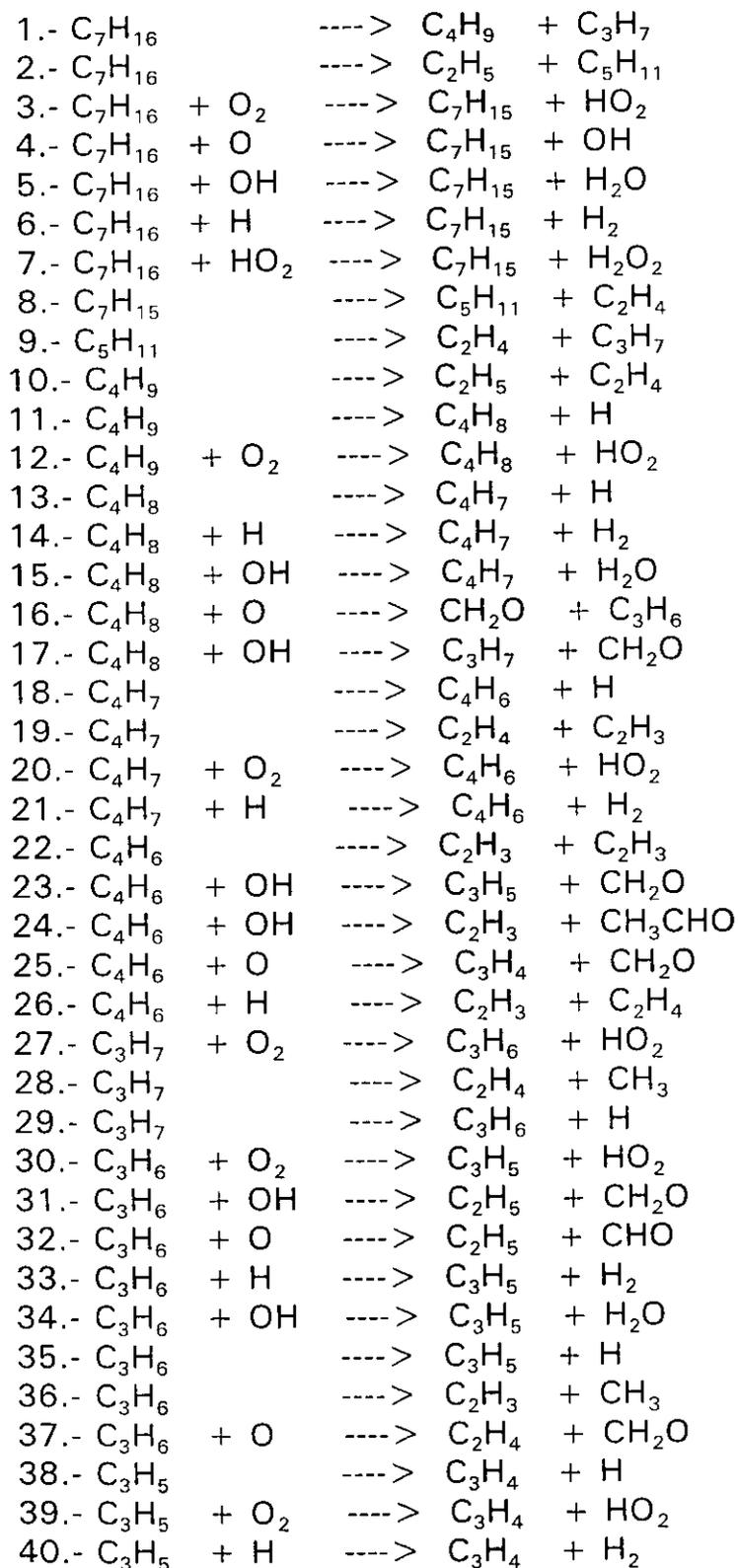
MECANISMO PARA COMBUSTION DE HEPTANO (47).  $\text{NO}_x$  Formation from Combustion of Monodisperse n-Heptane Sprays Doped with Fuel-Nitrogen Additives. HAMID SARV and NICHOLAS P. CERNANSKY, Combustion and Flame, 1989, Vol. 76, pp 265-283

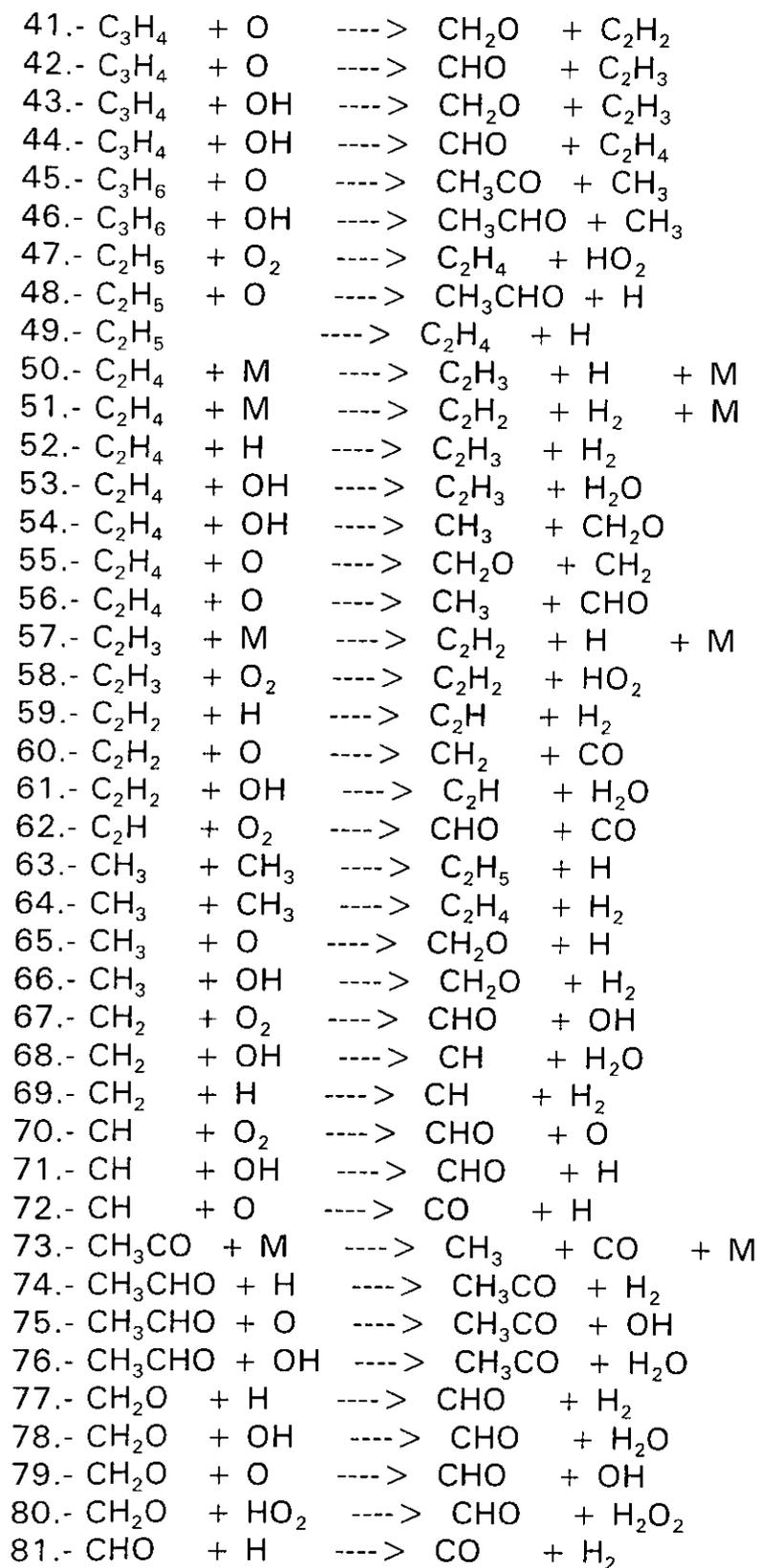
### ESPECIES

1	$\text{O}_2$	OXIGENO
2	$\text{C}_7\text{H}_{16}$	n-HEPTANO
3	$\text{C}_7\text{H}_{15}$	HEPTILO
4	$\text{C}_5\text{H}_{11}$	ISOAMILO
5	$\text{C}_4\text{H}_9$	BUTILO
6	$\text{C}_4\text{H}_8$	BUTENO
7	$\text{C}_4\text{H}_7$	BUTENO RADICAL
8	$\text{C}_4\text{H}_6$	BUTADIENO (metilaleno)
9	$\text{C}_3\text{H}_7$	PROPIL
10	$\text{C}_3\text{H}_6$	PROPILENO
11	$\text{C}_3\text{H}_5$	ALILO
12	$\text{C}_3\text{H}_4$	ALENO
13	$\text{C}_2\text{H}_5$	ETILO
14	$\text{C}_2\text{H}_4$	ETILENO
15	$\text{C}_2\text{H}_3$	ETILENO RADICAL
16	$\text{C}_2\text{H}_2$	ACETILENO
17	$\text{C}_2\text{H}$	ETINO RADICAL
18	$\text{CH}_3$	METILO
19	$\text{CH}_2$	METILENO
20	$\text{CH}$	METINO
21	$\text{CH}_3\text{CHO}$	ACETALDEHIDO
22	$\text{CH}_3\text{CO}$	METILCETONA
23	$\text{CH}_2\text{O}$	FORMALDEHIDO
24	$\text{CHO}$	FORMILO
25	$\text{C}$	CARBONO
26	$\text{CO}_2$	DIOXIDO DE CARBONO
27	$\text{CO}$	MONOXIDO DE CARBONO
28	$\text{H}_2\text{O}$	AGUA
29	$\text{H}_2\text{O}_2$	PEROXIDO DE HIDROGENO
30	$\text{HO}_2$	HIDROPEROXILO
31	$\text{OH}$	HIDROXILO
32	$\text{H}_2$	HIDROGENO MOLECULAR
33	$\text{H}$	HIDROGENO ATOMICO
34	$\text{O}$	OXIGENO ATOMICO
35	$\text{M}$	TERCER CUERPO

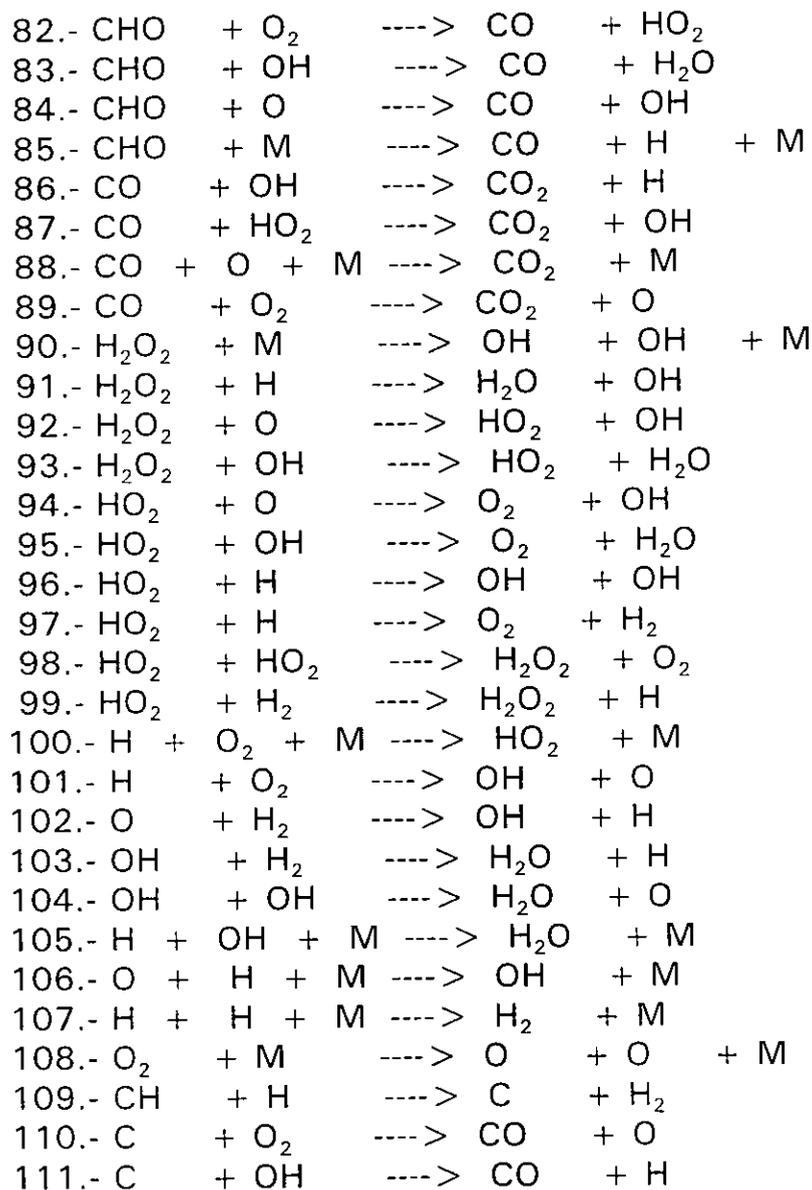
II APENDICE B

REACCIONES





IV APENDICE B



CONSTANTES DE VELOCIDAD DE REACCION

- $K_1 = 2.50 \times 10^{16} \exp(-81000./RT)$
- $K_2 = 6.30 \times 10^{16} \exp(-81900./RT)$
- $K_3 = 2.50 \times 10^{13} \exp(-49000./RT)$
- $K_4 = 1.00 \times 10^{14} \exp(-7850./RT)$
- $K_5 = 1.00 \times 10^{10} T^{1.05} \exp(-1810./RT)$
- $K_6 = 5.62 \times 10^7 T^2 \exp(-7700./RT)$
- $K_7 = 1.12 \times 10^{13} \exp(-19400./RT)$
- $K_8 = 2.50 \times 10^{13} \exp(-28800./RT)$
- $K_9 = 3.24 \times 10^{13} \exp(-28400./RT)$
- $K_{10} = 2.50 \times 10^{13} \exp(-28800./RT)$
- $K_{11} = 1.26 \times 10^{13} \exp(-38600./RT)$
- $K_{12} = 1.00 \times 10^{12} \exp(-2000./RT)$
- $K_{13} = (4.07 \times 10^{18}/T) \exp(-97350./RT)$
- $K_{14} = 5.00 \times 10^{13} \exp(-3900./RT)$
- $K_{15} = 1.40 \times 10^{13} \exp(-3060./RT)$
- $K_{16} = 5.00 \times 10^{12}$
- $K_{17} = 1.50 \times 10^{12}$
- $K_{18} = 1.20 \times 10^{14} \exp(-49300./RT)$
- $K_{19} = 1.00 \times 10^{11} \exp(-37000./RT)$
- $K_{20} = 1.00 \times 10^{11}$
- $K_{21} = 3.16 \times 10^{13}$
- $K_{22} = (4.00 \times 10^{19}/T) \exp(-98150./RT)$
- $K_{23} = 1.00 \times 10^{12}$
- $K_{24} = 1.00 \times 10^{12}$
- $K_{25} = 1.00 \times 10^{12}$
- $K_{26} = 1.00 \times 10^{13} \exp(-4700./RT)$
- $K_{27} = 1.00 \times 10^{12} \exp(-5000./RT)$
- $K_{28} = 9.55 \times 10^{13} \exp(-31000./RT)$
- $K_{29} = 1.26 \times 10^{14} \exp(-37000./RT)$
- $K_{30} = 1.00 \times 10^{14} \exp(-39000./RT)$
- $K_{31} = 1.00 \times 10^{12}$
- $K_{32} = 6.76 \times 10^4 T^{2.56} \exp(1130./RT)$
- $K_{33} = 5.00 \times 10^{12} \exp(-1500./RT)$
- $K_{34} = 1.00 \times 10^{13} \exp(-3060./RT)$

## VI APENDICE B

$$\begin{aligned}K_{35} &= 1.00 \times 10^{13} \exp(-78000./RT) \\K_{36} &= 6.30 \times 10^{15} \exp(-85800./RT) \\K_{37} &= 6.76 \times 10^4 T^{2.56} \exp(1130./RT) \\K_{38} &= 4.00 \times 10^{13} \exp(-70000./RT) \\K_{39} &= 6.00 \times 10^{11} \exp(-10000./RT) \\K_{40} &= 1.00 \times 10^{13} \\K_{41} &= 1.00 \times 10^{12} \\K_{42} &= 1.00 \times 10^{12} \\K_{43} &= 1.00 \times 10^{12} \\K_{44} &= 1.00 \times 10^{12} \\K_{45} &= 6.76 \times 10^4 T^{2.56} \exp(1130./RT) \\K_{46} &= 1.00 \times 10^{12} \\K_{47} &= 1.00 \times 10^{12} \exp(-5000./RT) \\K_{48} &= 5.00 \times 10^{13} \\K_{49} &= 2.00 \times 10^{13} \exp(-37900./RT) \\K_{50} &= 6.31 \times 10^{18} \exp(-108720./RT) \\K_{51} &= 9.33 \times 10^{16} \exp(-77200./RT) \\K_{52} &= 1.51 \times 10^7 T^2 \exp(-6000./RT) \\K_{53} &= 4.79 \times 10^{12} \exp(-1230./RT) \\K_{54} &= 2.00 \times 10^{12} \exp(-960./RT) \\K_{55} &= 2.50 \times 10^{14} \exp(-5000./RT) \\K_{56} &= 3.30 \times 10^{12} \exp(-1130./RT) \\K_{57} &= 7.94 \times 10^{14} \exp(-31500./RT) \\K_{58} &= 1.00 \times 10^{12} \exp(-10000./RT) \\K_{59} &= 2.00 \times 10^{14} \exp(-19000./RT) \\K_{60} &= 5.00 \times 10^{13} \exp(-3700./RT) \\K_{61} &= 6.30 \times 10^{12} \exp(-7000./RT) \\K_{62} &= 1.00 \times 10^{13} \exp(-7000./RT) \\K_{63} &= 8.00 \times 10^{13} \exp(-26500./RT) \\K_{64} &= 1.00 \times 10^{16} \exp(-32000./RT) \\K_{65} &= 1.26 \times 10^{14} \exp(-2000./RT) \\K_{66} &= 3.98 \times 10^{12} \\K_{67} &= 1.00 \times 10^{14} \exp(-3700./RT) \\K_{68} &= 5.00 \times 10^{11} T^{0.5} \exp(-6000./RT) \\K_{69} &= 3.00 \times 10^{11} T^{0.7} \exp(-26000./RT) \\K_{70} &= 5.00 \times 10^{11} T^{0.5} \exp(-6000./RT)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 K_{71} &= 5.00 \times 10^{11} T^{0.5} \exp(-10000./RT) \\
 K_{72} &= 5.00 \times 10^{11} T^{0.5} \exp(-4000./RT) \\
 K_{73} &= 1.50 \times 10^{14} \\
 K_{74} &= 3.00 \times 10^{13} \\
 K_{75} &= 5.00 \times 10^{13} \\
 K_{76} &= 4.40 \times 10^{15} \exp(-10500./RT) \\
 K_{77} &= 4.00 \times 10^{13} \exp(-4200./RT) \\
 K_{78} &= 5.00 \times 10^{12} \exp(-1790./RT) \\
 K_{79} &= 1.00 \times 10^{13} \\
 K_{80} &= 3.16 \times 10^{14} \exp(-10500./RT) \\
 K_{81} &= 7.94 \times 10^{12} \exp(-200./RT) \\
 K_{82} &= 2.00 \times 10^{13} \exp(-3100./RT) \\
 K_{83} &= 1.26 \times 10^{12} \exp(-8000./RT) \\
 K_{84} &= 2.00 \times 10^{14} \\
 K_{85} &= 3.16 \times 10^{12} \exp(-7000./RT) \\
 K_{86} &= 1.00 \times 10^{14} \\
 K_{87} &= 1.00 \times 10^{14} \\
 K_{88} &= 5.00 \times 10^{14} \exp(-19000./RT) \\
 K_{89} &= 1.58 \times 10^{14} T^{1.3} \exp(700/RT) \\
 K_{90} &= 1.58 \times 10^{14} \exp(-23600./RT) \\
 K_{91} &= 2.50 \times 10^{15} \exp(-4400./RT) \\
 K_{92} &= 1.60 \times 10^{13} \exp(-41000./RT) \\
 K_{93} &= 1.26 \times 10^{17} \exp(-45500./RT) \\
 K_{94} &= 5.00 \times 10^{12} \exp(-9900./RT) \\
 K_{95} &= 2.00 \times 10^{13} \exp(-5900./RT) \\
 K_{96} &= 1.00 \times 10^{13} \exp(-1900./RT) \\
 K_{97} &= 5.00 \times 10^{13} \exp(-1000./RT) \\
 K_{98} &= 5.00 \times 10^{13} \exp(-1000./RT) \\
 K_{99} &= 5.00 \times 10^{14} \exp(-1800./RT) \\
 K_{100} &= 2.50 \times 10^{13} \exp(-700./RT) \\
 K_{101} &= 2.00 \times 10^{12} \\
 K_{102} &= 3.16 \times 10^{11} \exp(-18700./RT) \\
 K_{103} &= 3.16 \times 10^{18}/T \\
 K_{104} &= (1.26 \times 10^{17}/T^{0.9}) \exp(-16600./RT) \\
 K_{105} &= 2.00 \times 10^{14} \exp(-13800./RT) \\
 K_{106} &= (3.16 \times 10^7/T^{1.8}) \exp(-3000./RT)
 \end{aligned}$$

## VIII APENDICE B

$$K_{107} = 5.00 \times 10^{13} \exp(-7000./RT)$$

$$K_{108} = 2.00 \times 10^{22}/T^2$$

$$K_{109} = 4.00 \times 10^{18}/T$$

$$K_{110} = 6.30 \times 10^{17}/T$$

$$K_{111} = 5.13 \times 10^{15} \exp(-115000./RT)$$

Constantes de velocidad de reacción para una fracción mezcla n-Heptano/aire = 0.06 a una Temperatura Adiabatica de 2103.05 K.

Reaccion	cc-mol-seg-kcal
1	.9562x10 <sup>8</sup>
2	.1943x10 <sup>9</sup>
3	.3358x10 <sup>-15</sup>
4	.2537x10 <sup>-10</sup>
5	.3319x10 <sup>-10</sup>
6	.6537x10 <sup>-10</sup>
7	.1792x10 <sup>-12</sup>
8	.2541x10 <sup>11</sup>
9	.3625x10 <sup>11</sup>
10	.2541x10 <sup>11</sup>
11	.1228x10 <sup>10</sup>
12	.1029x10 <sup>-11</sup>
13	.1480x10 <sup>6</sup>
14	.3264x10 <sup>-10</sup>
15	.1117x10 <sup>-10</sup>
16	.8300x10 <sup>-11</sup>
17	.2490x10 <sup>-11</sup>
18	.9036x10 <sup>9</sup>
19	.1429x10 <sup>8</sup>
20	.1660x10 <sup>-12</sup>
21	.5246x10 <sup>-10</sup>
22	.2526x10 <sup>10</sup>
23	.1660x10 <sup>-11</sup>
24	.1660x10 <sup>-11</sup>
25	.1660x10 <sup>-11</sup>
26	.5391x10 <sup>-11</sup>
27	.5018x10 <sup>-12</sup>
28	.5735x10 <sup>11</sup>
29	.1800x10 <sup>11</sup>
30	.1470x10 <sup>-13</sup>
31	.1660x10 <sup>-11</sup>

Reaccion	cc-mol-seg-kcal
32	$.4720 \times 10^{-10}$
33	$.5797 \times 10^{-11}$
34	$.7982 \times 10^{-11}$
35	$.7841 \times 10^5$
36	$.7641 \times 10^7$
37	$.4720 \times 10^{-10}$
38	$.2127 \times 10^7$
39	$.9101 \times 10^{-13}$
40	$.1660 \times 10^{-10}$
41	$.1660 \times 10^{-11}$
42	$.1660 \times 10^{-11}$
43	$.1660 \times 10^{-11}$
44	$.1660 \times 10^{-11}$
45	$.4720 \times 10^{-10}$
46	$.1660 \times 10^{-11}$
47	$.5018 \times 10^{-12}$
48	$.8300 \times 10^{-10}$
49	$.1498 \times 10^{10}$
50	$.5299 \times 10^{-16}$
51	$.1471 \times 10^{-14}$
52	$.2638 \times 10^{-10}$
53	$.5924 \times 10^{-11}$
54	$.2639 \times 10^{-11}$
55	$.1254 \times 10^{-10}$
56	$.4180 \times 10^{-11}$
57	$.7023 \times 10^{-12}$
58	$.1517 \times 10^{-12}$
59	$.3521 \times 10^{-11}$
60	$.3424 \times 10^{-10}$
61	$.1959 \times 10^{-11}$
62	$.3109 \times 10^{-11}$
63	$.2341 \times 10^{-12}$
64	$.7847 \times 10^{-11}$
65	$.1296 \times 10^{-9}$
66	$.6607 \times 10^{-11}$
67	$.6849 \times 10^{-10}$
68	$.9057 \times 10^{-11}$
69	$.2096 \times 10^{-12}$
70	$.9057 \times 10^{-11}$
71	$.3478 \times 10^{-11}$

## X APENDICE B

Reaccion	cc-mol-seg-kcal
72	$.1462 \times 10^{-10}$
73	$.5921 \times 10^{-9}$
74	$.2431 \times 10^{-10}$
75	$.5408 \times 10^{-11}$
76	$.1660 \times 10^{-10}$
77	$.4253 \times 10^{-10}$
78	$.1256 \times 10^{-10}$
79	$.1581 \times 10^{-10}$
80	$.3084 \times 10^{-12}$
81	$.3320 \times 10^{-9}$
82	$.9826 \times 10^{-12}$
83	$.1660 \times 10^{-9}$
84	$.1660 \times 10^{-9}$
85	$.8803 \times 10^{-11}$
86	$.6475 \times 10^{-12}$
87	$.9253 \times 10^{-12}$
88	$.2405 \times 10^{-32}$
89	$.1457 \times 10^{-14}$
90	$.3910 \times 10^{-11}$
91	$.7768 \times 10^{-12}$
92	$.8091 \times 10^{-11}$
93	$.1054 \times 10^{-10}$
94	$.6534 \times 10^{-10}$
95	$.6534 \times 10^{-10}$
96	$.5395 \times 10^{-9}$
97	$.3510 \times 10^{-10}$
98	$.3320 \times 10^{-11}$
99	$.5977 \times 10^{-14}$
100	$.4142 \times 10^{-32}$
101	$.4026 \times 10^{-11}$
102	$.1222 \times 10^{-10}$
103	$.2450 \times 10^{-10}$
104	$.1555 \times 10^{-10}$
105	$.1247 \times 10^{-31}$
106	$.5243 \times 10^{-32}$
107	$.8258 \times 10^{-33}$
108	$.9541 \times 10^{-20}$
109	$.2490 \times 10^{-9}$
110	$.4980 \times 10^{-10}$
111	$.8300 \times 10^{-10}$

CONCENTRACIONES ( $0.1 \times 10^{-6}$  s) Y TIEMPOS DE REACCION.

Concentraciones  $y(i)$  despues de  $0.1000 \times 10^{-6}$  segundos de mezclados calculos para una fraccion mezcla de 0.06 de n-heptano/aire que genera una Temperatura Adiabatica de 2103.05 K

Especie	moleculas/cm <sup>3</sup>
O2	$.5227 \times 10^{18}$
C7H16	$.2030 \times 10^{-110}$
C7H15	$.3590 \times 10^{-114}$
C5H11	$.1122 \times 10^{-112}$
C4H9	$.7363 \times 10^{-113}$
C4H8	$.1494 \times 10^{15}$
C4H7	$.3252 \times 10^{12}$
C4H6	$.1167 \times 10^{12}$
C3H7	$.1603 \times 10^{09}$
C3H6	$.3310 \times 10^{13}$
C3H5	$.6827 \times 10^{14}$
C3H4	$.6585 \times 10^{15}$
C2H5	$.2463 \times 10^{11}$
C2H4	$.4479 \times 10^{17}$
C2H3	$.4203 \times 10^{17}$
C2H2	$.6584 \times 10^{17}$
C2H	$.4137 \times 10^{16}$
CH3	$.1210 \times 10^{17}$
CH2	$.1147 \times 10^{16}$
CH	$.1969 \times 10^{14}$
CH3CHO	$.1065 \times 10^{14}$
CH3CO	$.1265 \times 10^{11}$
CH2O	$.2171 \times 10^{17}$
CHO	$.2223 \times 10^{16}$
C	$.7250 \times 10^{13}$
CO2	$.6409 \times 10^{15}$
CO	$.8605 \times 10^{17}$
H2O	$.8869 \times 10^{17}$
H2O2	$.1373 \times 10^{12}$
HO2	$.1686 \times 10^{15}$
OH	$.3248 \times 10^{17}$
H2	$.1106 \times 10^{18}$
H	$.4562 \times 10^{17}$
O	$.1517 \times 10^{17}$

## XII APENDICE B

Especie	Reaccion	Tiempo(s)
O2	C7H16 + O2 ----> C7H15 + HO2	569.7
O2	C4H9 + O2 ----> C4H8 + HO2	.1860
O2	C4H7 + O2 ----> C4H6 + HO2	1.152
O2	C3H7 + O2 ----> C3H6 + HO2	.3812
O2	C3H6 + O2 ----> C3H5 + HO2	13.01
O2	C3H5 + O2 ----> C3H4 + HO2	2.102
O2	C2H5 + O2 ----> C2H4 + HO2	.3812
O2	C2H3 + O2 ----> C2H2 + HO2	1.261
O2	C2H + O2 ----> CHO + CO	.6152x10 <sup>-1</sup>
O2	CH2 + O2 ----> CHO + OH	.2793x10 <sup>-2</sup>
O2	CH + O2 ----> CHO + O	.2112x10 <sup>-1</sup>
O2	CHO + O2 ----> CO + HO2	.1947
O2	CO + O2 ----> CO2 + O	131.3
O2	H + O2 + M ----> HO2 + M	.4618x10 <sup>20</sup>
O2	H + O2 ----> OH + O	.4751x10 <sup>-1</sup>
O2	O2 + M ----> O + O + M	.2005x10 <sup>8</sup>
O2	C + O2 ----> CO + O	.3841x10 <sup>-2</sup>
C7H16	C7H16 ----> C4H9 + C3H7	.1673x10 <sup>-6</sup>
C7H16	C7H16 ----> C2H5 + C5H11	.8236x10 <sup>-7</sup>
C7H16	C7H16 + O2 ----> C7H15 + HO2	.147x10 <sup>132</sup>
C7H16	C7H16 + O ----> C7H15 + OH	.194x10 <sup>127</sup>
C7H16	C7H16 + OH ----> C7H15 + H2O	.148x10 <sup>127</sup>
C7H16	C7H16 + H ----> C7H15 + H2	.754x10 <sup>126</sup>
C7H16	C7H16 + HO2 ----> C7H15 + H2O2	.275x10 <sup>129</sup>
C7H15	C7H15 ----> C5H11 + C2H4	.6296x10 <sup>-9</sup>
C5H11	C5H11 ----> C2H4 + C3H7	.4414x10 <sup>-9</sup>
C4H9	C4H9 ----> C2H5 + C2H4	.6296x10 <sup>-9</sup>
C4H9	C4H9 + O2 ----> C4H8 + HO2	.132x10 <sup>131</sup>
C4H8	C4H8 ----> C4H7 + H	.1081x10 <sup>-3</sup>
C4H8	C4H8 + H ----> C4H7 + H2	20.50
C4H8	C4H8 + OH ----> C4H7 + H2O	59.89
C4H8	C4H8 + O ----> CH2O + C3H6	80.63
C4H8	C4H8 + OH ----> C3H7 + CH2O	268.8
C4H7	C4H7 ----> C4H6 + H	.1771x10 <sup>-7</sup>
C4H7	C4H7 ----> C2H4 + C2H3	.1120x10 <sup>-5</sup>
C4H7	C4H7 + O2 ----> C4H6 + HO2	.1852x10 <sup>7</sup>
C4H7	C4H7 + H ----> C4H6 + H2	5861.
C4H6	C4H6 ----> C2H3 + C2H3	.6334x10 <sup>-8</sup>

Especie	Reaccion	Tiempo(s)
C4H6	C4H6 + OH ----> C3H5 + CH2O	.5161x10 <sup>6</sup>
C4H6	C4H6 + OH ----> C2H3 + CH3CHO	.5161x10 <sup>6</sup>
C4H6	C4H6 + O ----> C3H4 + CH2O	.5161x10 <sup>6</sup>
C4H6	C4H6 + H ----> C2H3 + C2H4	.1589x10 <sup>6</sup>
C3H7	C3H7 + O2 ----> C3H6 + HO2	.1243x10 <sup>10</sup>
C3H7	C3H7 ----> C2H4 + CH3	.2790x10 <sup>-9</sup>
C3H7	C3H7 ----> C3H6 + H	.8887x10 <sup>-9</sup>
C3H6	C3H6 + O2 ----> C3H5 + HO2	.2055x10 <sup>7</sup>
C3H6	C3H6 + OH ----> C2H5 + CH2O	.1820x10 <sup>5</sup>
C3H6	C3H6 + O ----> C2H5 + CHO	639.9
C3H6	C3H6 + H ----> C3H5 + H2	5211.
C3H6	C3H6 + OH ----> C3H5 + H2O	3784.
C3H6	C3H6 ----> C3H5 + H	.2041x10 <sup>-3</sup>
C3H6	C3H6 ----> C2H3 + CH3	.2094x10 <sup>-5</sup>
C3H6	C3H6 + O ----> C2H4 + CH2O	639.9
C3H6	C3H6 + O ----> CH3CO + CH3	639.9
C3H6	C3H6 + OH ----> CH3CHO + CH3	.1820x10 <sup>5</sup>
C3H5	C3H5 ----> C3H4 + H	.7522x10 <sup>5</sup>
C3H5	C3H5 + O2 ----> C3H4 + HO2	.1609x10 <sup>5</sup>
C3H5	C3H5 + H ----> C3H4 + H2	88.23
C3H4	C3H4 + O ----> CH2O + C2H2	91.47
C3H4	C3H4 + O ----> CHO + C2H3	91.47
C3H4	C3H4 + OH ----> CH2O + C2H3	91.47
C3H4	C3H4 + OH ----> CHO + C2H4	91.47
C2H5	C2H5 + O2 ----> C2H4 + HO2	.8092x10 <sup>7</sup>
C2H5	C2H5 + O ----> CH3CHO + H	.4892x10 <sup>5</sup>
C2H5	C2H5 ----> C2H4 + H	.107x10 <sup>-7</sup>
C2H4	C2H4 + M ----> C2H3 + H + M	.4213x10 <sup>5</sup>
C2H4	C2H4 + M ----> C2H2 + H2 + M	1518.
C2H4	C2H4 + H ----> C2H3 + H2	.8462x10 <sup>-1</sup>
C2H4	C2H4 + OH ----> C2H3 + H2O	.3768
C2H4	C2H4 + OH ----> CH3 + CH2O	.8460
C2H4	C2H4 + O ----> CH2O + CH2	.1780
C2H4	C2H4 + O ----> CH3 + CHO	.5340
C2H3	C2H3 + M ----> C2H2 + H + M	3.388
C2H3	C2H3 + O2 ----> C2H2 + HO2	15.68
C2H2	C2H2 + H ----> C2H + H2	.4313
C2H2	C2H2 + O ----> CH2 + CO	.4435x10 <sup>-1</sup>

XIV APENDICE B

Especie	Reaccion	Tiempo(s)
C2H2	C2H2 + OH ----> C2H + H2O	.7753
C2H	C2H + O2 ----> CHO + CO	7.772
CH3	CH3 + CH3 ----> C2H5 + H	35.30
CH3	CH3 + CH3 ----> C2H4 + H2	1.053
CH3	CH3 + O ----> CH2O + H	.6374x10 <sup>-1</sup>
CH3	CH3 + OH ----> CH2O + H2	1.251
CH2	CH2 + O2 ----> CHO + OH	1.273
CH2	CH2 + OH ----> CH + H2O	9.629
CH2	CH2 + H ----> CH + H2	416.1
CH	CH + O2 ----> CHO + O	560.7
CH	CH + OH ----> CHO + H	1460.
CH	CH + O ----> CO + H	347.4
CH	CH + H ----> C + H2	20.39
CH3CHO	CH3CHO + H ----> CH3CO + H2	386.1
CH3CHO	CH3CHO + O ----> CH3CO + OH	1735.
CH3CHO	CH3CHO + OH ----> CH3CO + H2O	565.3
CH3CO	CH3CO + M ----> CH3 + CO + M	.1335x10 <sup>5</sup>
CH2O	CH2O + H ----> CHO + H2	.1083
CH2O	CH2O + OH ----> CHO + H2O	.3666
CH2O	CH2O + O ----> CHO + OH	.2913
CH2O	CH2O + HO2 ----> CHO + H2O2	14.94
CHO	CHO + H ----> CO + H2	.1355
CHO	CHO + O2 ----> CO + HO2	45.79
CHO	CHO + OH ----> CO + H2O	.2710
CHO	CHO + O ----> CO + OH	.2710
CHO	CHO + M ----> CO + H + M	5.110
C	C + O2 ----> CO + O	276.9
C	C + OH ----> CO + H	166.2
CO2	ESPECIE NO REACTANTE, SOLO PRODUCTO	
CO	CO + OH ----> CO2 + H	1.795
CO	CO + HO2 ----> CO2 + OH	1.256
CO	CO + O + M ----> CO2 + M	.4832x10 <sup>21</sup>
CO	CO + O2 ----> CO2 + O	797.3
H2O	ESPECIE NO REACTANTE, SOLO PRODUCTO	
H2O2	H2O2 + M ----> OH + OH + M	.1863x10 <sup>6</sup>
H2O2	H2O2 + H ----> H2O + OH	.9376x10 <sup>6</sup>
H2O2	H2O2 + O ----> HO2 + OH	.9001x10 <sup>5</sup>
H2O2	H2O2 + OH ----> HO2 + H2O	.6913x10 <sup>5</sup>

Especie	Reaccion	Tiempo(s)
HO2	HO2 + O ----> O2 + OH	9.077
HO2	HO2 + OH ----> O2 + H2O	9.077
HO2	HO2 + H ----> OH + OH	1.099
HO2	HO2 + H ----> O2 + H2	16.90
HO2	HO2 + HO2 ----> H2O2 + O2	178.6
HO2	HO2 + H2 ----> H2O2 + H	.9922x10 <sup>5</sup>
OH	C7H16 + OH ----> C7H15 + H2O	.9276x10 <sup>-1</sup>
OH	C4H8 + OH ----> C4H7 + H2O	.2755
OH	C4H8 + OH ----> C3H7 + CH2O	1.236
OH	C4H6 + OH ----> C3H5 + CH2O	1.855
OH	C4H6 + OH ----> C2H3 + CH3CHO	1.855
OH	C3H6 + OH ----> C2H5 + CH2O	1.855
OH	C3H6 + OH ----> C3H5 + H2O	.3857
OH	C3H4 + OH ----> CH2O + C2H3	1.855
OH	C3H4 + OH ----> CHO + C2H4	1.855
OH	C3H6 + OH ----> CH3CHO + CH3	1.855
OH	C2H4 + OH ----> C2H3 + H2O	.5197
OH	C2H4 + OH ----> CH3 + CH2O	1.167
OH	C2H2 + OH ----> C2H + H2O	1.572
OH	CH3 + OH ----> CH2O + H2	.4660
OH	CH2 + OH ----> CH + H2O	.3399
OH	CH + OH ----> CHO + H	.8852
OH	CH3CHO + OH ----> CH3CO + H2O	.1855
OH	CH2O + OH ----> CHO + H2O	.2450
OH	CHO + OH ----> CO + H2O	.1855x10 <sup>-1</sup>
OH	CO + OH ----> CO2 + H	4.755
OH	H2O2 + OH ----> HO2 + H2O	.2922
OH	HO2 + OH ----> O2 + H2O	.4712x10 <sup>-1</sup>
OH	OH + OH ----> H2O + O	.1980
OH	H + OH + M ----> H2O + M	.247x10 <sup>21</sup>
OH	C + OH ----> CO + H	.3709x10 <sup>-1</sup>
H2	O + H2 ----> OH + H	.7399x10 <sup>-1</sup>
H2	OH + H2 ----> H2O + H	.3690x10 <sup>-1</sup>
H	C4H8 + H ----> C4H7 + H2	.6715x10 <sup>-1</sup>
H	C4H7 + H ----> C4H6 + H2	.4179x10 <sup>-1</sup>
H	C4H6 + H ----> C2H3 + C2H4	.4066
H	C3H6 + H ----> C3H5 + H2	.3781
H	C3H5 + H ----> C3H4 + H2	.1321

## XVI APENDICE B

Especie	Reaccion	Tiempo(s)
H	$C_2H_4 + H \rightarrow C_2H_3 + H_2$	$.831 \times 10^{-1}$
H	$C_2H_2 + H \rightarrow C_2H + H_2$	.6225
H	$CH_2 + H \rightarrow CH + H_2$	10.46
H	$CH_3CHO + H \rightarrow CH_3CO + H_2$	$.902 \times 10^{-1}$
H	$CH_2O + H \rightarrow CHO + H_2$	$.516 \times 10^{-1}$
H	$CHO + H \rightarrow CO + H_2$	$.660 \times 10^{-2}$
H	$H_2O_2 + H \rightarrow H_2O + OH$	2.822
H	$HO_2 + H \rightarrow OH + OH$	$.406 \times 10^{-2}$
H	$HO_2 + H \rightarrow O_2 + H_2$	$.625 \times 10^{-1}$
H	$H + O_2 + M \rightarrow HO_2 + M$	$.529 \times 10^{21}$
H	$H + O_2 \rightarrow OH + O$	.5445
H	$H + OH + M \rightarrow H_2O + M$	$.176 \times 10^{21}$
H	$O + H + M \rightarrow OH + M$	$.418 \times 10^{21}$
H	$H + H + M \rightarrow H_2 + M$	$.266 \times 10^{22}$
H	$CH + H \rightarrow C + H_2$	$.880 \times 10^{-2}$
O	$C_7H_{16} + O \rightarrow C_7H_{15} + OH$	.2597
O	$C_4H_8 + O \rightarrow CH_2O + C_3H_6$	.7940
O	$C_4H_6 + O \rightarrow C_3H_4 + CH_2O$	3.970
O	$C_3H_6 + O \rightarrow C_2H_5 + CHO$	.1396
O	$C_3H_6 + O \rightarrow C_2H_4 + CH_2O$	.1396
O	$C_3H_4 + O \rightarrow CH_2O + C_2H_2$	3.970
O	$C_3H_4 + O \rightarrow CHO + C_2H_3$	3.970
O	$C_3H_6 + O \rightarrow CH_3CO + CH_3$	.1396
O	$C_2H_5 + O \rightarrow CH_3CHO + H$	$.794 \times 10^{-1}$
O	$C_2H_4 + O \rightarrow CH_2O + CH_2$	.5253
O	$C_2H_4 + O \rightarrow CH_3 + CHO$	1.577
O	$C_2H_2 + O \rightarrow CH_2 + CO$	.1924
O	$CH_3 + O \rightarrow CH_2O + H$	$.509 \times 10^{-1}$
O	$CH + O \rightarrow CO + H$	.4509
O	$CH_3CHO + O \rightarrow CH_3CO + OH$	1.219
O	$CH_2O + O \rightarrow CHO + OH$	.4168
O	$CHO + O \rightarrow CO + OH$	$.397 \times 10^{-1}$
O	$H_2O_2 + O \rightarrow HO_2 + OH$	.8145
O	$HO_2 + O \rightarrow O_2 + OH$	.1009
O	$O + H_2 \rightarrow OH + H$	.5393
O	$O + H + M \rightarrow OH + M$	$.126 \times 10^{22}$

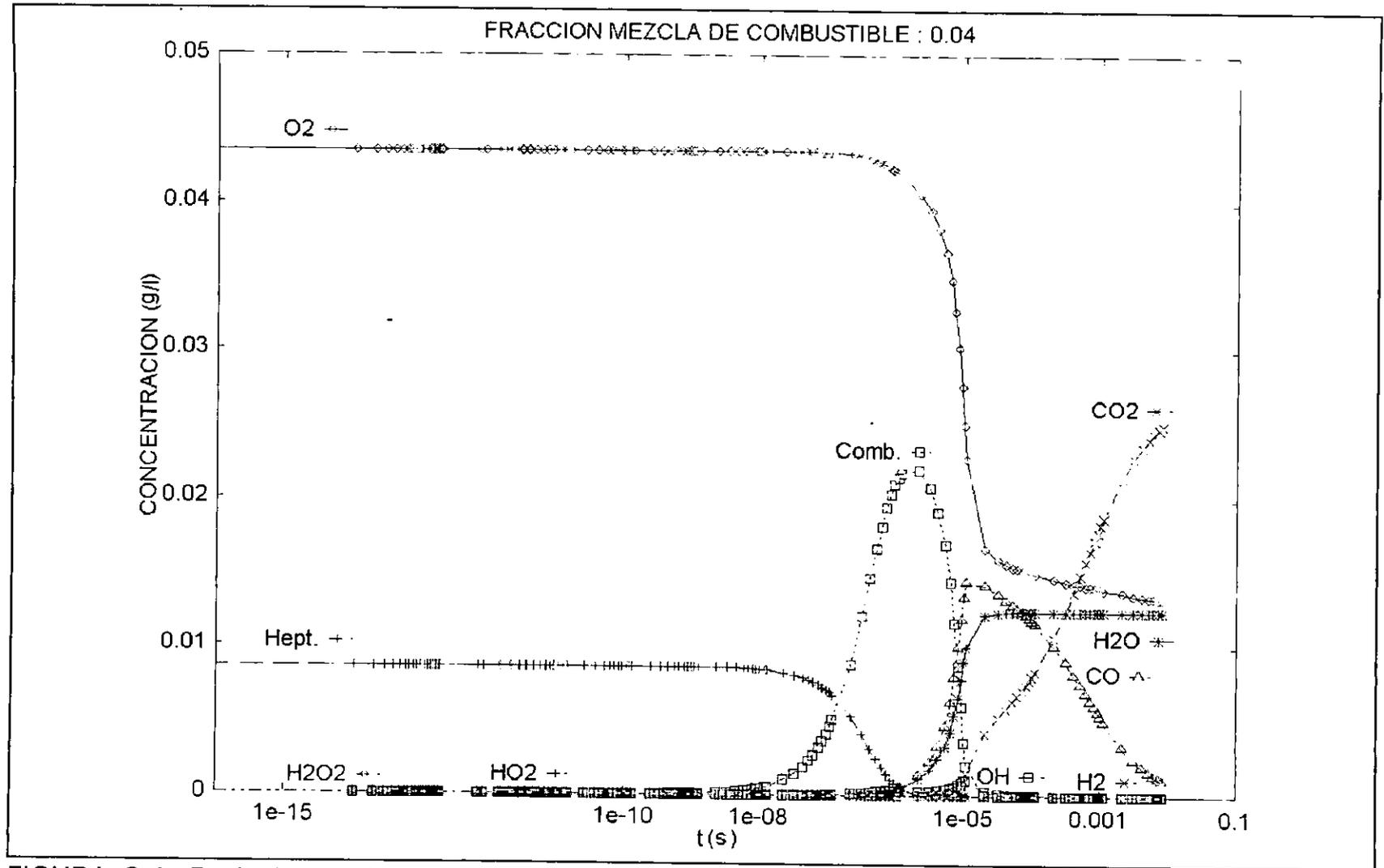


FIGURA C.1, Evolución de la concentración de productos y reactantes en función del tiempo, para una fracción mezcla n-Heptano/aire igual 0.04.

XVIII APENDICE B

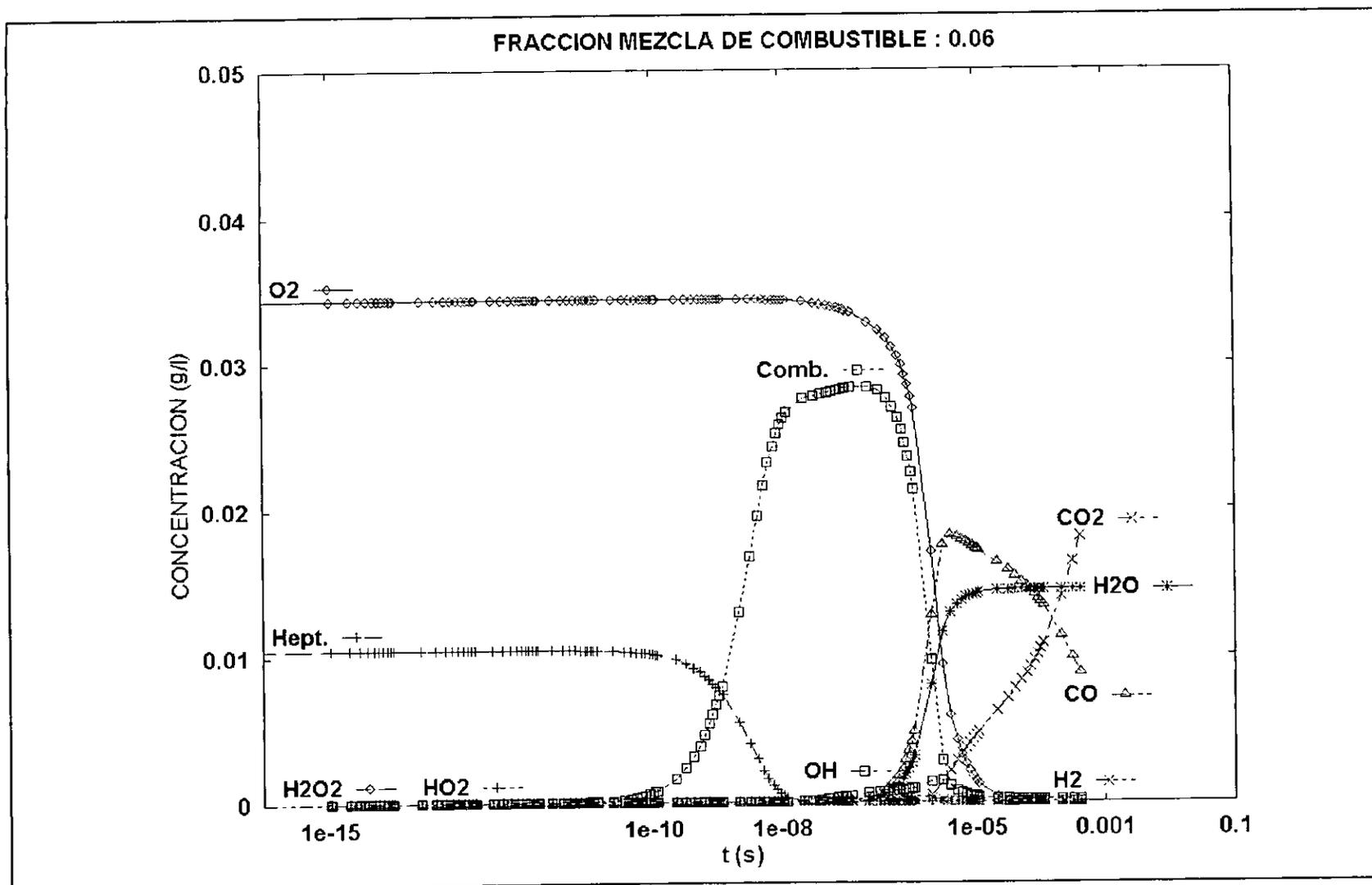


FIGURA C.2, Evolución de la concentración de productos y reactantes en función del tiempo, para una fracción mezcla n-Heptano/aire igual 0.06.

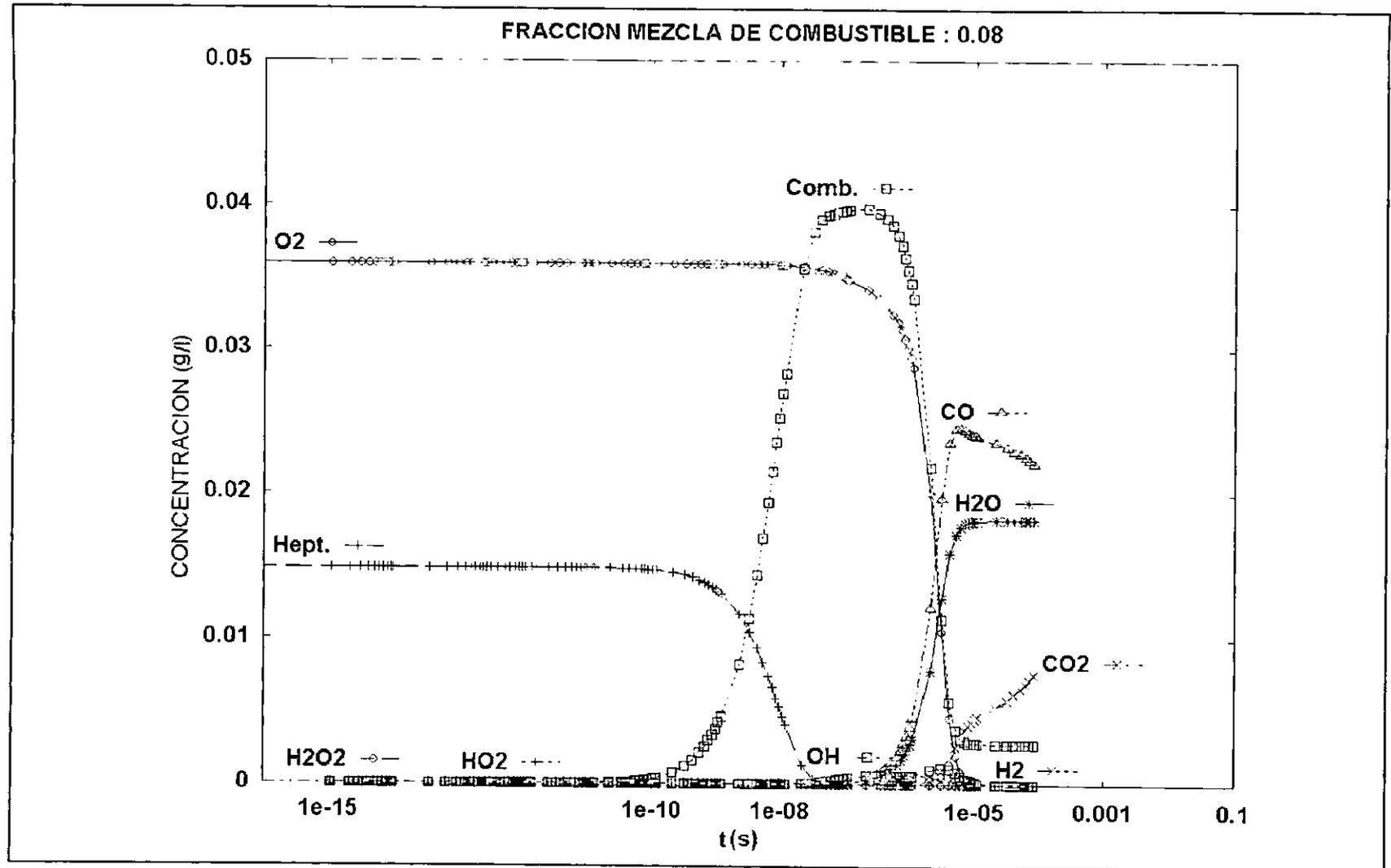


FIGURA C.3, Evolución de la concentración de productos y reactantes en función del tiempo, para una fracción mezcla n-Heptano/aire igual 0.08.

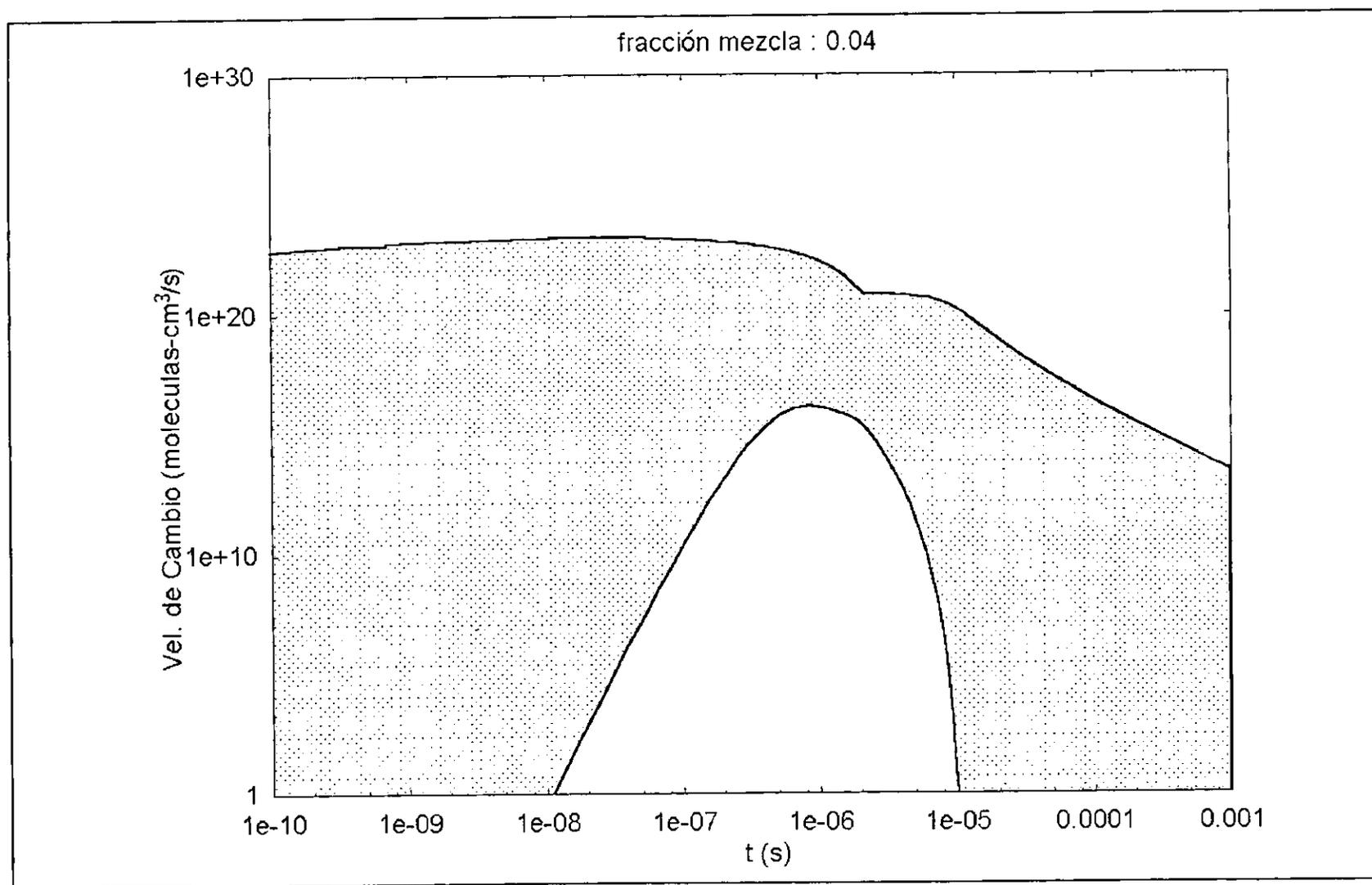


FIGURA C.4, Diagrama de cambio de concentración para el mecanismo de reacción de n-Heptano/aire, cuando se utiliza una fracción mezcla de 0.04.

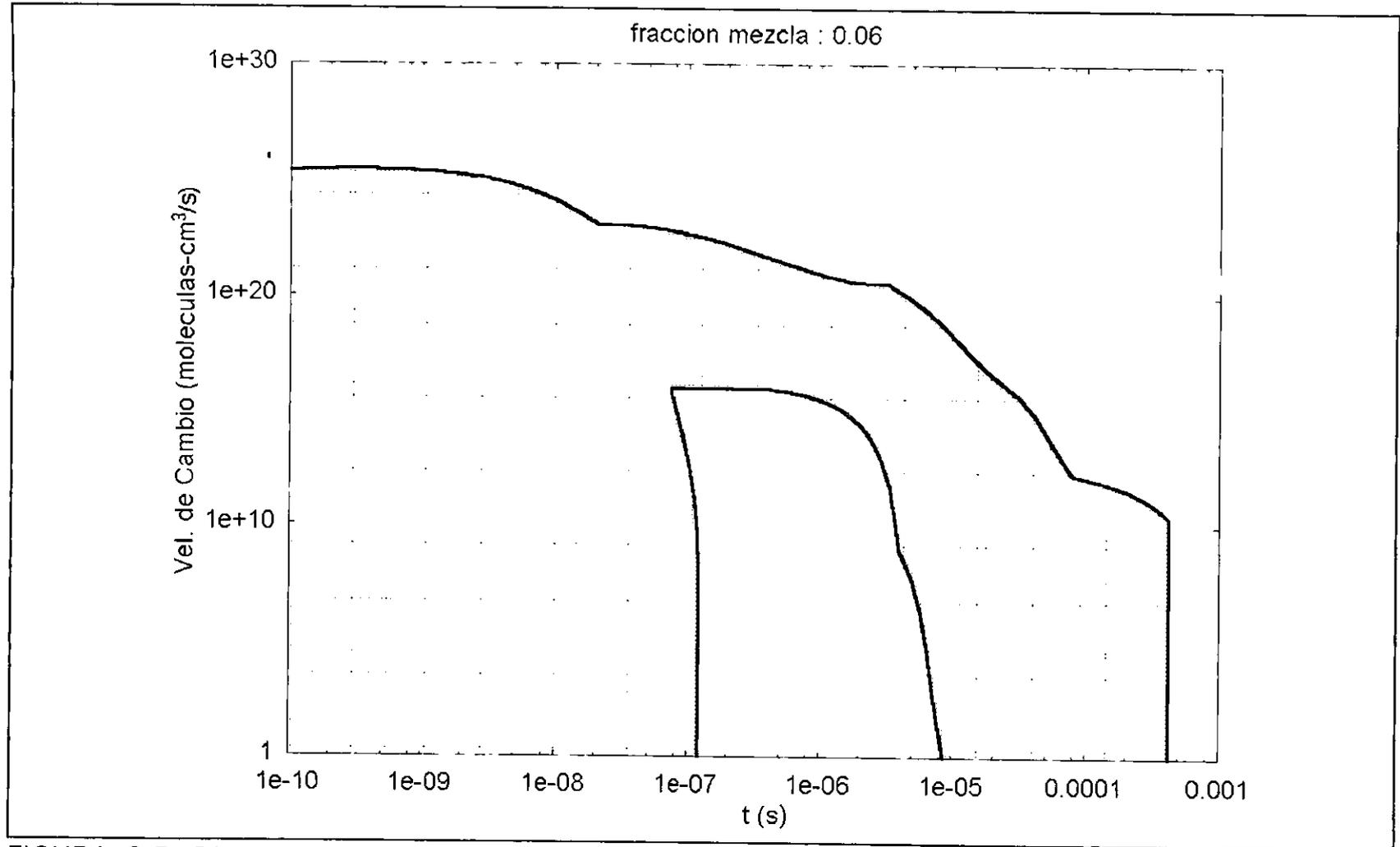


FIGURA C.5, Diagrama de cambio de concentración para el mecanismo de reacción de n-Heptano/aire, cuando se utiliza una fracción mezcla de 0.06.

XXII APENDICE B

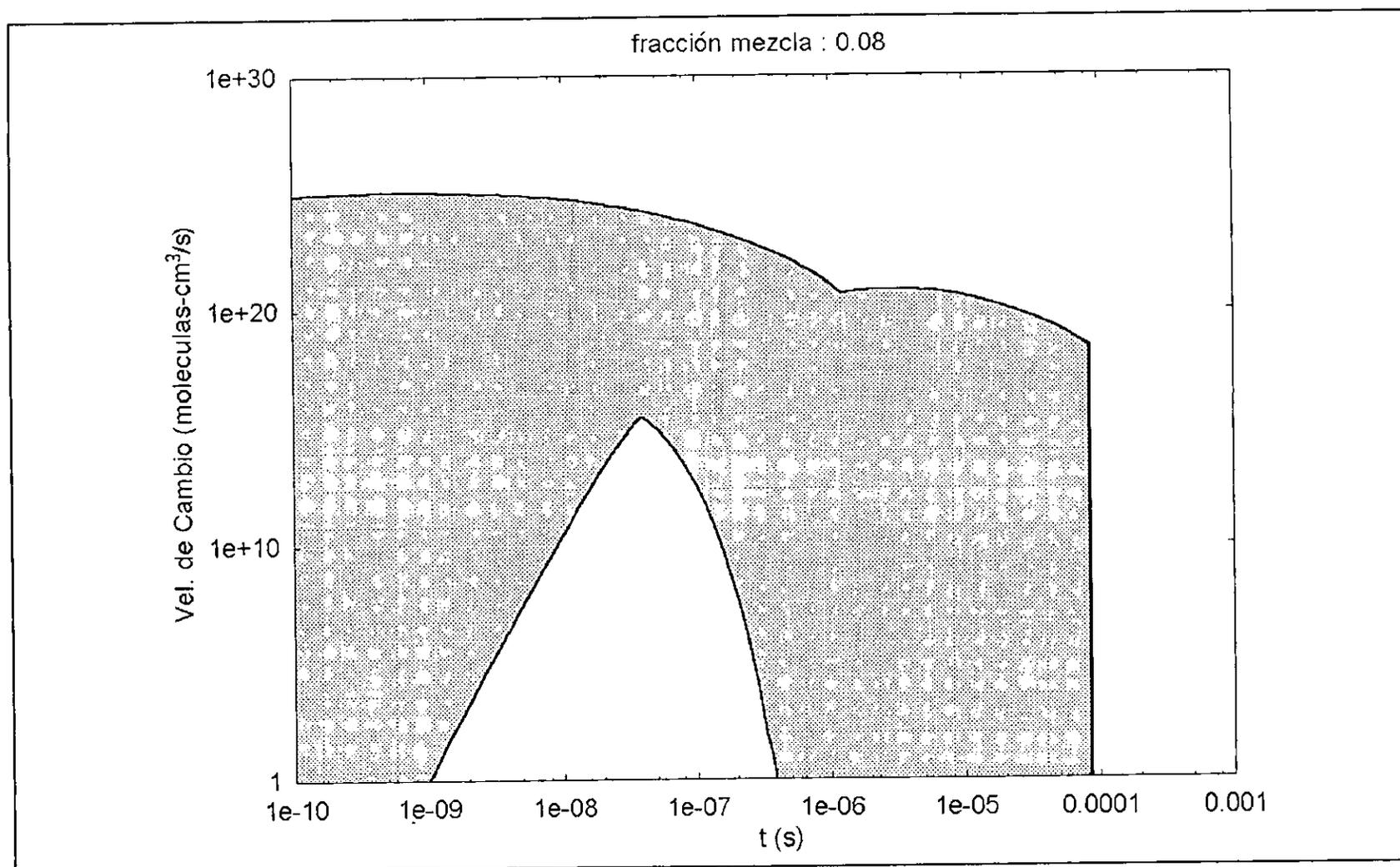


FIGURA C.6, Diagrama de cambio de concentración para el mecanismo de reacción de n-Heptano/aire, cuando se utiliza una fracción mezcla de 0.08.

## APENDICE C

### TEMPERATURA ADIABATICA

Si en un proceso de combustión suponemos que no hay disociación de los productos finales, ni cambio de energía potencial o cinética y considerando un proceso 'adiabático', es decir que la temperatura se obtiene a partir de la variación de energía generada por la reacción al combinar una cantidad dada de reactantes, la temperatura adiabática máxima se alcanzara cuando la reacción sea estequiometrica, el exceso de un reactante con respecto al valor necesario estequiometricamente dará una combustión incompleta, provocando que el reactante en exceso absorba parte de la energía generada por la reacción y por lo tanto habrá un menor incremento en la temperatura adiabática del sistema.

Si el proceso se realiza en un reactor cerrado y se considera adiabático el balance de energía se puede realizar a través de un balance de entalpía :

$$H_{p_i} = \Delta H_{p_i} + \int_{T_r}^T C_{p_{g_i}}^0 dT + H_{g_i}^0 \quad C.1$$

A partir de las condiciones el cambio total de entalpía (37) es :  $\Delta H=0$  .

$$\Delta H = \sum_{\substack{i=1 \\ PRO.}}^N v_i^{**} [H_{T_f}^0 - H_0^0] - [H_{T_0}^0 - H_0^0] + (\Delta H_f^0)_{T_0}$$

$$- \sum_{\substack{i=1 \\ REAC}}^N v_i^* [H_{T_f}^0 - H_0^0] - [H_{T_0}^0 - H_0^0] + (\Delta H_f^0)_{T_0} \quad C.2$$

En donde :

$v^{**}$  y  $v^*$  son los coeficientes de reactantes y los productos de la reacción.

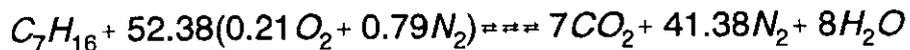
$H_{T_f}^0 - H_0^0$  Diferencias de entalpía entre el estado estándar a la temperatura final y la temperatura de referencia (0 K) (cal/mol).

## II APENDICE C

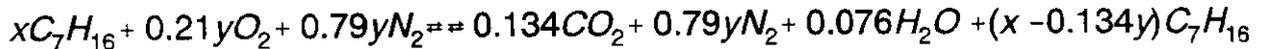
$H_{T_0}^0 - H_0^0$  Diferencias de entalpía entre el estado estándar a la temperatura de inicial ( $T_0 = 298.15$  K) y la temperatura de referencia (0 K) (cal/mol).

$\Delta H_f^0$  Calor Estándar de formación a 298.15 K.

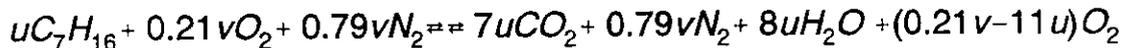
Si seleccionamos el 'heptano' ( $C_7H_{16}$ ) como combustible, la reacción estequiometrica (5) es :



La reacción para un exceso de n-heptano (x) - aire (y), es :



Reacción para un exceso de aire (v) - n-heptano (u) es :



Partiendo de la ecuación de balance de entalpía, los coeficientes de las reacciones anteriormente descritas, los datos de diferencias de entalpía para  $CO_2$ , CO,  $H_2O$ ,  $N_2$ ,  $O_2$  (42), n-heptano (34) y los calores de formación (45, 6), se genera un programa que varié la temperatura para calcular las diferencias

$H_{T_i}^0 - H_0^0$  , de tal forma que se llegue a una temperatura en donde

$\Delta H = 0 \pm \text{error}$  , a esta temperatura se le conoce como temperatura adiabática.

Si se hace un barrido (0.01 - 0.99) de la fracción mezcla de n-heptano-aire y n-propano-aire con variación de 0.1 % y en cada punto se calcula la temperatura adiabática, al comparar estos resultados con datos de la bibliografía (18) obtenemos las siguientes gráficas :

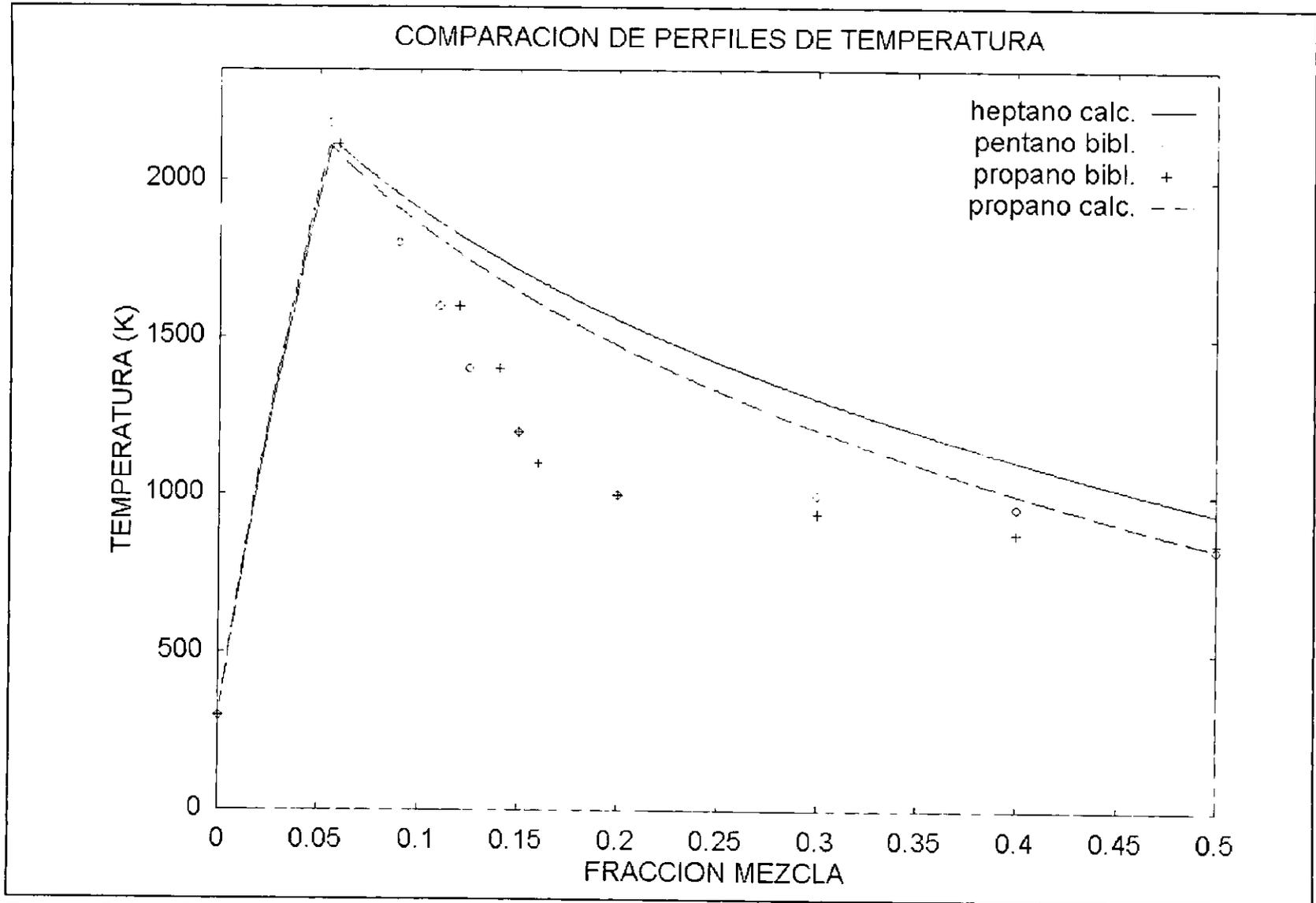


Figura C.1 : Comparación de Temperaturas Adiabaticas contra fracción mezcla, para Hidrocarburos Parafinicos (ALKANOS).

IV APENDICE C

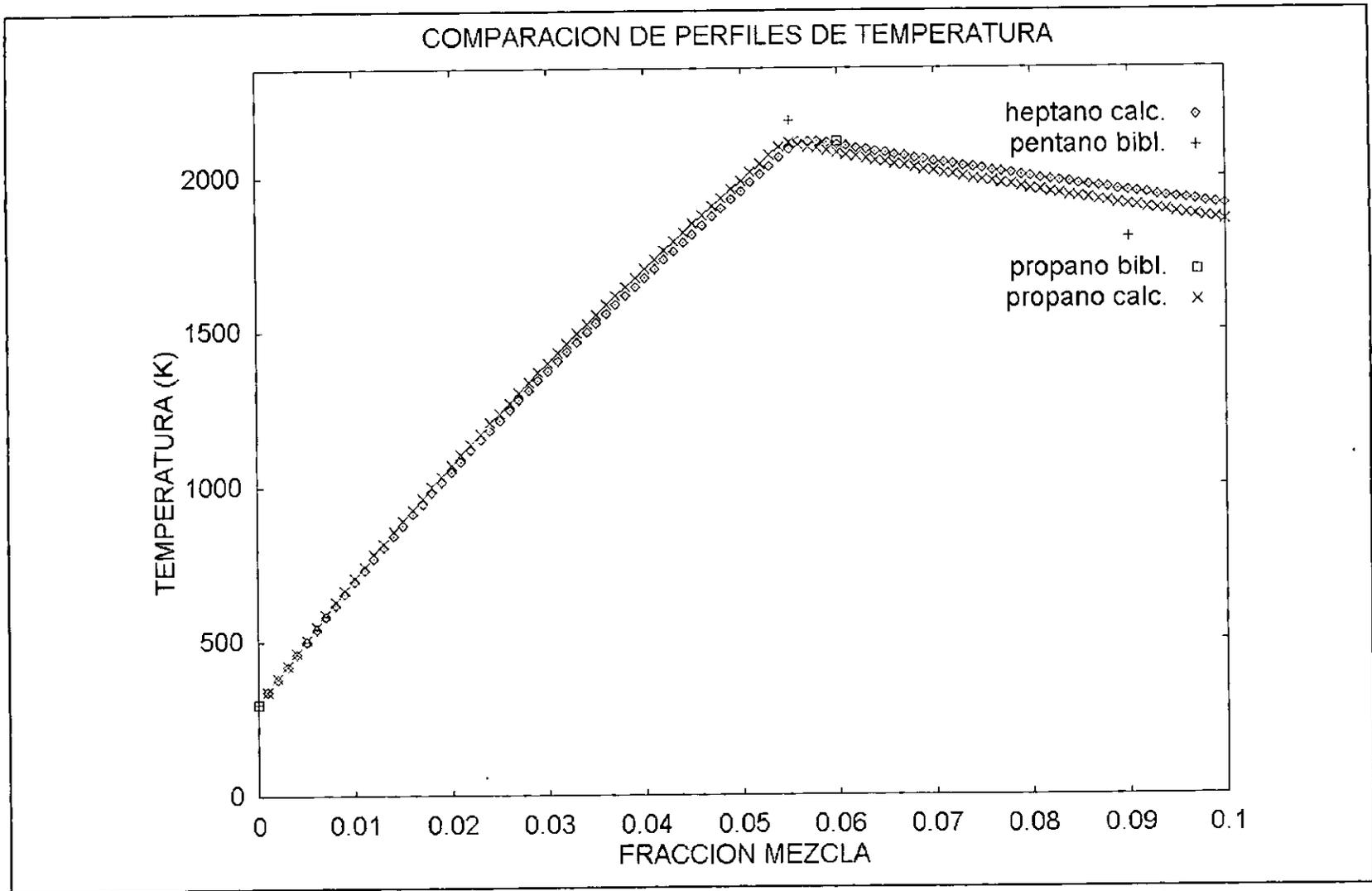


FIGURA C.2 : Comparación de Temperaturas Adiabaticas contra una sección de la fracción mezcla, para Hidrocarburos Parafinicos (ALKANOS).