



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA
DE MÉXICO**

FACULTAD DE INGENIERÍA

**“SIMULACIÓN Y VALIDACIÓN
EXPERIMENTAL DE UN QUEMADOR DE
PREMEZCLA POBRE CON UN MEDIO
POROSO”**

T E S I S
QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE
INGENIERO MECÁNICO

P R E S E N T A:

DANIEL ERIC SANGINÉS CORAL



DIRECTOR DE TESIS: DR. WILLIAM VICENTE Y RODRÍGUEZ

MÉXICO, D.F. CD. UNIVERSITARIA

2005



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.

Al escribir estas líneas ha culminando una etapa más de mi vida, de esfuerzo, dedicación, alegrías y tristezas. Ha sido un camino largo donde los obstáculos que sean presentado, han sido superados gracias a todas aquellas personas que me han proporcionado una sonrisa, un abrazo, una mirada, que me ha nutrido el alma para seguir adelante. Por lo que no me queda más que agradecer a Dios, por haber conocido a todas aquellas personas que me han apoyado en alguna parte de mi vida y me han permitido ser un mejor hombre.

A mi padre, que desde pequeño me has inculcado a ser mejor cada día, por tus consejos, por enseñarme que todos los sueños son posibles, por luchar hasta el último segundo. Gracias por mantener el ánimo por siempre.

A mi madre, por tu amor incondicional, por todo el tiempo y esfuerzo que me has dedicado, por brindarme toda la comprensión que una madre es capaz. Gracias por tus palabras de aliento, gracias por darme tu apoyo total en todo momento.

A mis hermanos, Oscar y César, por su compañía, por motivarme a pasar obstáculos infranqueables. Gracias por su apoyo incondicional, gracias por ayudarme y alentarme todos los días.

A William, por tu paciencia y dedicación que me diste en esta tesis, por enseñarme algo nuevo cada día, por brindarme tu amistad.

A Martín, por tus consejos y lecciones durante el desarrollo de este trabajo, por tus pláticas futboleras y por dejarme ser tu amigo.

A mis amigos César, Javier "Santa", Jorge "Najera", Michelle, Mario, por brindarme su amistad durante la carrera, por acompañarme durante el desarrollo de mi tesis platicando, riendo y aconsejando. Por los buenos momentos que pasamos juntos.

A David, Francisco, Gabriel, Jorge, Luis Arturo, Roberto, y Alejandro por todos los momentos que hemos compartido juntos, por su paciencia y dedicación en enseñarme a manejar, andar en bici, programar, por resolver mis dudas durante la carrera. Por viajar y emprender aventuras conmigo.

A mi abue Sofia, tíos y primos Sanginés. A mis tíos Guevara. A mis tíos Tito y Rosso por su cariño y por sus consejos prácticos.

A la UNAM por darme todo lo que soy. Al Instituto de Ingeniería por brindarme todas las facilidades. A DGAPA por el apoyo recibido durante el desarrollo del proyecto IN106902-3. A todos los profesores que me han ensañado, y dedicado paciencia durante mi educación.

A todos aquellos que alguna vez estreche la mano, a todos aquellos con los que pase momentos agradables, a todos aquellos amigos, amigas y parientes que por motivos de espacio no están en esta lista pero sí en mi corazón.

Índice general

1	Introducción.	1
	1 Antecedentes.	1
	2 Métodos de predicción.	4
	3 Objetivos de la tesis.	7
	4 Estructura de la tesis.	8
2	Ecuaciones de transporte.	9
	1 El problema considerado.	9
	2 Continuidad.	10
	3 Conservación de cantidad de movimiento.	10
	4 Conservación de las especies.	11
	5 Conservación de la energía total	13
	6 Ecuación de estado y flujo difusivo.	15
	7 Ecuación diferencial homogénea y fracción de mezcla.	18
	8 Promediado de las ecuaciones	20
	9 Modelos de radiación.	25
	10 Modelos de combustión.	27
	11 Mecanismos reducidos.	28
	11.1 Mecanismo global de un paso	28
	11.2 Mecanismo global de dos pasos	28
	12 Medio poroso	28
3	Método de solución.	30
	1 Introducción.	30
	2 Método de volúmenes finitos.	30
4	Predicción de una llama premezclada de propano y aire.	37
	1 Introducción.	37
	2 Configuración experimental.	37
	3 Detalles numéricos.	40
	4 Resultados de la simulación. Análisis.	42

5	Conclusiones y recomendaciones para investigaciones futuras.	54
A	Modelos de turbulencia.	57
	1 Cierres de segundo orden.	57
	2 Modelos de viscosidad turbulenta	61
	3 Modelo $k - \varepsilon$	62
B	Esquemas de discretización	65
	1 Esquemas lineales.	66
	2 Diferencias centradas	66
	3 Hibrido.	67
C	Archivo de datos de entrada Q1.	68
D	Subrutina GROUND.	74
	Bibliografía	77

Capítulo 1

Introducción.

1 Antecedentes

La atmósfera es esencial para la vida, por lo que sus alteraciones tienen una gran repercusión en el hombre y otros seres vivos y, en general en todo el planeta. Es un medio extraordinariamente complejo y la situación se hace todavía más complicada y difícil de estudiar cuando se le añaden emisiones de origen antropogénico en gran cantidad, como está sucediendo en estas últimas décadas. El aire constituye uno de los elementos básicos de todo ser vivo. Diariamente nuestros pulmones filtran unos 15 kg de aire, mientras que sólo absorbemos 2,5 litros de agua y menos de 1,5 kg de alimentos. Por ello, ya desde los tiempos más remotos, el hombre ha estado consciente del peligro que representa una atmósfera contaminada, tanto la creada de modo natural como la provocada por él mismo.

En particular, la situación geográfica del Valle de México, propicia fenómenos como el de la inversión térmica que tienden a agudizar problemas como el de la contaminación atmosférica, deteriorando sensiblemente la calidad del aire, y provocando efectos nocivos en el ser humano y medio ambiente. El sector transporte es la principal causa de formación de gases contaminantes. Actualmente, han surgido propuestas como vehículos ecológicos, combustibles alternativos, aditivos para combustibles, etc. Todo ello para disminuir las emisiones contaminantes en general, pero principalmente fuentes móviles.

En este sentido, se está trabajando en una propuesta que se refiere al desarrollo y construcción de un prototipo de un motor de combustión externa (MCE). La principal diferencia del MCE con los motores de combustión interna (MCI) consiste en que la combustión se efectúa fuera de los cilindros y además, el agua que enfría las camisas del motor se inyecta en el quemador donde se realiza la combustión, evaporándose y sobrecalentándose, situación que le permite mezclarse de mejor forma con el aire y el combustible. Posteriormente, los gases producto de la combustión se expanden en el cilindro de trabajo, generando trabajo útil.

La figura 1 ilustra la configuración del MCE, así como las partes principales que lo conforman, y se describe de manera muy simplificada el funcionamiento de dicho motor.

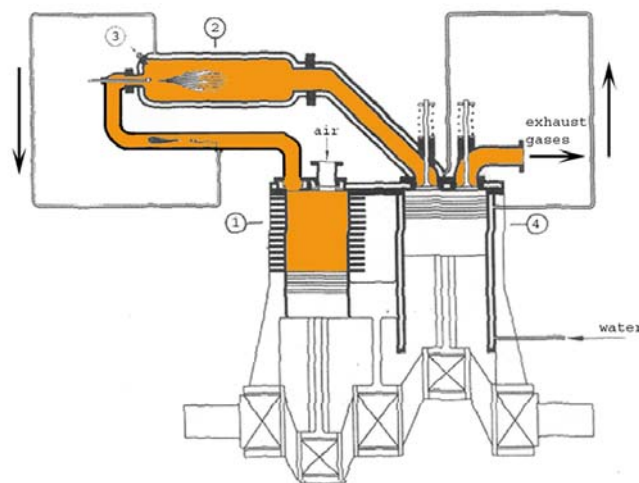


Figura 1: Configuración del motor de combustión externa.

El aire se comprime mediante el cilindro (1), y se introduce en el quemador (2), en el que también se inyectan combustible y el agua que proviene de las camisas que enfrían el motor y al propio quemador. La combustión se inicia con el disparo de la bujía (3), y la energía térmica liberada hace que se incremente el volumen y la temperatura de los gases, los que se expanden en el cilindro de expansión (4), generando trabajo útil.

Al realizarse la combustión en un sistema externo, y no en el sistema cilindro-embolo, que es lo que comúnmente se hace, se tiene un mejor control sobre las emisiones producidas en este proceso, y por lo tanto un beneficio al medio ambiente.

Para el MCE, se propuso un quemador, que se explicará con mayor detalle en el capítulo 4. Este quemador, básicamente consiste en un sistema compuesto de una entrada aire-combustible, previamente premezclados, y un coflujo de aire. El combustible es gas LP (propano, butano y otros hidrocarburos) y la mezcla combustible-aire es pobre, es decir existe un exceso de aire en la llama. Aguas abajo de la entrada del quemador se localiza un medio poroso, cuya finalidad es mejorar la mezcla de los gases, permitiendo un mejor aprovechamiento de la energía del combustible.

La combustión de premezcla pobre (o Lean Premixed Combustion, LPC), como la que opera el quemador, es una técnica empleada para reducir los niveles de NO_x . En LPC, el combustible y el oxidante se mezclan de forma previa a la entrada del quemador, en tales proporciones que existe un sustancial exceso de aire. El exceso de aire combinado con la premezcla, evita las regiones de altas temperaturas que están asociadas a la zona estequiométrica de las llamas no premezcladas, y por tanto conduce a una disminución de las emisiones de NO_x .

La riqueza de la mezcla de combustible y aire se indica frecuentemente mediante la comparación de la relación aire/combustible en la llama con la misma relación para proporciones estequiométricas (esto es, las proporciones de combustible y oxidante en la mezcla para tener una reacción completa sin que sobre ninguno de ellos). Al cociente de estas dos relaciones se le denomina tasa de equivalencia, ϕ . Por tanto, si $\phi > 1$, la mezcla es rica en combustible; si $\phi = 1$ la mezcla es estequiométrica; y si $\phi < 1$, la mezcla es pobre en combustible (es decir se tiene un exceso de oxidante).

El bajo costo de aplicación y operación, y los bajos niveles de NO_x que se pueden alcanzar, están propiciando la investigación del uso de la LPC, en los distintos sistemas con combustión. La

LPC no está libre de potenciales sistemas operativos. Estos incluyen la propagación de llama “aguas arriba” desde la zona de combustión a la mezcla de reactantes frescos (efecto conocido como “flashback”), el de la autoignición de la mezcla, o la extinción (local o total) de la llama debido a la proximidad de la composición al límite de flamabilidad pobre. Estos problemas de estabilidad en la llama pueden dar lugar a un incremento en las concentraciones de CO e hidrocarburos HC , que también son sustancias contaminantes.

Como corolario de lo expuesto, para el diseño de quemadores con LPC más seguros, limpios y eficientes se hace imprescindible dotarse de herramientas capaces de predecir con precisión el flujo fluido, la combustión y la formación de contaminantes, y sus complejas interacciones. Este es el contexto en el que se ha desarrollado la presente tesis.

2 Métodos de predicción

Anteriormente ha quedado establecido que el diseño de un quemador, como el propuesto para el MCE (eficiente y poco contaminante) requiere un conocimiento de las características del flujo fluido y de su interacción con la cinética química de la combustión.

El sistema a analizar es por tanto de geometría multidimensional y consta de una mezcla multicomponente de gases que están reaccionando químicamente. El flujo, como en la mayoría de las aplicaciones dentro de los procesos de combustión es turbulento. El sistema se puede analizar mediante dos técnicas: Ensayos experimentales en laboratorio y simulación numérica.

El trabajo experimental requiere un prototipo o modelo físico a escala del sistema, donde se puedan hacer ensayos, cuya construcción y operación es frecuentemente costosa y lenta. Por otro lado, las mediciones requieren técnicas de medida fiables y no intrusivas, que en muchas ocasiones son difíciles de implementar en un modelo o prototipo.

El costo y las escalas temporales asociadas a la experimentación están promoviendo el uso (frecuentemente con carácter de complementario) de la simulación numérica. Ésta es a menudo

más económica que la experimentación, y proporciona información completa y detallada de las variables relevantes del flujo.

Cuando en un flujo turbulento ocurre un proceso de combustión, como en el problema abordado en esta tesis, el análisis numérico del problema tiene la dificultad añadida de la complejidad de la cinética química de la combustión, que involucra, incluso para los combustibles más simples, un gran número de reacciones y de especies.

Para simular el flujo se tienen básicamente tres alternativas: la Simulación Numérica Directa (Direct Numerical Simulation, DNS), el uso de Ecuaciones Promediadas (Reynolds Averaged Navier-Stokes Equations, RANS) y la Simulación de Grandes Escalas (Large Eddy Simulation, LES).

La DNS consiste en discretizar directamente las ecuaciones instantáneas que gobiernan el movimiento del flujo reactivo, válidas tanto para flujo laminar como turbulento, y resolverlas numéricamente. Las ecuaciones que se resuelven son las de conservación de masa, las de cantidad de movimiento, la de la energía y la de las especies químicas. La discretización resuelve todas las escalas, espaciales y temporales, de las variables del flujo, y por tanto no requiere de ninguna aproximación o modelo. En un flujo turbulento sin reacción, para capturar todas las escalas el número de puntos de la discretización (espacio temporal) es función del número de Reynolds elevado prácticamente al cubo. Si el problema incluye especies reactivas, como es el caso, aparecerán escalas aún menores, que exigirán más detalle en la simulación. Cuando el flujo del sistema de interés es casi siempre turbulento y con un número de Reynolds muy alto, la aplicación de este método está limitada por la potencia de los equipos de cálculo.

La aproximación de la Simulación de las Grandes Escalas (LES) trata de resolver las ecuaciones para las fluctuaciones de mayor tamaño, modelando el efecto de las pequeñas fluctuaciones sobre ellas. Aunque esta técnica puede mejorar sustancialmente la predicción de la aerodinámica del flujo, sobre todo en flujos con estructuras transitorias de vorticidad que dominan

los procesos, la mayor parte de las reacciones químicas asociadas a la combustión siguen sucediendo en estructuras que están por debajo de la resolución de la malla, y por tanto hay que modelar su efecto en las estructuras resueltas.

Otra posibilidad de simulación es la de Ecuaciones Promediadas, extensamente utilizada en casos prácticos de interés industrial, y que consiste en promediar todas las escalas, espaciales y temporales, de las fluctuaciones turbulentas y resolver las ecuaciones de transporte en términos de variables medias del sistema. En esta tesis, se utilizará la alternativa de Ecuaciones Promediadas (RANS), por lo que será descrita con más detalle en el capítulo (2). En el método RANS, el transporte turbulento de la cantidad de movimiento, energía o especies químicas, se modela mediante alguno de los llamados modelos de turbulencia que en el apéndice A es tratado.

La modelización del término de reacción química, implica a menudo la comparación entre los tiempos característicos asociados a la cinética química t_q , y aquéllos asociados a una escala del movimiento turbulento, por ejemplo, la escala integral de la turbulencia t_I , o la escala de Kolmogorov t_{Ko} . El número de Damköhler es la relación entre estos tiempos, por ejemplo $Da_{Ko} = t_I/t_q$. (Se puede análogamente definir $Da_{Ko} = t_{Ko}/t_q$).

Una hipótesis a menudo utilizada es la llamada “hipótesis de química rápida”, en la que se supone que $t_q \ll t_I$ o $Da \gg 1$. Es esta situación se considera frecuentemente que la reacción química ocurre en una capa delgada que no es afectada internamente por la turbulencia, por lo que se puede simular como una llama laminar afectada en su forma por transporte turbulento. Esta aproximación se denomina “flamelet laminar” [24]. Para números de Damköhler muy altos, una simplificación adicional permite considerar la reacción infinitamente rápida, ignorar totalmente la tasa cinética de reacción. Entre esta clase de modelos se encuentran los modelos del tipo “lo que se mezcla reacciona” (mixed is burned), incluyendo el popular modelo Eddy Break Up (EBU) [14]. El modelo EBU supone que en la reacción química, el factor limitante es la velocidad a la que reactantes se mezclan a nivel molecular (ayudados por la turbulencia). La mayor parte de las

reacciones que liberan energía en la combustión pueden considerarse, condiciones normales, rápidas.

Por otro lado, si se supone que la reacción química es mucho más lenta que la tasa de mezcla de los reactantes ($t_q \ll t_t$, o equivalente $Da \gg 1$), entonces se puede considerar que el fluido multicomponente está perfectamente mezclado y la tasa de reacción se puede evaluar con valores medios de los escalares termoquímicos.

Cuando los tiempos característicos de la cinética química y escalas turbulentas se solapan, el uso de la función de densidad de probabilidad (FDPs) de los escalares termoquímicos pueden ser una opción para calcular la tasa media de reacción. La FDP contiene toda la información estadística sobre los escalares que influyen en la reacción, y por tanto permite calcular el término de reacción sin ninguna aproximación.

Para determinar la FDP en cada punto del flujo reactivo de interés existen fundamentalmente dos alternativas. Por un lado, se puede suponer una forma determinada (dentro de una familia) para la FDP (por ejemplo gaussiana), y calcular su forma concreta a partir de un cierto número de parámetros estadísticos (por ejemplo, su media y su varianza) obtenibles en cada punto a través de modelos. Alternativamente, se puede deducir y resolver (numéricamente) una ecuación de transporte para la FDP, similar a las utilizadas para el transporte de las especies químicas.

Dados los altos requerimientos en memoria y tiempo de cálculo por parte de las FDPs, en esta tesis se utilizará un modelo de tipo disipación viscosa, que incluye el efecto de las tasas de reacción química y el modelo Eddy Break Up. Este modelo se trata en el capítulo 2.

3 Objetivos de la tesis

El objetivo de la tesis es simular numéricamente la combustión de premezcla pobre, incluyendo la formación de contaminantes como CO y NO_x , dentro de un quemador propuesto para el Motor de Combustión Externa (MCE). Este quemador es de premezcla pobre y opera con una mezcla de

gas LP-aire. Para mejorar el proceso de mezcla y operar con bajas temperaturas se tiene un medio poroso y se suministra, adicionalmente, una corriente de aire. Las bajas temperaturas permitirán alcanzar bajos niveles de NO_x . Adicionalmente, para dicha configuración se tienen datos experimentales que permitirán evaluar los modelos utilizados.

En esta tesis la aerodinámica del flujo se simula con la alternativa de simulación de las Ecuaciones Promediadas (RANS). Para modelar el transporte turbulento de la cantidad de movimiento se utiliza el modelo de turbulencia $\kappa - \varepsilon$ estándar. Las ecuaciones que gobiernan el movimiento del flujo se resuelven mediante el método de volúmenes finitos. El término de reacción química se modela con un modelo del tipo de disipación viscosa.

4 Estructura de la tesis

Tras este capítulo introductorio, el capítulo 2 comienza con la presentación de las ecuaciones instantáneas que gobiernan el movimiento del flujo reactivo, y se deducen las ecuaciones promediadas que se resolverán en el modelo.

En el capítulo 3 se introduce al método de solución de las ecuaciones de transporte que describen el flujo reactivo: volúmenes finitos.

En el capítulo 4 se presentan las predicciones del quemador propuesto para el MCE. El capítulo comienza con la presentación de la configuración experimental y de los detalles numéricos que se utilizan en el modelo para simular este sistema. A continuación se muestran los resultados del cálculo y las correspondientes comparaciones con datos experimentales.

Las conclusiones que se derivan del trabajo realizado se exponen en el capítulo 5, así como algunas recomendaciones para trabajos futuros.

Capítulo 2

Ecuaciones de transporte.

1 El problema considerado

El objetivo de esta tesis es la simulación del flujo fluido dentro del quemador propuesto para el motor de combustión externa. El fluido en estas condiciones es una mezcla multicomponente de gases que están reaccionando químicamente. El flujo es turbulento y la geometría multidimensional. En este capítulo se presentan inicialmente las ecuaciones (instantáneas) que gobiernan el flujo.

En el capítulo introductorio se introdujeron las tres alternativas existentes para la simulación de flujos turbulentos reactivos: Simulación Numérica Directa (Direct Numerical Simulation, DNS), Simulación de Grandes Escalas (Large Eddy Simulation, LES), y promediado temporal de las ecuaciones (Reynolds o Favre Averaged Navier-Stokes Equations, RANS). En dicho capítulo se ha indicado que las exigencias computacionales de la DNS la hacen inviable excepto para números de Reynolds relativamente bajos, configuraciones sencillas y cinéticas químicas muy simples. La alternativa LES, aunque menos exigente computacionalmente, requiere también medios de computación considerables, por ser siempre un cálculo tridimensional. Las cinéticas químicas detalladas que se pretende usar en esta tesis la hacen inviable con los medios disponibles. Además, como se ha apuntado, al ser la cinética química de la combustión un fenómeno que sucede

fundamentalmente en las pequeñas escalas que no quedan resueltas por la discretización en LES, es necesario en cualquier caso formular y emplear modelos submalla para representarla.

Las alternativas de simulación LES y DNS requieren de memoria y tiempos de cálculo altos, por lo que la alternativa utilizada en esta tesis es el promediado de las ecuaciones de Navier-Stokes (RANS), que se presenta en la segunda parte de este capítulo. En la configuración simulada, se tiene un flujo con altas temperaturas, por lo que a continuación se presenta un modelo que representa el intercambio de calor por radiación. En la última parte de este capítulo se formulan los modelos de combustión y el modelo de Ergun, que representa el efecto del medio poroso en el flujo.

2 Continuidad

La ecuación de continuidad expresa la conservación de masa y se puede escribir como:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \bar{v}) = 0 \quad (1)$$

Donde v y ρ son la velocidad y la densidad instantáneas de la mezcla reactiva respectivamente.

3 Conservación de cantidad de movimiento

La conservación de cantidad de movimiento del flujo se describe por:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \bar{v}) + \nabla \cdot (\rho \bar{v} \bar{v}) = -\nabla p + \nabla \cdot \bar{\tau}' + \rho \vec{f}_m \quad (2)$$

Donde p es la presión, $\bar{\tau}'$ es el tensor de esfuerzos viscosos y \vec{f}_m son las fuerzas másicas, por ejemplo la gravedad, \vec{g} .

La ley de Navier-Poisson establece que el tensor de esfuerzos viscosos es [1]:

$$\bar{\tau}' = \mu(\nabla \bar{v} + \nabla \bar{v}^T) + (\mu_v - 2/3\mu)(\nabla \cdot \bar{v})\bar{\delta} \quad (3)$$

Donde μ es la viscosidad molecular de la mezcla, μ_v es el coeficiente de viscosidad volumétrico y $\bar{\delta}$ es el tensor delta de Kronecker. Por lo general, el coeficiente de viscosidad volumétrico se desprecia. [25].

Si se sustituye la ecuación (3) en (2), se obtienen las ecuaciones de Navier- Stokes:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \bar{v}) + \nabla \cdot (\rho \bar{v} \bar{v}) = -\nabla p + \nabla \cdot \left[\mu \left(\nabla \bar{v} + (\nabla \bar{v})^T - \frac{2}{3}(\nabla \cdot \bar{v})\bar{\delta} \right) \right] + \rho \bar{g} \quad (4)$$

4 Conservación de las especies

En una mezcla de N especies, la fracción másica de una especie química α es:

$$Y_\alpha = \frac{m_\alpha}{m_T} \quad (5)$$

Donde m_α es la masa de la especie y m_T es la masa total de la mezcla (contenida en el mismo volumen). De acuerdo con la definición (5), la suma de todas las fracciones másicas de las especies es uno. $\sum_{\alpha=1}^N Y_\alpha = 1$.

La conservación de la especie α se expresa en términos de la fracción másica por la ecuación:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_\alpha) + \nabla \cdot (\rho \bar{v} Y_\alpha) = -\nabla \cdot \bar{J}_\alpha + S_\alpha \quad \alpha = 1, 2, \dots, N \quad (6)$$

Donde \bar{J}_α es el flujo difusivo y S_α es la tasa de formación neta de la especie α .

Para satisfacer la ecuación de continuidad (1), se cumple que $\sum_{\alpha=1}^N S_\alpha = 0$ y $\sum_{\alpha=1}^N \bar{J}_\alpha = 0$. El flujo difusivo de la especie α , \bar{J}_α se trata más adelante.

Una expresión general para la tasa de reacción química, S_α , se puede obtener si se supone que un sistema químico con \mathbf{R} reacciones presenta la siguiente forma general:



Donde χ_α es el símbolo químico de cada especie, ν_α son los coeficientes estequiométricos, el superíndice f indica la reacción directa (forward) y b reacción inversa (backward). Cuando la reacción (7) es elemental, la tasa de producción S_α es:

$$S_\alpha = W_\alpha \sum_{r=1}^R \underbrace{(\nu_{\alpha,r}^b - \nu_{\alpha,r}^f)}_{\nu_{\alpha,r}} \omega_{\alpha,r} \quad \alpha = 1, \dots, N \quad (8)$$

Donde W_α es el peso molecular de la especie α y $\omega_{\alpha,r}$ es la velocidad de reacción de la especie α , debido a la reacción r . La tasa de reacción neta, $\omega_{\alpha,r}$, de la reacción r es:

$$\omega_{\alpha,r} = k_{f,r} \prod_{\alpha=1}^N [X_\alpha]^{\nu_{\alpha,r}^f} - k_{b,r} \prod_{\alpha=1}^N [X_\alpha]^{\nu_{\alpha,r}^b} \quad (9)$$

Donde $[X_\alpha]$ es la fracción molar de la especie α y $k_{f,r}$ y $k_{b,r}$ son respectivamente las constantes de reacción directa e inversa de la reacción r . La constante de reacción directa, $k_{f,r}$ según la ley de Arrhenius es:

$$k_{f,r} = A_r T^{b_r} e^{\left(\frac{-E_r}{R_c T}\right)} \quad (10)$$

Donde A_r es un factor pre-exponencial, b_r es el exponente de la temperatura, E_r es la energía de activación y R_c es la constante universal de los gases. La reacción constante de la reacción inversa $k_{b,r}$ se relaciona con la constante de reacción directa, $k_{f,r}$, mediante la constante de equilibrio:

$$k_{b,r} = \frac{k_{f,r}}{k_{e,r}} \quad k_{e,r} = \exp\left(-\frac{\Delta Z^o}{RT}\right) \quad (11)$$

Donde ΔZ^o es el cambio de energía de Helmholtz en el estado estándar.

El cambio de la energía libre de Helmholtz en el estado estándar es:

$$\Delta Z^o = \sum_{\alpha=1}^N (s_{\alpha}^b - s_{\alpha}^f) (U_{\alpha}^o - T_{\alpha} S_{\alpha}^o) \quad (12)$$

Donde U_{α}^o, T_{α} y S_{α}^o son respectivamente, la energía interna, temperatura y la entropía en el estado estándar de la especie α .

La ecuación (6) también puede formularse en términos de la molalidad, n_{α} (número de moles por unidad de masa de la mezcla), definida como:

$$n_{\alpha} = Y_{\alpha}/W_{\alpha} \quad (13)$$

5 Conservación de la energía total

La energía total de la mezcla es la suma de la energía interna, cinética y potencial:

$$e = u + \frac{1}{2}|\bar{v}|^2 + U \quad (14)$$

Donde e , u y U son respectivamente la energía específica total, interna y potencial, y $\bar{g} = -\nabla U$.

La ecuación de la energía total es:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\rho \left(u + \frac{1}{2}|\bar{v}|^2 + U \right) \right] + \nabla \cdot \left[\rho \bar{v} \left(u + \frac{1}{2}|\bar{v}|^2 + U \right) \right] = \nabla \cdot (\bar{\tau}' \cdot \bar{v}) - \nabla \cdot (p\bar{v}) - \nabla \cdot \bar{J}_e + \dot{Q}_r \quad (15)$$

Donde \bar{J}_e es el flujo difusivo de calor y \dot{Q}_r es el intercambio de calor por radiación.

En la ecuación (15), los dos primeros términos del lado derecho representan el trabajo de las fuerzas viscosas y de presión.

La entalpía de la mezcla se define como:

$$h = u + \frac{p}{\rho} \quad (16)$$

En términos de la entalpía de la mezcla, la ecuación de la energía total es:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\rho \left(h + \frac{1}{2} |\bar{v}|^2 + U \right) \right] + \nabla \cdot \left[\rho \bar{v} \left(h + \frac{1}{2} |\bar{v}|^2 + U \right) \right] = \frac{Dp}{Dt} + \bar{\tau}' : \nabla \bar{v} - \nabla \cdot \bar{J}_h + \dot{Q}_r \quad (17)$$

Donde $D/Dt = \partial/\partial t + \bar{v} \cdot \nabla$, es la derivada sustancial, y $\nabla \cdot (\bar{\tau}' \cdot \bar{v})$ es la disipación viscosa, Φ_v .

En flujos de baja velocidad, el número de Mach ($Ma = \bar{v}_o / \sqrt{\gamma R_c T_o}$, donde γ es la relación entre las capacidades térmicas a presión y a volumen constante) es pequeño, $Ma \ll 1$, y por lo tanto, la energía cinética comparada con la entalpía es despreciable.[26]

El flujo es de baja velocidad, pero el número de Froude es grande, $Fr = \bar{v}_o^2 / \bar{g} l_o \gg 1$ por lo tanto las fuerzas de inercia son mucho mayores que las gravitatorias.

El término Dp/Dt es importante si se tienen en el sistema de gradientes de presión extrema, como ondas de choque o detonaciones[25], que no es el caso a analizar en esta tesis.

El número de Eckert, $Ec = \bar{v}_o^2 / Cp T_o$ es un indicador de la contribución de la disipación de la energía cinética al nivel total de la entalpía. Cuando, como es el caso de los fluidos estudiados en esta tesis, $Ec \ll 1$, el término Φ_v se puede despreciar. El término \bar{J}_h se presenta más adelante.

El intercambio de energía por radiación, \dot{Q}_r , puede ser importante en flujos con combustión cuando las temperaturas son altas. Sin embargo inicialmente no se considera en esta tesis; más adelante, el efecto de la radiación en los flujos estudiados se evaluará con el modelo de pérdidas de calor por radiación.

6 Ecuación de estado y flujo difusivo

Las ecuaciones anteriores deben ser suplementadas con ecuaciones de estado que relacionen la presión, la densidad y la temperatura, y por expresiones para los flujos difusivos.

En términos de la densidad de las especies constitutivas, la densidad de la mezcla se calcula como:

$$\rho = \frac{1}{\sum_{\alpha=1}^N \frac{Y_{\alpha}}{\rho_{\alpha}}}$$

(18)

Si se supone una mezcla de gases ideales:

$$\rho = \frac{P}{RT \sum_{\alpha=1}^N \frac{Y_{\alpha}}{W_{\alpha}}}$$

(19)

La temperatura se calcula a partir de la definición de la entalpía de la mezcla:

$$h = \sum_{\alpha=1}^N Y_{\alpha} h_{\alpha} \quad (20)$$

Donde h_{α} es la entalpía de cada especie de la mezcla. La entalpía de la especie α es la suma de las entalpías térmica y química:

$$h_{\alpha} = \int_{T_o}^T C_{p_{\alpha}} T' dT' + \Delta h_{f,\alpha} \quad (21)$$

Donde $C_{p_{\alpha}}$ es el calor específico a presión constante de la especie, T_o es la temperatura de referencia y $\Delta h_{f,\alpha}$ es la entalpía de formación de la especie α , definido como el calor liberado cuando un kilomol de sustancia es formado a partir de sus elementos en el estado estándar.

El flujo difusivo, \bar{J}_{α} , se produce por gradiente de especies, de temperatura (efecto Soret), y de presión[26]. Estos dos últimos efectos, generalmente, son despreciados en flujos con combustión ([25] y [26]). El flujo difusivo, \bar{J}_{α} , se expresa según la ley de Fick, que se escribe como [25]:

$$\bar{J}_{\alpha} = \frac{\rho W_{\alpha}}{W_m^2} \sum_{\beta \neq \alpha}^N D_{\alpha\beta} W_{\beta} \nabla X_{\beta} \quad (22)$$

Donde los subíndices α y β indican las especies químicas, $D_{\alpha\beta}$ es el coeficiente de difusión binario, X_{α} es la fracción molar y W_m es igual a $\sum_{\alpha}^N X_{\alpha} W_{\alpha}$. Generalmente esta componente de flujo difusivo se suele aproximar con la expresión:

$$\bar{J}_{\alpha} = -D_{\alpha}^M \rho \frac{Y_{\alpha}}{X_{\alpha}} \nabla X_{\alpha} \quad (23)$$

Donde D_{α}^M es el coeficiente de difusión medio de la especie α en la mezcla de especies. El coeficiente D_{α}^M se puede calcular a partir del coeficiente de difusión binario

$$D_{\alpha\beta} : \quad D_{\alpha}^M = \frac{1 - Y_{\alpha}}{\sum_{\beta \neq \alpha}^N x_{\beta} / D_{\alpha\beta}} \quad (24)$$

El flujo difusivo de calor, \bar{J}_h se produce por conducción de calor, por el efecto Dufour y por el flujo difusivo de la especie. Estos dos últimos efectos son usualmente

despreciables en flujos con combustión ([25] y [26]); por lo tanto el término (\bar{J}_h) se expresa con la ley de Fourier:

$$\bar{J}_h = -k\nabla T \quad (25)$$

Donde k es la conductividad térmica de la mezcla y T es la temperatura.

El número adimensional de Schmidt de la especie α , Sc_α , se define como:

$$Sc_\alpha = \frac{\mu}{D_\alpha \rho} \quad (26)$$

El flujo difusivo de la especie J_α , en términos del número de Schmidt se puede

rescribir como:
$$\bar{J}_\alpha = -\Gamma_\alpha \nabla Y_\alpha \quad \Gamma_\alpha = \frac{\mu}{Sc_\alpha} = \rho D_\alpha \quad (27)$$

Si se aplican las suposiciones anteriores y se sustituyen las expresiones de flujos difusivos, las ecuaciones de continuidad, cantidad de movimiento, especies químicas y energía se pueden escribir como:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \bar{v}) = 0 \quad (28)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \bar{v}) + \nabla \cdot (\rho \bar{v} \bar{v}) = -\nabla p + \nabla \cdot \left[\mu \left(\nabla \bar{v} + (\nabla \bar{v})^T - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \bar{v}) \bar{\delta} \right) \right] + \rho \bar{g} \quad (29)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho Y_\alpha) + \nabla \cdot (\rho \bar{v} Y_\alpha) = \nabla \cdot \Gamma_\alpha \nabla Y_\alpha + S_\alpha \quad (30)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho h) + \nabla \cdot (\rho \bar{v} h) = -\nabla \cdot \bar{J}_h + Q_R \quad (31)$$

Cuando C_p puede suponerse constante, la expresión (25) se puede escribir como:

$$\bar{J}_h = -\frac{k}{C_p} \nabla h \quad (32)$$

El número de Prandtl, Pr , Se define como:

$$Pr = \mu \frac{C_p}{k} \quad (33)$$

En términos del número de Prandtl, la expresión (32) se puede escribir como:

$$\bar{J}_h = -\Gamma_h \nabla h \quad \Gamma_h = \frac{\mu}{Pr} \quad (34)$$

7 Ecuación diferencial homogénea y fracción de mezcla

En flujos con combustión, se hace frecuente la suposición de que los coeficientes de difusión de las especies y la entalpía son iguales:

$$\Gamma = \Gamma_\alpha = \Gamma_h \quad (35)$$

El número de Lewis, Le . Se define como:

$$Le = \frac{Sc_\alpha}{Pr} = \frac{k}{\rho D_\alpha C_p} \quad (36)$$

Por lo tanto, la hipótesis de igual difusividad implica que Le es uno.

Esta hipótesis de igual difusividad de las especies no suele ser apropiada en flujo laminar para especies ligeras, como H y H_2 , cuya menor masa les confiere una mayor difusividad. En flujo turbulento, como se presenta más adelante, el término de difusividad molecular es frecuentemente despreciable si se compara con el transporte turbulento $\bar{v}'' \phi''_\alpha$. Este flujo turbulento frecuentemente se modela como un término de difusión

turbulenta con igual coeficiente de difusión para las especies y la entalpía, por lo que la hipótesis de igual difusividad está justificada.

Para especies que no reaccionan (esto es, para especies inertes), y para otros escalares transportados que no tienen término fuente, la hipótesis de igual difusividad como consecuencia que sus ecuaciones de conservación tienen la misma forma:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi_z) + \nabla \cdot (\rho\bar{v}\phi_z) - \nabla \cdot \Gamma\nabla\phi_z = 0 \quad (37)$$

Donde ϕ_z es la especie inerte o la entalpía. A la ecuación (37) se le denomina ecuación “homogénea”, por no tener término fuente (S_α).

En las hipótesis enunciadas anteriormente para la ecuación de la entalpía, ésta no tiene términos fuente: por lo tanto, en la hipótesis de número de Lewis unitario, la entalpía también responde a la ecuación diferencial homogénea (37).

Es posible también combinar linealmente las fracciones másicas de las especies reactivas, convenientemente pesadas con los coeficientes estequiométricos en las distintas reacciones, de forma que el término fuente de la ecuación para la variable resultante es nulo. La ecuación (37) por tanto también representa estas combinaciones resultantes, que se denominan frecuentemente funciones de acoplamiento [26].

Cuando el sistema a estudiar tiene sólo dos condiciones de contorno distintas para estas variables que responden a la ecuación diferencial homogénea (esto, es, dos entradas de material), entonces todas las soluciones para esas variables están relacionadas linealmente a través de esas condiciones de contorno:

$$\frac{\phi_z - \phi_{z,2}}{\phi_{z,1} - \phi_{z,2}} = \frac{h - h_2}{h_1 - h_2}$$

(38)

Donde las subíndices 1 y 2 indican las entradas. El cociente de la expresión (38) se denomina fracción de mezcla, f , y por estar normalizada con las condiciones de contorno, varía entre 0 (en una entrada) y 1 (en la otra). En cualquier punto del dominio, f indica la fracción de material local que procede de la entrada 1, y $(1-f)$ la que procede de la entrada 2, independientemente del estado de reacción del fluido local. La fracción de la mezcla (38) también responde a la ecuación diferencial (37), al ser una combinación lineal de soluciones de esta ecuación.

8 Promediado de las ecuaciones

El flujo en los sistemas analizados en esta tesis, como en la mayor parte de los problemas de interés práctico, es turbulento. Una de las características de los flujos turbulentos es la variación aleatoria e irregular tanto en el espacio como en el tiempo de las propiedades del fluido.

El promedio de las ecuaciones instantáneas de conservación es una de las alternativas para la simulación de flujos turbulentos reactivos. Con este método se promedian todas las fluctuaciones de las escalas temporales y se resuelven ecuaciones de transporte para los valores medios de las propiedades del fluido. Estas ecuaciones no son cerradas, por lo cual se requieren modelos que reemplacen los términos no cerrados.

En flujos con densidad variable se pueden usar dos tipos de promedio. Uno es el promedio de Reynolds, el cual toma a la densidad como constante, y el otro es el promedio de Favre [3], que es ponderado con la densidad.

Con fines de ilustración, se presenta con el símbolo Φ cualquier propiedad transportada, tales como la fracción másica de la especie Y_α , la entalpía h y las

componentes de velocidad, \bar{v} . Los valores instantáneos de estas propiedades son escritos en términos de un promedio y una fluctuación turbulenta:

$$\Phi = \bar{\Phi} + \Phi' \quad (39)$$

$$\Phi = \tilde{\Phi} + \Phi'' \quad (40)$$

Los dos promedios $\bar{\Phi}$ y $\tilde{\Phi}$ están definidos como:

$$\bar{\Phi} = \lim_{n_e \rightarrow \infty} \frac{1}{n_e} \sum_{i=1}^{n_e} \Phi^{(i)} \quad \text{Promedio de Reynolds} \quad (41)$$

$$\tilde{\Phi} = \lim_{n_e \rightarrow \infty} \frac{1}{n_e} \sum_{i=1}^{n_e} \rho^{(i)} \Phi^{(i)} \quad \text{Promedio de Favre} \quad (42)$$

En donde $\Phi^{(i)}$ es la muestra i del conjunto de realizaciones n_e de un experimento.

De las definiciones anteriores:

$$\overline{\rho \Phi''} = 0, \quad \overline{\Phi''} \neq 0 \quad (43)$$

Con la definición de los dos promedios se obtiene:

$$\bar{\Phi} = \tilde{\Phi} + \overline{\Phi''} \quad (44)$$

$$\overline{\Phi''} = - \frac{\overline{\rho' \Phi''}}{\bar{\rho}} \quad (45)$$

$$\overline{\rho' \Phi''} = \overline{\rho' \Phi'} \quad (46)$$

$$\overline{u_i \Phi'} = u_i \tilde{\Phi}'' + \frac{\overline{\rho' u_i \Phi''}}{\bar{\rho}} + \overline{u_i \Phi''} \quad (47)$$

Uno de los motivos para aplicar el promedio de Favre en las ecuaciones instantáneas de transporte, es que cuando se aplica dicho promedio, genera ecuaciones muy sencillas que no incluyen correcciones con fluctuaciones de la densidad en las ecuaciones resultantes.

Si se aplica el promedio de Favre a las ecuaciones instantáneas de continuidad, cantidad de movimiento, energía y especies químicas, se obtienen las ecuaciones siguientes [25]:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{v}) = 0 \quad (48)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{v}) + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{v} \tilde{v}) = -\nabla \bar{p} + \nabla \cdot \left[\mu \left(\nabla \tilde{v} + (\nabla \tilde{v})^T - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \tilde{v}) \bar{\delta} \right) \right] - \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{v}' \tilde{v}') + \bar{\rho} \bar{g} \quad (49)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{Y}_\alpha) + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{v} \tilde{Y}_\alpha) = \nabla \cdot \Gamma_\alpha \nabla \tilde{Y}_\alpha - \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{v}'' \tilde{Y}_\alpha'') + \bar{S}_\alpha \quad (50)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{h}) + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{v} \tilde{h}) = -\nabla \cdot \tilde{J}_h - \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{v}'' \tilde{h}'') \quad (51)$$

Si el promedio de Favre se aplica en la ecuación homogénea se obtiene:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{\phi}_z) + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{v} \tilde{\phi}_z) = -\nabla \cdot (\Gamma \nabla \tilde{\phi}_z) - \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{v}'' \tilde{\phi}_z'') \quad (52)$$

Las ecuaciones anteriores tienen una forma idéntica a las correspondientes ecuaciones instantáneas, con un término adicional $(u''_i \Phi'')$, que involucra las fluctuaciones de la velocidad y el escalar Φ , y que representa físicamente el transporte convectivo de Φ por movimientos turbulentos. En flujos turbulentos, el término (I) de las ecuaciones anteriores es generalmente despreciable frente al término (II). Por lo tanto, las ecuaciones (48), (49), (50), (51) y (52) se escriben como:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{v}) = 0 \quad (53)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{v}) + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{v} \tilde{v}) = -\nabla \bar{p} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \bar{v}'' \bar{v}'') + \rho \bar{g} \quad (54)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{Y}_\alpha) + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{v} \tilde{Y}_\alpha) = -\nabla \cdot (\bar{\rho} \bar{v}'' \tilde{Y}_\alpha'') + \bar{S}_\alpha \quad (55)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{h}) + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{v} \tilde{h}) = -\nabla \cdot (\bar{\rho} \bar{v}'' h'') \quad (56)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{\phi}_z) + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{v} \tilde{\phi}_z) = -\nabla \cdot (\bar{\rho} \bar{v}'' \tilde{\phi}_z'') \quad (57)$$

Si el flujo es de baja velocidad ($Ma \ll 1$) generalmente se supone que las fluctuaciones de la presión son despreciables [6]. Por lo tanto, los valores medios de la densidad y la tasa de reacción química se pueden expresar como función de una presión de referencia p_0 . Donde $\tilde{\phi}_\alpha$ representa la fracción másica de las especies; para $\alpha = 1, \dots, N+1$.

Los flujos turbulentos $\bar{v}'' \Phi''$ de la ecuaciones (54), (55), y (56) son términos desconocidos que requieren modelización. El cierre del término $\bar{\rho} \bar{v}'' \bar{v}''$ de la ecuación media de cantidad de movimiento (54) se trata en el apéndice A.

El tratamiento del término $\bar{\rho} \bar{v}'' \tilde{\phi}_z''$, se puede consultar en Jones et al [6] y [7], y Lindstedt [11] ($\tilde{\phi}_z$ puede representar también la fracción másica de las especies si se incluye un término fuente).

Para poder hacer el cierre de las ecuaciones (53), (54), (55), y (56), hace falta también conocer el valor medio de la tasa de reacción de la especie química \bar{S}_α y la densidad $\bar{\rho}$. La densidad se puede escribir como:

$$\bar{\rho} = \rho(\bar{T}, \tilde{\phi}_1, \dots, \tilde{\phi}_N)$$

(61)

La modelización de la tasa de reacción media es una de las principales dificultades que se presentan en la simulación de flujos turbulentos reactivos. Esto se debe al efecto que tienen las fluctuaciones turbulentas en la tasa de reacción media. La tasa de reacción química es altamente no lineal, por lo que su media no puede ser calculada simplemente a partir de las variables medias, que son los resultados que se obtienen del modelo.

En la modelación del término de reacción química es útil referirse dos casos extremos que limitan el rango de situaciones posibles, que son la hipótesis de reacción infinitamente rápidas o muy lentas. Estas hipótesis se hacen a partir de comparaciones entre los tiempos característicos de la cinética química t_q , y de una escala de tiempos de turbulencia (por ejemplo, la escala integral, t_I). El número de Damköhler es la relación entre estos tiempos: $Da_{Ko} = t_I/t_q$. La hipótesis de química rápida implica que $t_q \ll t_I$ o $Da \gg 1$ y la de química lenta $t_q \gg t_I$ o $Da \ll 1$.

Si se supone que la cinética química es infinitamente rápida, se puede considerar que reacción ocurre en una capa delgada, que es conveccionada, alabeada, y estirada o comprimida por la turbulencia, pero cuya estructura interna no es afectada por ella. Este tipo de modelos ha dado lugar al desarrollo de modelos del tipo de “mixed is burned” y “laminar flamelet”. Los primeros ignoran totalmente la cinética química, y los segundos consideran que dentro de la zona de reacción el flujo es laminar. Un modelo del tipo “mixed is burned”, utilizado frecuentemente en la simulación de flujos industriales de llamas premezcladas, supone que la reacción química procede al paso dictado por la mezcla de reactantes a nivel molecular, dando lugar a los modelos de combustión de la familia Eddy Break Up (EBU) [14]. Estos modelos son utilizados en esta tesis, por los que serán discutidos en más detalle posteriormente en este capítulo.

En el otro extremo del rango de números de Danköhler ($Da \ll 1$) se supone que la mezcla tiene lugar de forma mucho más rápida que la reacción química, y por lo tanto se puede considerar al fluido como perfectamente mezclado a nivel molecular cuando la reacción química tiene lugar. La tasa de reacción media se puede entonces aproximar con valores medios de los escalares termoquímicos:

$$\bar{S}_\alpha \approx S_\alpha(\bar{h}, \bar{p}, \bar{Y}_1, \bar{Y}_2, \dots, \bar{Y}_N) \quad (62)$$

Por esta razón, esta reacción química se denomina a menudo “pseudo laminar”. En combustión, las principales reacciones liberadoras de calor son demasiado rápidas para que esta aproximación se válida [20 y 17].

9 Modelos de radiación

Las temperaturas alcanzadas en sistemas con combustión, como el del caso simulado, son suficientemente altas para que la transferencia de calor por radiación pueda ser significativa.

Para estudiar el efecto en los resultados de las pérdidas de energía por radiación, se incluye en la simulación un modelo sencillo de radiación, que se describe en esta sección.

La radiación emitida (y por tanto el calor transferido por radiación) es proporcional a la temperatura del cuerpo emisor a la cuarta potencia, y por tanto es un fenómeno muy importante a altas temperaturas (como las reacciones de combustión de este proyecto) y poco relevante a bajas. Todos los sistemas en los que se tienen temperaturas altas. La radiación es un fenómeno que depende asimismo del espacio y el tiempo, de la dirección y de la longitud de onda.

La ecuación para la intensidad radiante I es una compleja ecuación integro-diferencial que se integra espectralmente esto es, sin dependencia de λ (longitud de onda):

$$\frac{dI}{ds} = \underbrace{-aI}_{\substack{\text{Absorción} \\ A}} - \underbrace{sI}_{\substack{\text{Dispersión} \\ \text{"disipada"} \\ DD}} + a \underbrace{\frac{\sigma T^4}{\pi}}_{\substack{\text{Emisión} \\ E}} + \underbrace{\int_0^{4\pi} P(\Omega, \Omega') I d\Omega'}_{\substack{\text{Dispersión} \\ \text{recogida} \\ DR}} \quad \alpha = a \quad (63)$$

Donde s es el coeficiente de dispersión y a el coeficiente de absorción.

El significado de la ecuación es más evidente con el apoyo de la figura (1), que expresa las pérdidas y ganancias (por unidad de longitud) en intensidad I que sufre el rayo que viaja en una dirección determinada al atravesar un volumen de fluido. Las pérdidas son de dos tipos: en primer lugar (componente A), una fracción de I es absorbida por el medio (A); y en segundo lugar (componente DD), una fracción s de la intensidad que es dispersada por el medio en otras direcciones. Las ganancias en intensidad son debidas a otros dos factores: a la emisión de radiación por el volumen de fluido que tiene lugar en la dirección del rayo que se considera (contribución E); y la radiación que se recoge en la dirección del rayo proveniente de la dispersión (componente DR). Esta última tiene la forma de la integral de la probabilidad de que un rayo viaje en dirección Ω' disperse radiación de intensidad I en la dirección Ω considerada.

La resolución de la ecuación, incluso obviando el termino integral, es bastante compleja. Para resolverla se han desarrollado varios métodos computacionales, como el método de transferencia discreta y los métodos de flujos. Estos últimos son los más sencillos de implementar en códigos de volúmenes finitos y son computacionalmente muy eficientes. Puesto que además proporcionan una simulación de una precisión razonable serán utilizados en esta tesis.

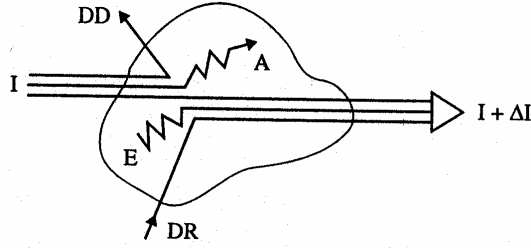


Figura 1: Representación grafica de la ecuación para la intensidad radiante.

El método de flujos considera la intensidad radiante dependiente sólo de la posición, el tiempo y los cosenos directores. La dependencia de la longitud de onda se elimina por integración. La ecuación de la intensidad radiante se menciona a continuación:

$$\frac{d}{dx} \left[\frac{1}{a+s} \frac{d}{dx} R \right] = (a+s)R - 2aE - \frac{S}{3} (R_x + R_y + R_z) \quad (64)$$

Donde R representa el flujo que cruza la superficie en dirección x , y , o z . En términos de intensidad radiante se expresara como R_x , R_y o R_z respectivamente.

10 Modelos de combustión

El modelo de Eddy Break Up supone que el factor limitante en la tasa de reacción química no es la velocidad cinética, sino la velocidad a la que los reactantes se mezclan a nivel molecular. Esta velocidad de mezcla se puede representar mediante un término proporcional a la velocidad de disipación de las fluctuaciones del escalar, a menudo modelada como:

$$\bar{S}_c = -C_{EBU} \bar{\rho} \frac{\bar{\epsilon}}{k} \sqrt{Y_c'^2} \quad (65)$$

Donde C_{EBU} es una constante y $Y_c'^2$ es la varianza de Favre de la fracción másica del combustible. Para escalares pasivos, esta varianza puede modelarse mediante una ecuación de transporte; para escalares reactivos, el término de reacción química da lugar a

correlaciones no cerradas, difíciles de modelar y que en combustión turbulenta pueden ser importantes.

Para evitar este problema, Magnussen et al [14] proponen sustituir $\sqrt{Y_c'^2}$ por la fracción másica media de la especie con menor presencia:

$$\bar{S}_c = -C_{EBU} \bar{\rho} \frac{\bar{\epsilon}}{\bar{k}} \left(Y_c, \frac{Y_o}{s}, \frac{Y_p}{1+s} \right) \quad (66)$$

Donde s es el coeficiente estequiométrico y los subíndices c , o y p se refieren al combustible, oxidante y productos respectivamente. (El coeficiente estequiométrico es la masa de oxidante por unidad de combustible que se necesita para la reacción completa).

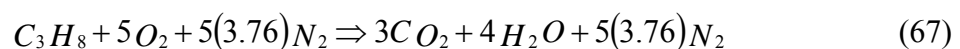
11 Mecanismos reducidos

Inclusive la combustión de incluso los hidrocarburos más sencillos como el propano, se tiene de decenas de especies y cientos de reacciones. Para disminuir el número de especies, es práctica habitual reducir el sistema químico detallado a un número tratable de especies. El mecanismo resultante se denomina “mecanismo reducido”.

Un mecanismo reducido debe de ser suficientemente detallado para predecir de forma correcta los fenómenos de interés al ser aplicado en una simulación. A continuación se presentan los mecanismos reducidos de uno y dos pasos de reacción para el propano usados en este trabajo.

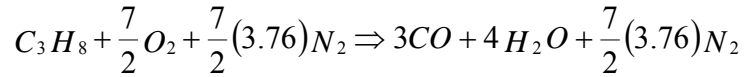
a. Mecanismo global de un paso

El mecanismo químico de un paso para el propano es:

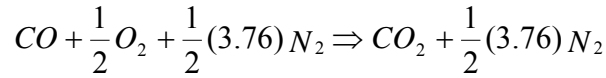


b. Mecanismo global de dos pasos

Para el propano, un mecanismo global de dos pasos de reacción es:



(68)



(69)

Las tasas químicas de las reacciones (66), (68) y (69) se calculan con la expresión (65).

12 Lecho granular

Para tener un mayor nivel de mezclado en los gases y un mejor confinamiento de la llama de propano, un medio poroso es introducido en el quemador. La presencia de este medio poroso produce una caída de presión en el flujo, por lo que en esta sección se describe un modelo que representa este efecto.

Para puntualizar las ecuaciones que describen un lecho poroso se entenderá como permeabilidad a la capacidad del medio poroso para permitir que un fluido lo atraviese sin cambiar su estructura interna. La permeabilidad de un fluido cuando pasa a través de dicho lecho granular normalmente se determina por la ecuación de Forchheimer:

$$\frac{\Delta P}{L} = \frac{\mu}{k_1} v + \frac{\rho}{k_2} v^2$$

(70)

Donde ΔP representa una caída de presión, L es el espesor del medio poroso, ρ y μ son la viscosidad y la densidad del fluido, respectivamente, y v es el flujo volumétrico por unidad de área del fluido.

En la ecuación (72), la caída de presión para un fluido incompresible esta dada por:

$$\Delta P = P_i - P_o$$

(71)

Donde P_i y P_o son las presiones absolutas a la entrada y salida del medio poroso, respectivamente. La k_1 y k_2 significan las constantes de permeabilidad de Darcyan, estos parámetros representan las propiedades estructurales del medio poroso.

De las correlaciones que incorporan características de un medio poroso, la propuesta por Ergun, es la más usada. Esta correlación se determina a partir del flujo a través de un lecho granular. En general tiene la misma forma que la ecuación (62), y se expresa como [15]:

$$\frac{\Delta P}{L} = 150 \frac{(1-\varepsilon)^2}{\varepsilon^3} \frac{\mu v}{d_p^2} + 1.75 \frac{(1-\varepsilon)}{\varepsilon^3} \frac{\rho v^2}{d_p} \quad (72)$$

Donde ε es la porosidad y d_p es el diámetro de las partículas que conforman el medio poroso.

Capítulo 3

Método de solución.

1 Introducción

El objetivo de este capítulo es presentar el método de solución de las ecuaciones que componen el modelo del flujo reactivo, presentadas en el capítulo anterior.

Para resolver las ecuaciones que caracterizan la aerodinámica del flujo medio se utilizará el método de volúmenes finitos, que se describe a continuación.

2 Método de volúmenes finitos

Las ecuaciones medias de continuidad, cantidad de movimiento y del modelo de turbulencia introducidas en el capítulo anterior, se pueden representar mediante una ecuación general, donde la variable dependiente está representada por $\tilde{\phi}$:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{\phi}) + \nabla \cdot (\bar{\rho}\mathbf{u}_i\tilde{\phi}) - \nabla \cdot (\Gamma_\phi \nabla_\phi) = \bar{S}_\phi \quad (1)$$

Donde Γ_ϕ es el coeficiente de difusión y \bar{S}_ϕ es el término fuente. Los términos del lado izquierdo de la ecuación (1) son el término transitorio, convectivo y de difusión respectivamente. Los términos Γ_ϕ y \bar{S}_ϕ están especificados para cada variable $\tilde{\phi}$.

(Para la ecuación de continuidad $\tilde{\phi} = 1$.)

La ecuación (1) se puede discretizar con el método de volúmenes finitos. Con este método, el dominio se divide en pequeños volúmenes de control (figura 1), asociando a cada uno de ellos un punto nodal. De forma similar se discretiza el tiempo en intervalos temporales. La ecuación diferencial se integra en cada volumen de control y en cada intervalo temporal, y el resultado es una ecuación discretizada que relaciona los valores de $\tilde{\phi}$ para un determinado grupo de puntos nodales. Esta ecuación algebraica expresa el principio de conservación de $\tilde{\phi}$ en el volumen finito, de la misma manera que la ecuación diferencial lo expresa para un volumen infinitesimal. La ecuación algebraica para un nodo P puede expresarse en forma general como:

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

(2)

Donde el subíndice I representa las celdas vecinas, i la cara entre las celdas P e I , T el valor correspondiente en el intervalo temporal anterior, y B el término fuente. La deducción detallada de la ecuación (2) puede consultarse en numerosos textos de dinámica de fluidos computacional, por ejemplo en Patankar [18], Ferziger-Peric [4].

En el caso de una malla cartesiana, escalona (“staggered”) y uniforme (celdas de iguales dimensiones espaciales), un volumen de control bidimensional (por sencillez) es como el que se muestra en la figura 2 (el espesor de la celda en dirección z puede considerarse la unidad.) En una malla escalonada, las variaciones se encuentran definidas en el centro de la celda, mientras que las componentes de velocidad correspondientes a la celda se encuentran desplazadas en cada dirección a las caras de la celda.

En la figura 2 se muestra la notación de la celda y de sus vecinas. Dada una celda P , sus vecinas se notarán según las iniciales de los puntos cardinales (en inglés) en las

direcciones “x” e “y” y como “Low” y “High” en la dirección z. Las caras de la celda se notan con la misma nomenclatura, pero con letras minúsculas.

El tiempo también se discretiza. Las celdas en la dirección temporal se llaman intervalos temporales. La celda P en el paso temporal se nota como T .

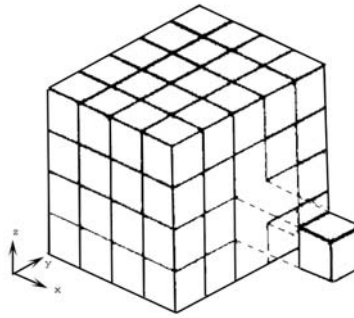


Figura 1: Representación del sistema discretizado en volúmenes finitos.

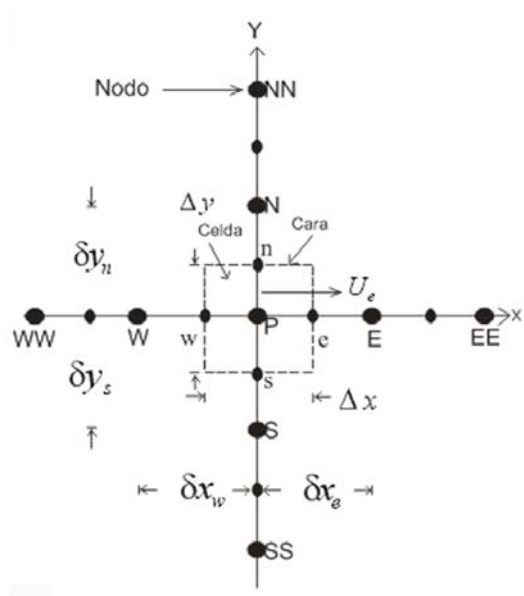


Figura 2: Diagrama esquemático de un volumen de control bidimensional.

A continuación, se presentan los términos de la ecuación discretizada (2).

Definiendo los símbolos F , D , y Pe como:

$$F = \bar{\rho} \tilde{v}_i, \quad D = \frac{\Gamma}{\delta l}, \quad Pe = \frac{F}{D} \quad (3)$$

Donde \bar{v}_i es la velocidad en la cara i , δ_i es la distancia entre los nodos que incluyen la cara i y Pe es de número de Peclet, que es una relación entre la convección y la difusión, \bar{v} es la velocidad en la cara i y x_i . (Las expresiones F y D representan el efecto de los términos convectivo y difusivo de la ecuación de transporte (1) respectivamente.)

Los coeficientes a_i de la ecuación (2) son:

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

(4)

Los valores F y D en la cara de la celda de la ecuación (4) son:

$$F_i = (\bar{\rho} \bar{v})_i \Delta_i \quad D_i = \frac{\Gamma_i \Delta_i}{(\delta_i)}, i=n, s, e, w \quad (5)$$

Donde Δ_i es la longitud de la cara i .

Para determinar F_i se necesita conocer $\bar{\rho}$ y \bar{u}_i en la cara de la celda. El cálculo del término convectivo de la ecuación de transporte (1) requiere también el conocimiento de la variables escalar, $\tilde{\phi}$, en la cara de la celda. La velocidad \tilde{v}_i está calculada en la cara de la malla escalonada; pero $\bar{\rho}$ y $\tilde{\phi}$ están calculados en el nodo y necesitan ser interpolados a la cara para calcular los coeficientes a_i de la ecuación discretizada (2).

La obtención de estas variables en la cara de la celda es importante en precisión y convergencia de la solución. El cálculo de $\bar{\rho}$ y $\tilde{\phi}_i$ da lugar a los llamados esquemas de discretización. La función $f(|Pe|)$ de la ecuación (4) depende del esquema de interpolación. Por ejemplo, en el esquema de diferencias desplazadas, $f(|Pe|)=1$, y para el sistema híbrido [18]:

$$f(|Pe|) = \max(0.1 - 0.5|Pe|) \quad (6)$$

En el apéndice B se presentan estos esquemas de discretización lineales con más detalle y que son los que se utilizarán en esta tesis en la discretización del término convectivo de las ecuaciones de cantidad movimiento, energía, especies químicas y modelo de turbulencia.

El coeficiente para el término transitorio es:

$$a_T = \frac{\bar{\rho}_T \Delta x \Delta y}{\Delta t} \quad (7)$$

Para el cálculo del término D_i (5) se necesita obtener el coeficiente de difusión, Γ , en la cara de la celda. El coeficiente Γ no es necesariamente una constante, sino probablemente función de valores variables que se conocen en los nodos (por ejemplo la temperatura), y por tanto es necesario interpolarlo en la cara. Esta interpolación puede ser aritmética o armónica. Para la cara e, por ejemplo, estas interpolaciones son:

$$\Gamma_e = \frac{\Delta x (\Gamma_P + \Gamma_E)}{2 \delta x_e} \quad \Gamma_e = \frac{2 \delta x_e}{\Delta x \left(\frac{1}{\Gamma_P} + \frac{1}{\Gamma_E} \right)} \quad (8)$$

El término fuente de la ecuación general (1), \bar{S}_ϕ , se linealiza como:

$$\bar{S}_\phi = \bar{S}_{\phi,c} + \bar{S}_{\phi,v} \tilde{\phi}_p \quad (9)$$

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

Con esta suposición, los términos B y a_p de la ecuación (2) son:

$$B = \bar{S}_{\phi_c} \Delta x \Delta y + a_T \tilde{\phi}_T \quad (10)$$

$$a_p = a_e + a_w + a_n + a_s + a_T - \bar{S}_{\phi, \nu} \Delta x \Delta y$$

(11)

La ecuación (2) se aplica en cada celda del dominio, para cada $\bar{\phi}$ y para cada paso temporal Δt , por lo que se tiene un sistema de ecuaciones lineales (los coeficientes a pueden depender, directa o indirectamente de $\tilde{\phi}$, por lo que el sistema es realmente pseudo-lineal).

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

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

Entre los algoritmos iterativos que se basan en este procedimiento están los de la familia SIMPLE (Semi-Implicit Method for Pressure- Linked Equations) ([18], [19] y [22]). El algoritmo utilizado en esta tesis para resolver el problema de acoplamiento velocidad-presión pertenece a esta familia.

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

Para procurar acelerar esta convergencia se utiliza un método de relajación de algunas de las variables dependientes y propiedades. Se emplean dos tipos de relajación: la inercial

y la lineal. La relajación inercial se emplea para las velocidades y los parámetros de turbulencia, y aumenta la diagonal de la matriz de coeficientes el agregar a la ecuación de cualquier variable $\tilde{\phi}$ el término fuente:

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

(12)

Donde V_P es el volumen de la celda P , Δt_f es el intervalo de tiempo falso y el superíndice n se refiere al número de iteración.

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

$$\tilde{\phi}_P^{(n)} = \alpha \tilde{\phi}_P^{sol} + (1 - \alpha) \tilde{\phi}_P^{(n-1)} \quad (13)$$

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

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

En esta tesis se usa el código de fluido-dinámica computacional PHOENICS [12] para resolver las ecuaciones que describen la aerodinámica del flujo: continuidad, cantidad de movimiento, energía, especies químicas y turbulencia.

Capítulo 4

Predicción de una llama premezclada de propano y aire.

1 Introducción

En este capítulo se presentan las predicciones de la simulación del quemador propuesto para el motor de combustión externa con el modelo descrito en el capítulo 3.

El capítulo comienza con la presentación de la configuración experimental y de los detalles numéricos que se utilizan para simular la llama. A continuación se muestran algunos resultados calculados, que muestran la configuración general de la llama, y comparaciones con datos experimentales de las especies químicas. Un análisis cualitativo muestra que la estructura de la llama se representó adecuadamente. En general, los resultados obtenidos muestran una buena precisión para las especies de concentración mayoritaria y minoritaria que se compararon.

2 Configuración experimental

La configuración experimental del quemador propuesto para el motor de combustión externa se diseñó y construyó en el Laboratorio de Control de Emisiones de la Facultad de Ingeniería de la UNAM.

La figura 1 muestra el esquema de la configuración experimental del quemador. La sección de prueba del quemador es de forma cilíndrica, de 2 pulgadas (50.8 mm) de diámetro y una longitud de 400 milímetros. En el inicio del quemador, se localiza una boquilla de 1 pulgada (25.4 mm) de diámetro, y posteriormente se tiene un lecho granular de 2 pulgadas (50.8 mm). El dispositivo tiene varias entradas laterales y a lo largo del quemador para admisión de aire, agua y combustible al quemador, en el caso de que se desee estudiar el efecto de las mismas en las emisiones. Adicionalmente, a lo largo del quemador se tienen salidas laterales para hacer las mediciones de las concentraciones de los gases de combustión.

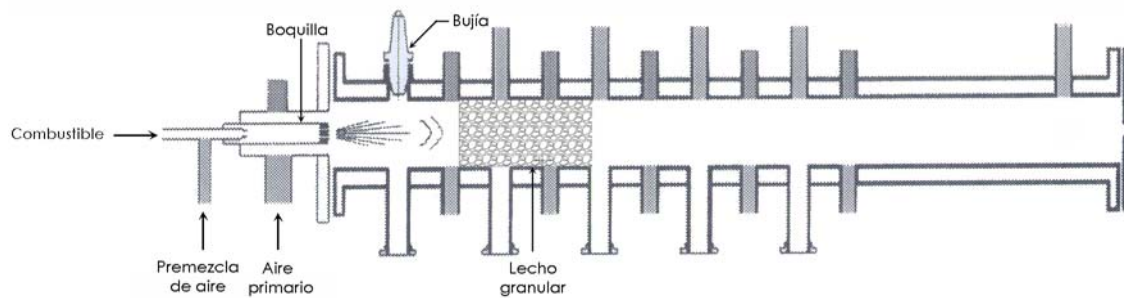


Figura 1: Esquema del quemador experimental.

La boquilla es una placa plana que consta de 13 orificios de 3mm de diámetro cada uno, dispuestos de la siguiente manera: 1 agujero en el centro, y 6 entradas colocadas en un arreglo circular a 12.5 milímetros de diámetro. Las 11 perforaciones periféricas están a 23 milímetros de diámetro con orificios de 1.5mm. En la figura 2 se muestra la disposición original y el arreglo que se implementó para realizar la representación numérica.

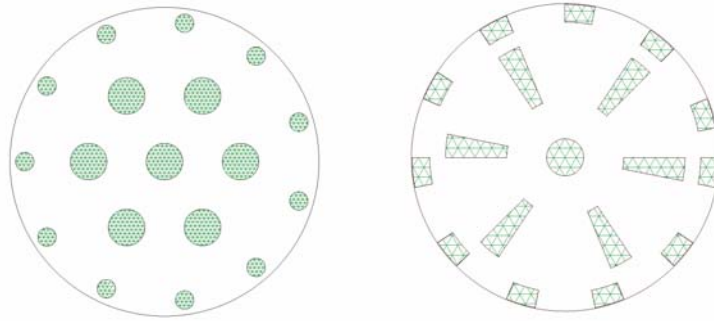


Figura 2. Configuración experimental y ajuste geométrico para realizar la malla en la dirección transversal.

El lecho granular se colocó a $5\frac{9}{16}$ pulgadas (141.3 mm) de la boquilla y tiene una longitud de $4\frac{3}{4}$ pulgadas (120.6 mm). Este es un material cerámico, con un diámetro de partícula de 3 mm. En la figura 3 se ilustra con más detalle cada una de las partes del quemador.

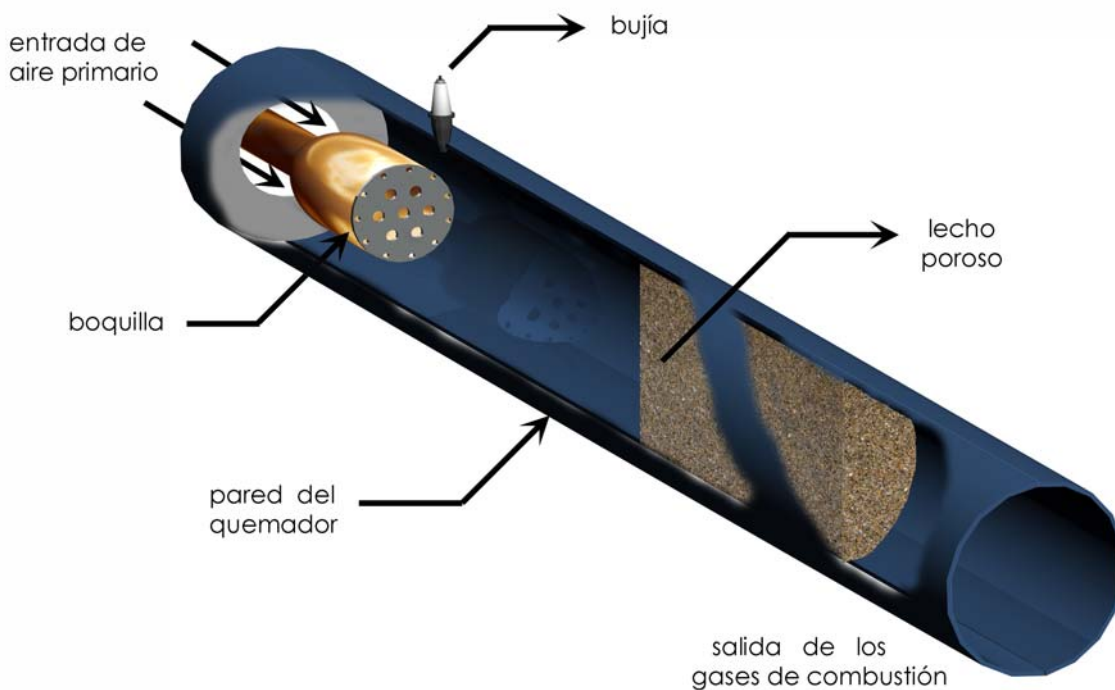


Figura 3: Configuración del quemador con cada una de sus partes.

Dentro de la boquilla fluye una mezcla de gas LP y aire, y en su exterior, un flujo de aire anular. La presión y la temperatura de la mezcla propano y aire son 75.84 KPa y 300 K respectivamente. En la entrada de la sección de prueba (boquilla), la velocidad media, es $v_1 = 10.6 \text{ m/s}$, a su vez esta entrando aire primario por el espacio anular a una velocidad de $v_2 = 0.5 \text{ m/s}$. En la tabla 1 se resumen los parámetros experimentales de esta llama de propano y aire.

Presión manométrica	75.845 KPa
Temperatura	300 K
Volumen específico	7.356 m³/kg
Densidad	0.136 kg/m³
Gasto másico del gas	0.00833 kg/seg
Gasto volumétrico del gas	612.925 cm³/seg
Velocidad del gas	10.6 m/seg
Velocidad del aire	0.5 m/seg

Tabla 1: Datos experimentales obtenidos de la llama de propano.

En el experimento se tomaron medidas de concentraciones medias transversales a lo largo del quemador con un analizador de gases. Las concentraciones de las especies que se midieron son: O_2 , CO_2 y CO .

3 Detalles numéricos

El flujo reactivo dentro del quemador se simuló con el modelo descrito en el capítulo 3 (método de solución). La simulación de la llama se hace en tres dimensiones. Con fines de ahorro de memoria y tiempo de cálculo, el dominio de la simulación es la mitad del quemador en la sección transversal, y empieza en la salida de la boquilla.

El dominio se discretizó con una malla en coordenadas cilíndrico-polares por lo que los 13 orificios circulares de la boquilla se representaron como trapecios circulares, como se mostró en la figura 2. Un trapecio circular es equivalente a la de un trapecio rectilíneo

que tenga por bases los arcos rectificadas. El dominio del cálculo se discretizó con una malla de 32 x 22 x 120 celdas en la dirección angular (θ), radial (r) y axial respectivamente. En la figura 4 se muestra de forma simplificada la malla en un plano z .

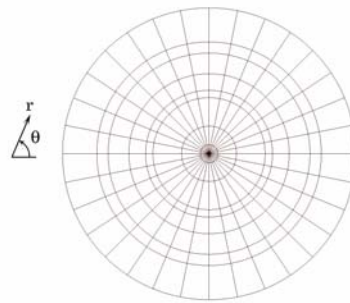


Figura 4. Representación del dominio de la simulación en la dirección (θ) y (r).

En la dirección axial el dominio de cálculo se extiende 400 milímetros. En los primeros 30 milímetros se realizó un refinado de la malla de 30 celdas. Este arreglo se propone porque en esta zona se produce principalmente la reacción de la mezcla aire-combustible. Adicionalmente se tienen zonas de recirculación que requieren ser representadas adecuadas adecuadamente. En la segunda sección de 370 milímetros se colocaron 90 celdas (aproximadamente 1 celda cada 4 milímetros). La Figura 5 ejemplifica la malla en un plano angular θ .

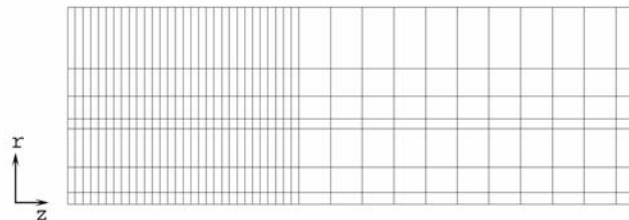


Figura 5. Representación del dominio de la simulación en la dirección (r) y (z), al inicio del proceso.

En el modelo numérico, la turbulencia se simula con el modelo $k - \varepsilon$ estándar. La discretización del término convectivo de las ecuaciones de transporte se hace con el esquema de discretización híbrido.

El combustible del quemador es gas LP, que es una mezcla multicomponente de gases combustibles de composición aproximada: propano (90%), butano (6%) y otros hidrocarburos (4%). La composición del mismo es mayoritariamente propano, por lo que en la simulación se representa la combustión del gas LP como si fuera propano.

Los datos de entrada se capturan en el archivo Q1, este desarrolla las rutinas que están contenidas dentro del programa de PHOENICS, en el apéndice C se presenta dicho archivo. En el apéndice D, se muestra la subrutina GROUND. Esta es llamada desde el programa Q1 con la instrucción GRND, y contiene los programas que no están cargados en PHOENICS.

4 Resultados de la simulación. Análisis

En esta sección se presentan los resultados obtenidos del flujo reactivo en el quemador, para los mecanismos de reacción de uno y dos pasos de reacción. Inicialmente, se muestran algunos resultados de los cálculos, y después se comparan las predicciones con datos experimentales de especies químicas de concentración mayoritaria y minoritaria. Las especies químicas de concentración mayoritaria que se consideraron en la simulación son: C_3H_8 , O_2 , N_2 , H_2O y CO_2 , y las de concentración minoritaria son: NO y CO .

- **Líneas de corriente.**

La figura 6 muestra el contorno de las líneas de corriente en el quemador. En la figura se aprecia como, después de la boquilla y antes del medio poroso, se forma zonas de recirculación, que estabilizan la llama. Después de estas zonas, básicamente, el flujo se presenta uniforme a lo largo del quemador.

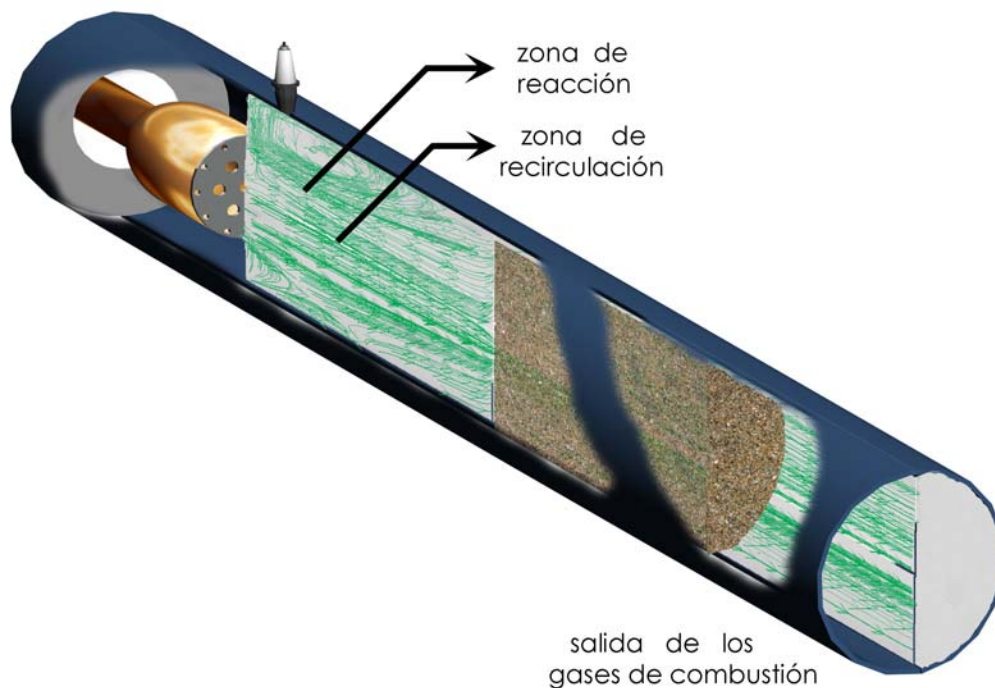


Figura 6: Líneas de corriente a lo largo del quemador.

- **Temperatura y especies de concentración mayoritaria.**

En la figura 7 se presenta la evolución axial de la temperatura a lo largo del quemador. En la zona de recirculación se alcanzan aproximadamente temperaturas de 1922 K, que es próxima al valor de la temperatura adiabática. La alta temperatura de estos gases produce la ignición de la mezcla. Después de la zona de recirculación, la temperatura a lo largo del quemador mantiene valores cercanos a los 1700 K, como se ilustra en la figura 8. Esta disminución en la temperatura se debe al efecto de la transferencia de calor por radiación y a la entrada del aire primario, que se mezcla con los gases productos de combustión. Las predicciones de los dos mecanismos de reacción no presentan diferencias apreciables en el cálculo de la temperatura.

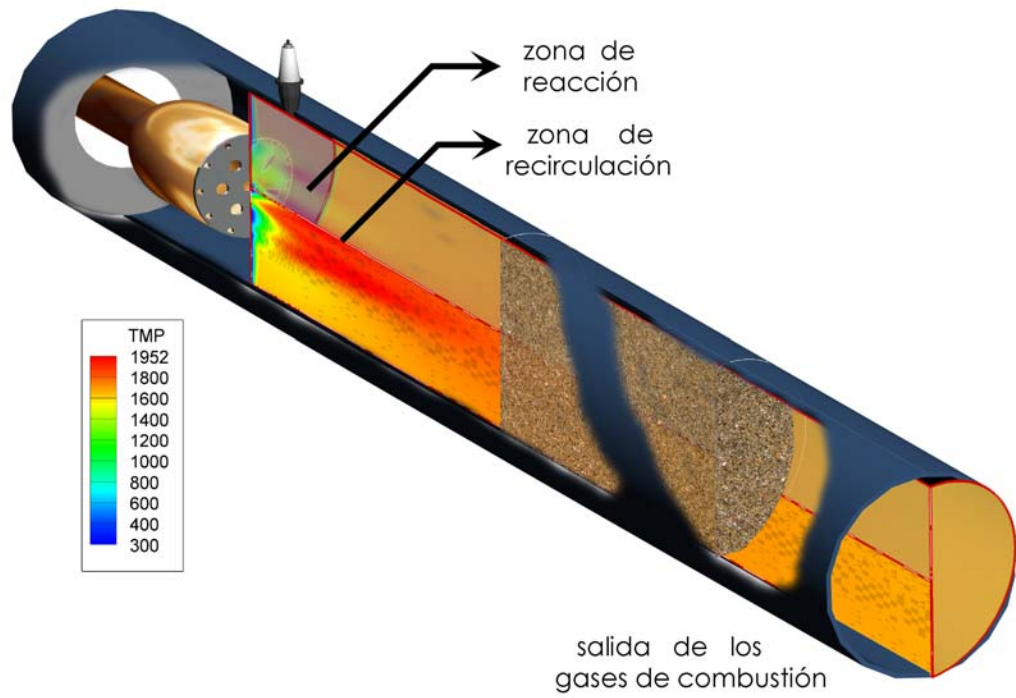


Figura 7: Contornos de temperatura para un mecanismo de reacción de dos pasos.

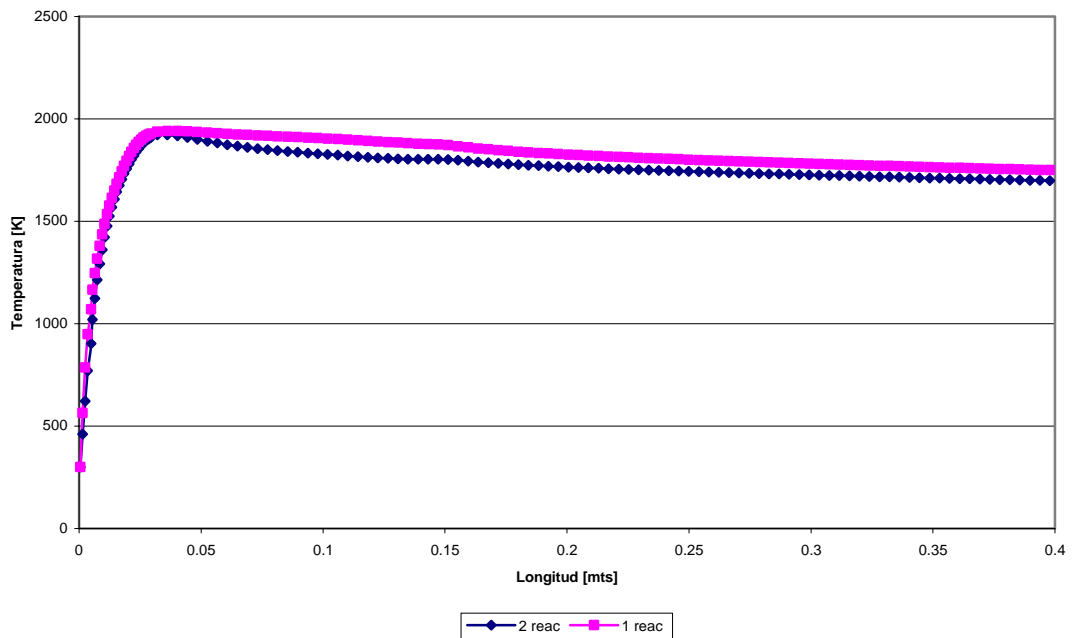


Figura 8: Perfil axial de temperatura para los mecanismos de uno y dos pasos de reacción.

Los contornos de fracción másica de C_3H_8 se muestran en la figura 9. Desde la boquilla, se suministra la mezcla aire y combustible, y en los primeros 5 centímetros del quemador se realiza la combustión del propano, por lo que en esta región se tiene un incremento en la temperatura debido a la liberación de calor del combustible. Estas zonas de reacción son próximas a las zonas de recirculación, que son básicamente, zonas de gases productos de la combustión. En las zonas de recirculación, las predicciones de propano son uniformes y próximas a su valor de equilibrio ($C_3H_8=0$). Este proceso se observa adicionalmente en la figura 10, que muestra la variación axial de la fracción volumétrica de C_3H_8 en el centro del quemador. Las predicciones del C_3H_8 con ambos mecanismos de reacción son parecidas.

En la figura 11 se muestran los contornos de CO_2 , en términos de su fracción másica, para un mecanismo de reacción de dos pasos. La formación de dióxido de carbono, se origina en todos aquellos procesos en que tiene lugar la combustión de sustancias que contienen carbono, como es el caso, y es un indicador del grado de reacción de la mezcla. El CO_2 se empieza a formar en la zonas de reacción, y en la zona las zonas de recirculación se tienen valores homogéneos y cercanos a su valor de equilibrio, $CO_2=9.81\%$. La fracción volumétrica de dióxido de carbono esta directamente ligada con el comportamiento de la temperatura en el sistema. Esto se puede observar en la figura 12. El comportamiento predicho para el CO_2 por los mecanismos de uno y dos pasos de reacción es parecido. Las diferencias entre las predicciones y los datos experimentales para el CO_2 se debe a que se esta representando la combustión del gas LP con reacciones de propano.

En el proceso de combustión es indispensable la presencia de oxígeno para que éste se lleve a cabo. En la figura 13, se aprecia como se empieza a consumir el oxígeno en las zonas de reacción, al principio del quemador, de la misma manera en la que se consume el

propano. Debido a que se inyecta aire anular por la periferia de la boquilla, existe un arrastre de oxígeno hacia la parte central del quemador. Este transporte representa un aumento del 1% de la fracción volumétrica de oxígeno después de haber ocurrido la combustión. En la figura 14 se presentan los perfiles axiales de oxígeno en la dirección radial para un mecanismo de reacción de uno y dos pasos, junto con los datos de los valores obtenidos experimentalmente. Comparaciones con datos experimentales, muestran que el O_2 se predice adecuadamente.

El comportamiento del nitrógeno en términos de su fracción másica se muestra en la figura 15. En las primeras estaciones se presenta una disminución en la fracción másica del nitrógeno, que se debe a la formación de pequeñas concentraciones de óxidos de nitrógeno (NO_x). Este comportamiento se confirma en la figura 16, que presenta los perfiles del N_2 en la dirección axial para los mecanismos de uno y dos pasos de reacción. Después de esta zona, los valores del nitrógeno se mantuvieron constantes. Ambos perfiles predichos por los dos mecanismos de reacción presentan una forma parecida.

En la figura 17 se presentan los contornos de agua, que se forma como producto de las reacciones químicas que ocurren dentro del proceso de combustión. El agua representa aproximadamente el 12.3% de los productos generados en éste, y las concentraciones predichas son muy cercanas a los valores de equilibrio en porcentaje volumétrico ($H_2O=13.09\%$). En la figura 18, que muestra la variación axial de H_2O , se confirma este comportamiento. Las predicciones de los mecanismos de uno y dos pasos no muestran diferencias apreciables.

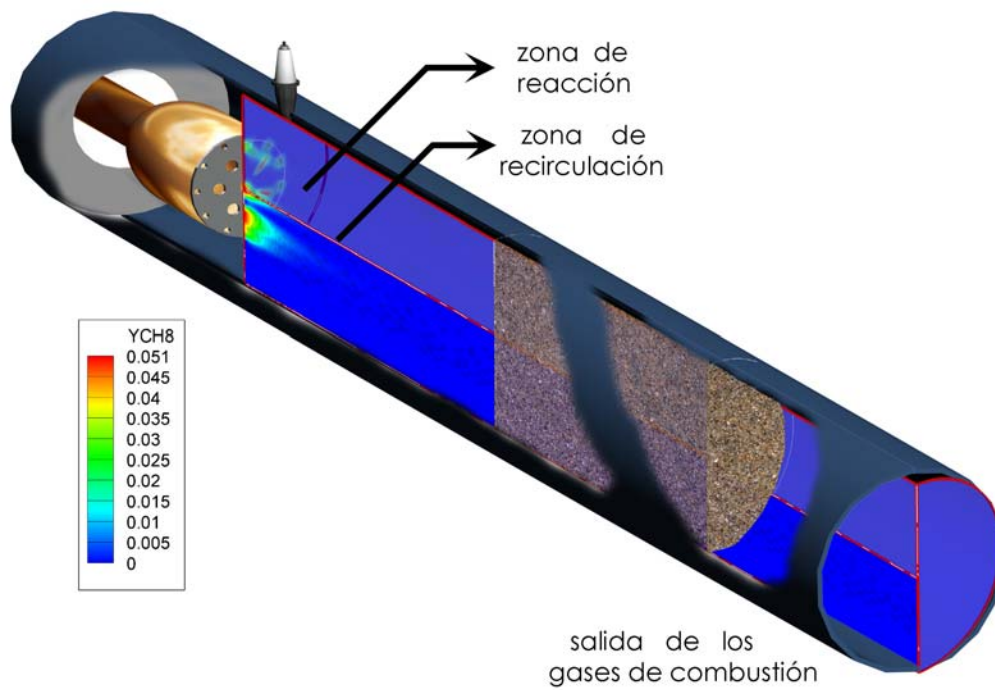


Figura 9: Contornos de fracción másica de C_3H_8 para un mecanismo de reacción de dos pasos.

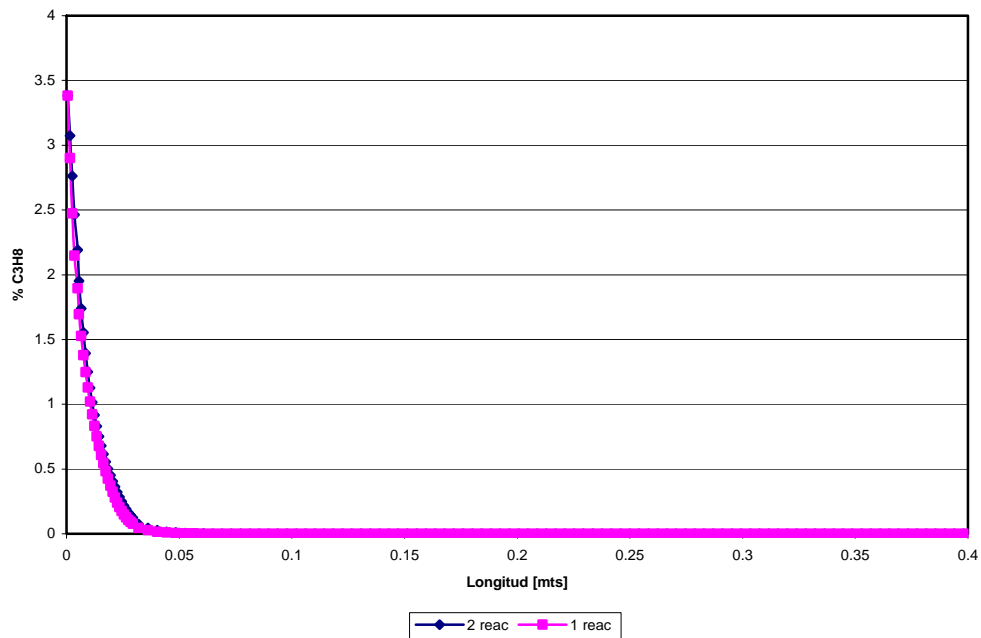


Figura 10: Perfiles axiales en porcentaje volumétrico de C_3H_8 , para mecanismos de reacción de uno y dos pasos.

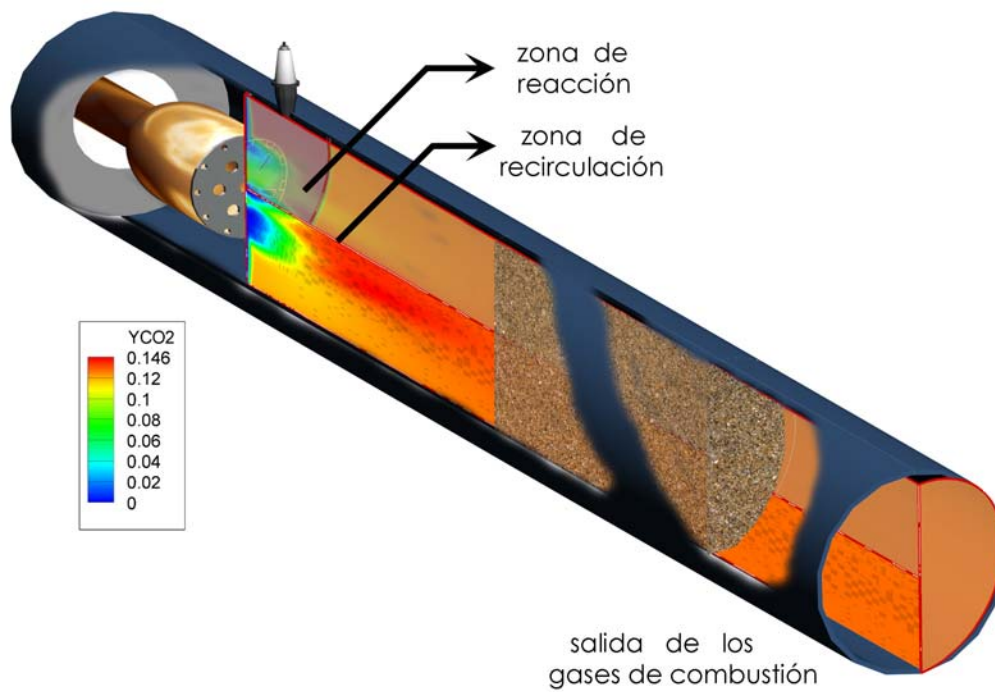


Figura 11: Contornos de fracción másica de CO₂ para un mecanismo de reacción de dos pasos.

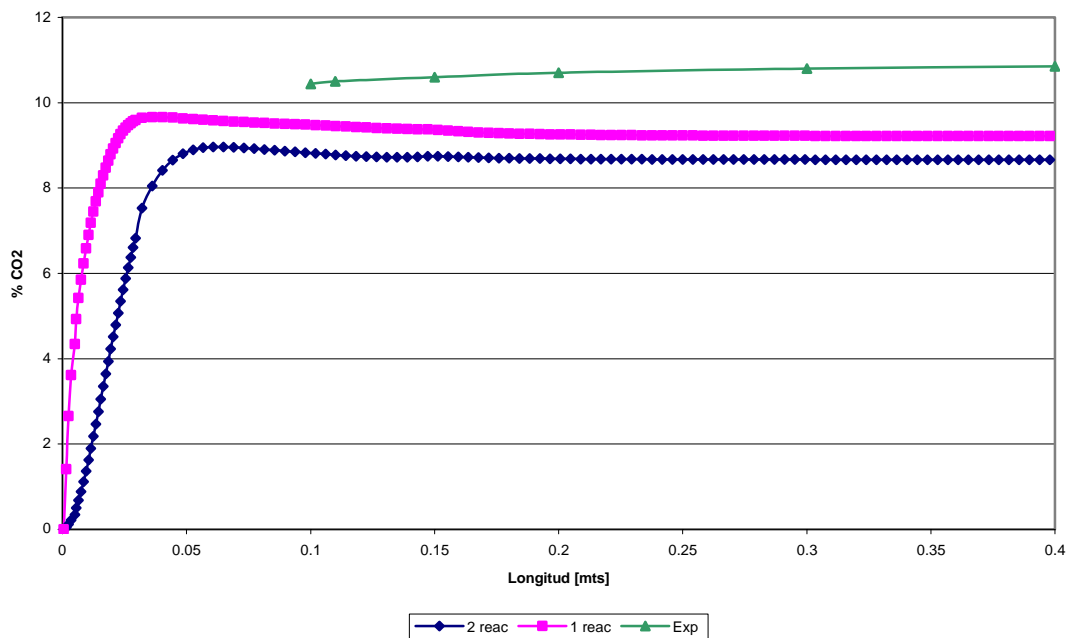


Figura 12: Perfiles axiales en porcentaje volumétrico de CO₂ para mecanismos de reacción de uno y dos pasos.

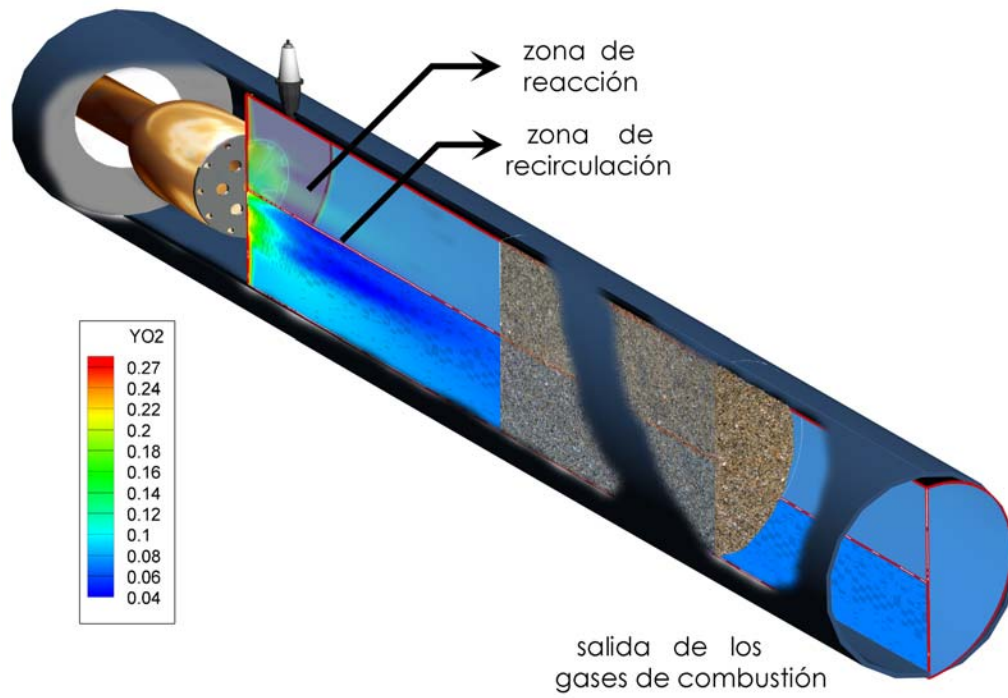


Figura 13: Contornos de fracción másica de O_2 para un mecanismo de reacción de dos pasos.

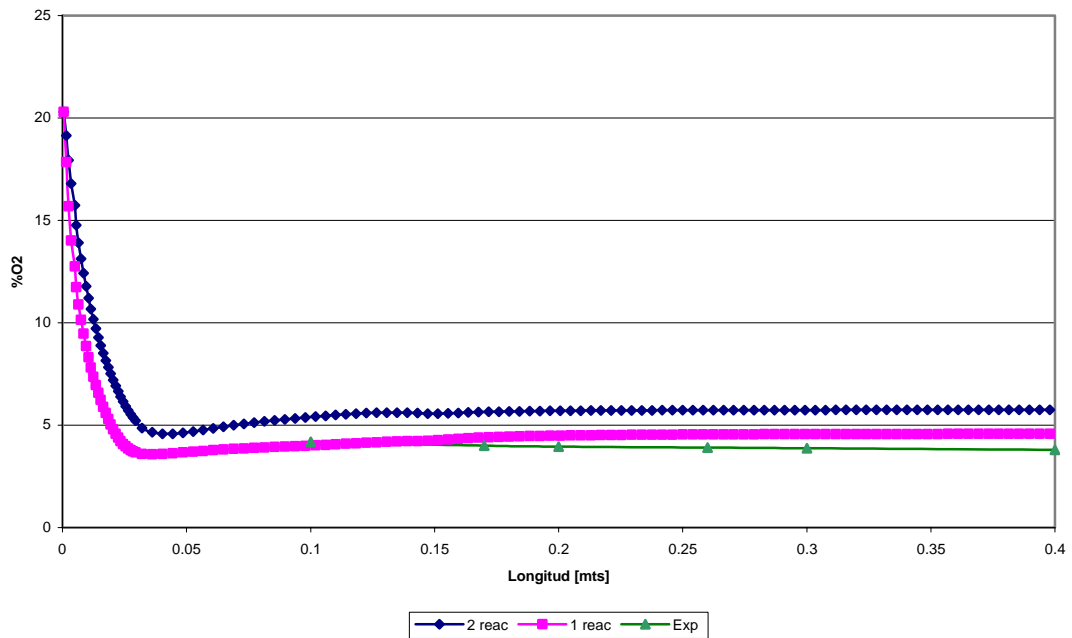


Figura 14: Perfiles axiales, en porcentaje volumétrico, de O_2 para mecanismos de reacción de uno y dos pasos.

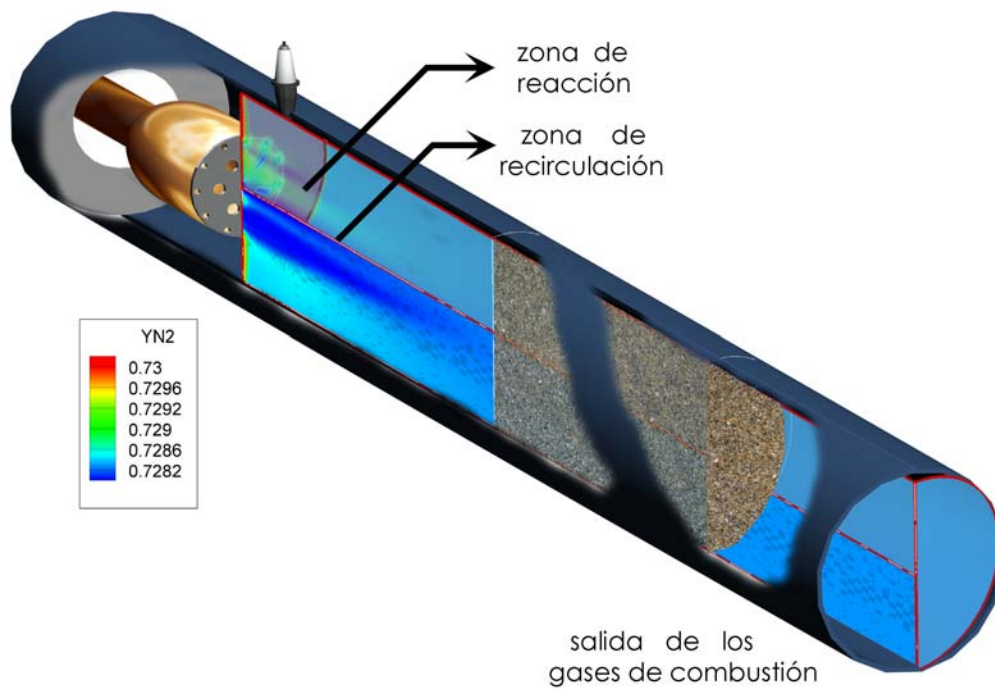


Figura 15: Contornos de fracción másica de N_2 para un mecanismo de reacción de dos pasos.

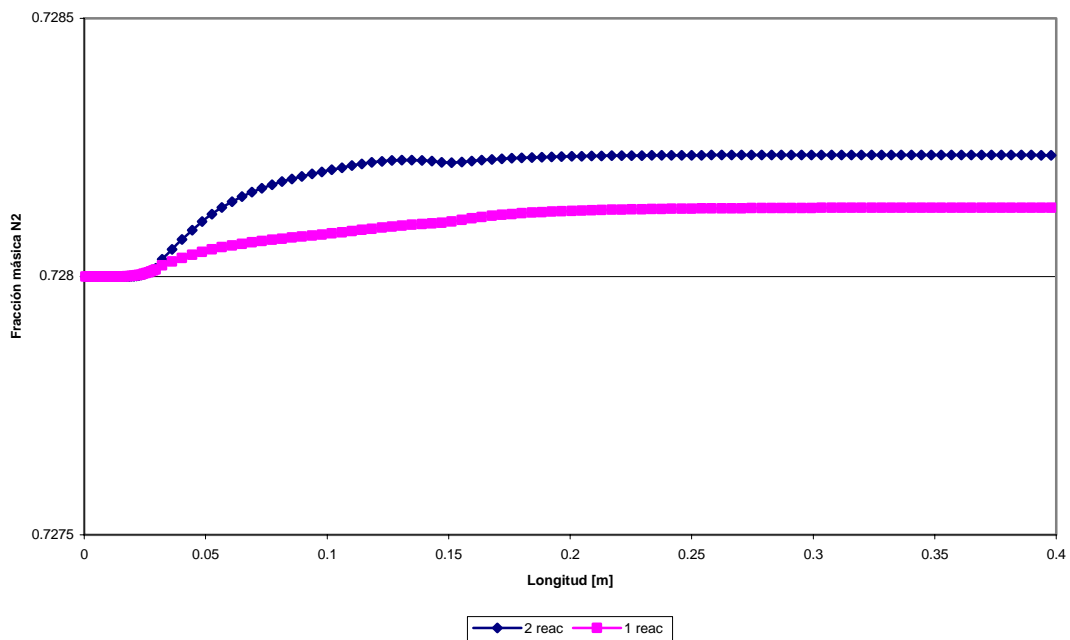


Figura 16: Perfiles axiales en fracción másica N_2 para mecanismos de reacción de uno y dos pasos.

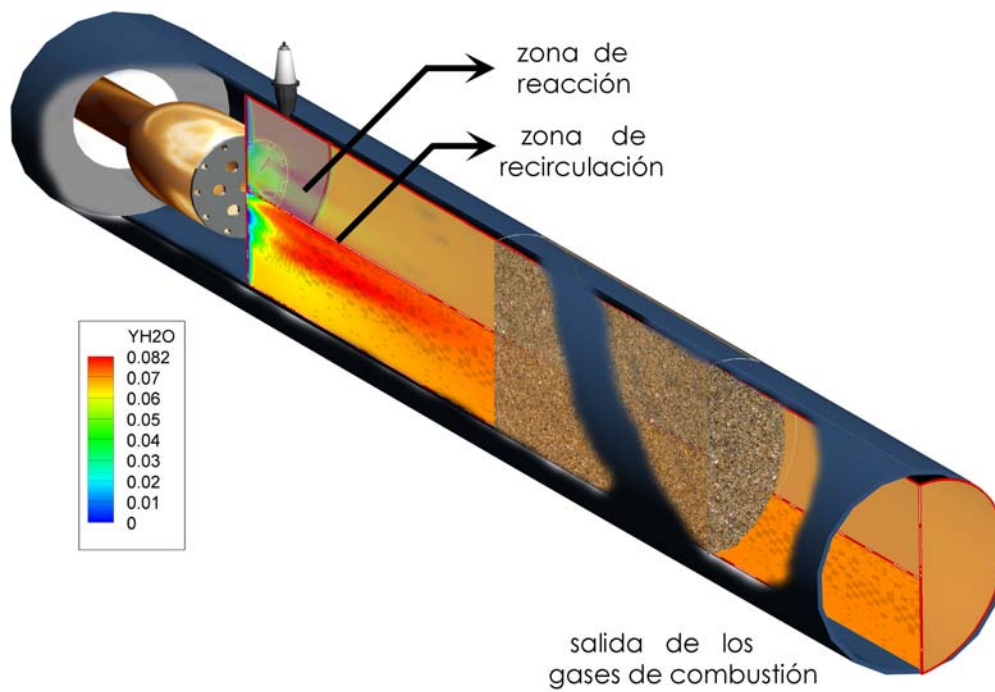


Figura 17: Contornos de fracción másica de H₂O para un mecanismo de reacción de dos pasos.

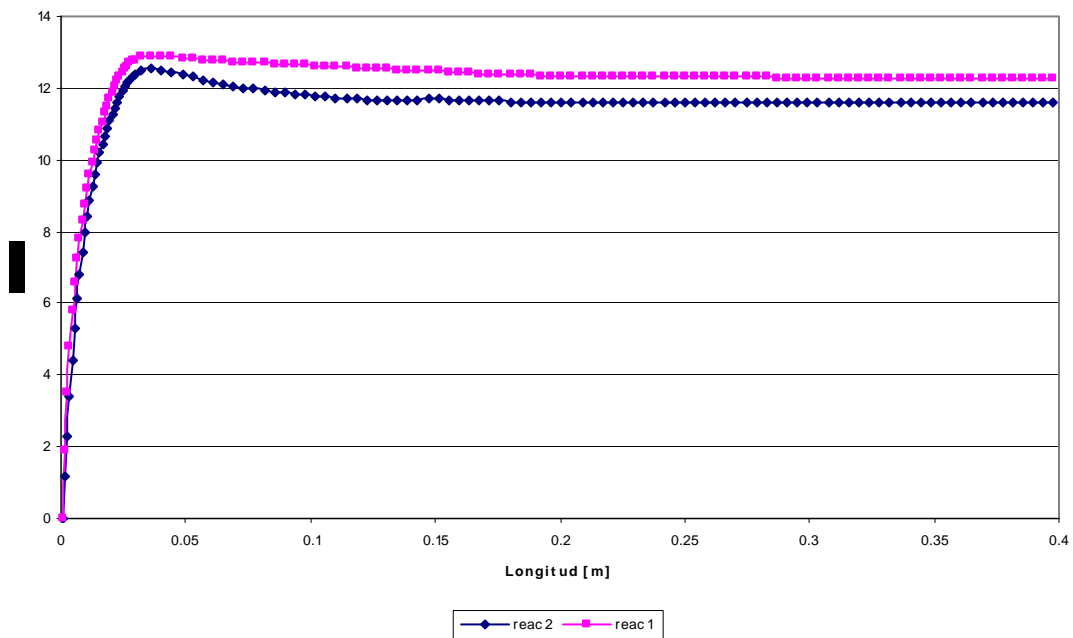


Figura 18: Perfiles axiales en porcentaje volumétrico de H₂O, para mecanismos de reacción de uno y dos pasos.

- **Concentración minoritaria**

En la figura 19 se aprecia el comportamiento del monóxido de carbono (CO), en fracción másica, a lo largo de todo el quemador. En la frontera entre los productos calientes y los reactantes frescos se produce principalmente la reacción. En esta zona de reacción, las concentraciones CO son considerablemente más altas que en la zona de recirculación. A la salida del quemador la emisión de monóxidos de carbono fue nula, debido a los modelos de combustión utilizados. Los perfiles de CO en la dirección axial en el centro del quemador se presentan en la figura 20. En esta figura se observa que las concentraciones de CO en la zona de reacción, alcanzan valores de aproximadamente 47,000 partes por millón. Comparaciones con datos experimentales muestran que el modelo predice adecuadamente la formación de CO . En la figura 21 se presenta la evolución del CO en ppm con respecto a la temperatura, que confirma que el CO se forma en temperaturas intermedias.

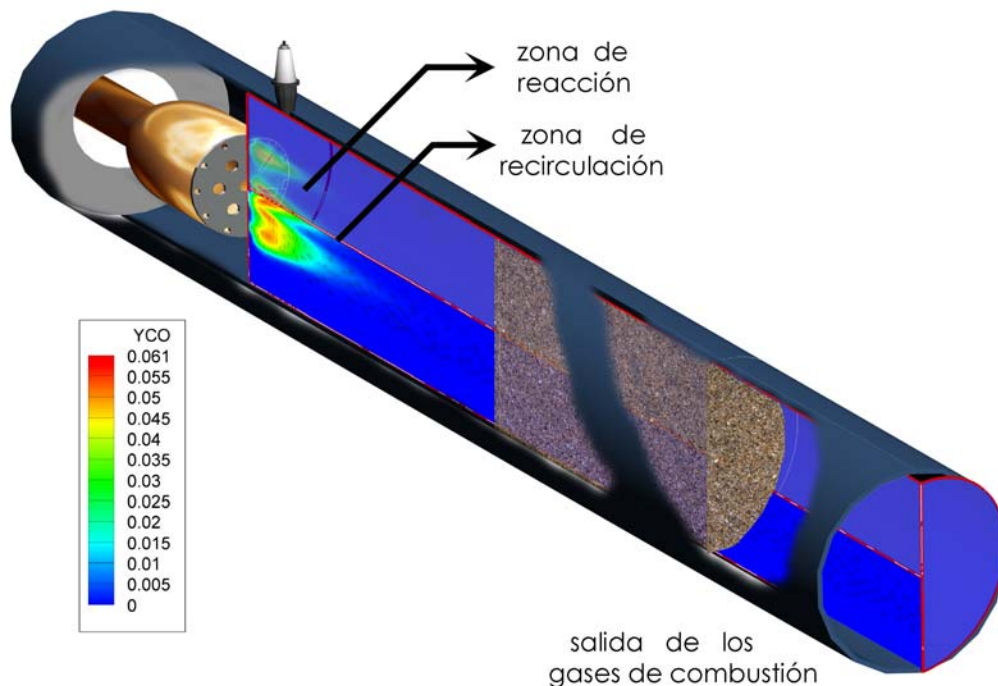


Figura 19: Contornos de fracción másica de CO , para un mecanismo de reacción de dos pasos

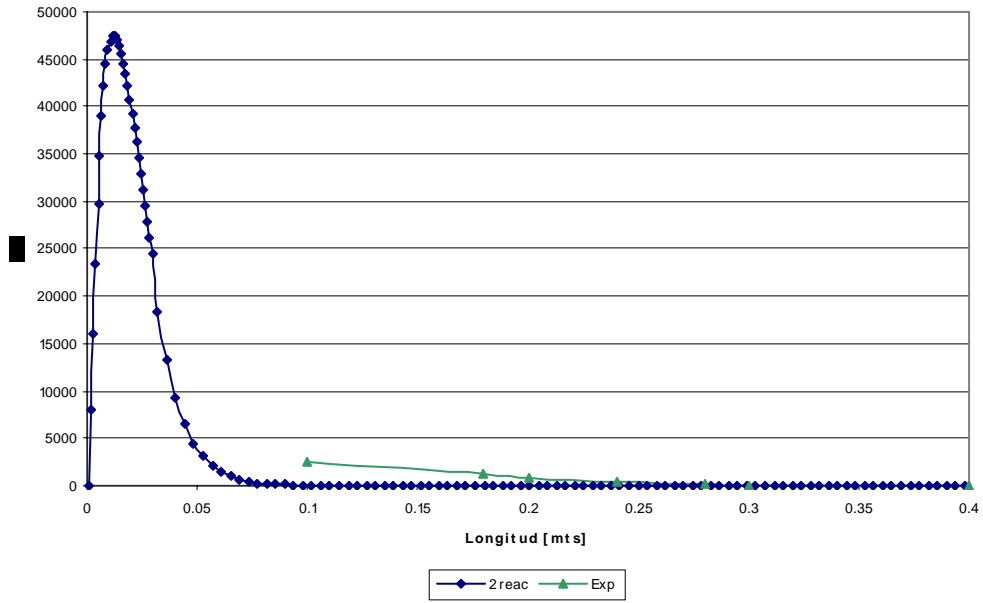
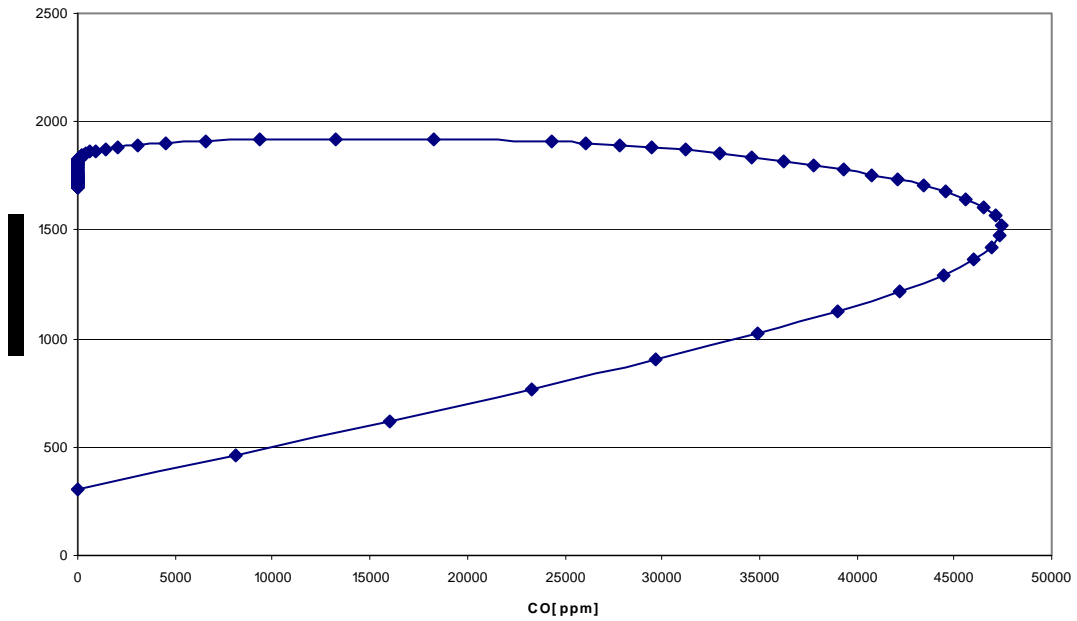


Figura 20: Perfil axial en partes por millón de CO, para un mecanismo de reacción de dos pasos.



Capítulo 5

Conclusiones y recomendaciones para investigaciones futuras.

En este trabajo se ha simulado numéricamente la combustión dentro de un quemador propuesto para un motor de combustión externa. Este quemador básicamente, consiste en un sistema compuesto de una entrada aire-combustible, previamente premezclados, y un flujo circundante lateral de aire. El combustible es gas LP y la mezcla aire-combustible es pobre, es decir existe un exceso de aire en la llama. Aguas abajo de la entrada del quemador se localiza un medio poroso, cuya finalidad es mejorar la mezcla de los gases, permitiendo un mejor aprovechamiento de la energía del combustible. El flujo reactivo ha sido simulado mediante una técnica de Dinámica de Fluidos Computacional. Esta técnica resuelve las ecuaciones promediadas que describen la aerodinámica del flujo: continuidad, cantidad de movimiento, energía, especies químicas y cantidades turbulentas. Para representar la combustión se utilizó un modelo de disipación turbulenta.

Se simuló la evolución de las especies de concentración mayoritaria y minoritaria; que permitirán un análisis energético del motor de combustión externa.

A continuación se presenta un resumen de los resultados obtenidos. Después de la boquilla se generan zonas de recirculación que estabilizan la llama. En estas zonas de recirculación se tienen gases productos de la combustión con una alta temperatura y los valores de las especies mayoritarias son próximos a los de equilibrio.

En las primeras estaciones axiales y junto a las zonas de recirculación se localizan regiones de reacción, donde comienza la reacción, y especies minoritarias como el CO presentan sus valores más altos.

En la salida del quemador, las especies de concentración mayoritaria y el CO tienen un valor uniforme y próximo al del equilibrio. El flujo lateral de aire de la entrada tiene su efecto, principalmente en la temperatura, que disminuye a un valor de aproximadamente 1750 K. Esta disminución en los valores de la temperatura, se debe también a las pérdidas de calor por radiación. El efecto de una menor temperatura se traduce en una reducción en las concentraciones de NO_x .

Los contornos de fracción molar de las especies de concentración mayoritaria (CO_2 , O_2) y la especie de concentración minoritaria (CO) se compararon con datos experimentales. Los resultados numéricos muestran que estas especies se predicen adecuadamente, en consecuencia las concentraciones de (C_3H_8 , N_2 , y H_2O) se pueden considerar aceptables, ya que se carecen de datos experimentales para estas especies.

Las diferencias entre las predicciones y los datos numéricos se deben principalmente a que se consideró la reacción del gas LP como propano. El gas LP es una mezcla de propano, butano y otros hidrocarburos.

Algunos trabajos que podrían extender o mejorar los resultados de la presente tesis se presentan a continuación.

En primer lugar, se sugiere representar la aerodinámica de la llama mediante modelos de tipo Simulación de Grandes Escalas (LES), que resuelve las ecuaciones para las fluctuaciones de mayor tamaño, modelando el efecto de las pequeñas fluctuaciones sobre ellas. El modelo LES nos puede permitir una mejor representación de la aerodinámica de la llama, donde se presentan estructuras transitorias de vorticidad. El inconveniente de este tipo de modelo es que el modelado de las especies químicas está por debajo de la resolución de la malla, por lo que se siguen requiriendo modelos para representar la cinética química.

Una alternativa para representar la interacción entre la cinética química y la turbulencia es el uso de funciones de densidad de probabilidad (FDP). Para calcular la FDP se tienen dos métodos: 1) Suponiendo una determinada forma y calculando la función a partir de algunos de sus momentos, y 2) Calculando la función a través de una ecuación de transporte. Considerando la factibilidad de ambos métodos, la segunda aproximación tiene la ventaja de que la reacción química no necesita modelado.

Por último, se pueden considerar mecanismos químicos más detallados que consideren más especies y reacciones.

Apéndice A

Modelos de turbulencia.

En este apéndice se introducen, de forma concisa, algunos de los modelos que se pueden utilizar para representar el efecto de la turbulencia en el flujo reactivo del quemador simulado en esta tesis. Los modelos se clasifican en dos categorías:

- Modelos de tipo “difusividad turbulenta”, esencialmente variantes del método conocido como $k - \varepsilon$.
- Cierres de segundo orden, en la forma de modelos de transporte de los esfuerzos de Reynolds.

En primer lugar se presentará la ecuación exacta para los esfuerzos de Reynolds, seguida por los cierres de segundo orden que constituyen el transporte de esfuerzos Reynolds utilizado en este trabajo. A continuación se presenta el modelo de turbulencia $k - \varepsilon$ estándar, que es el modelo utilizado en esta tesis.

1 Cierres de segundo orden.

La ecuación de transporte exacta para los esfuerzos de Reynolds $(u_i''u_j'')$ es [6]:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho} u_i'' u_j'') + \frac{\partial}{\partial x_k}(\bar{\rho} u_k u_i'' u_j'') &= - \underbrace{\left(\bar{u}_i'' \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j} \bar{u}_j'' \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} \right)}_{(a)} \\
&\quad - \underbrace{\left(\overline{u_i'' \frac{\partial p'}{\partial x_j} + u_j'' \frac{\partial p'}{\partial x_i}} \right)}_{(b)} - \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_k}(\bar{\rho} u_i'' u_j'' u_k'')}_{(c)} \\
&\quad - \underbrace{\bar{\rho} \left(u_i'' u_k'' \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_k} + u_j'' u_k'' \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_k} \right)}_{(d)} \\
&\quad - \underbrace{\left(\overline{\tau_{ik} \frac{\partial u_j''}{\partial x_k} + \tau_{ik}'' \frac{\partial u_i''}{\partial x_k}} \right)}_{(e)} \tag{1}
\end{aligned}$$

Los términos del lado derecho de la ecuación (1) representan: El efecto del gradiente de presión media (a) , la correlación entre gradientes de presión fluctuante y fluctuaciones de velocidad (b), el transporte turbulento de los esfuerzos de Reynolds (c), la producción de los esfuerzos de Reynolds por velocidad de deformación media(d), y la disipación viscosa (e). De los términos anteriores, en (a), (b), (c), y (e) están presentes correlaciones desconocidas, y por tanto requieren modelización.

Si se hace uso de la definición (44) del capítulo 2, el término que expresa el efecto del gradiente de presión media (a), se puede escribir como:

$$- \left(\bar{u}_i'' \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j} \bar{u}_j'' \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} \right) = \frac{\overline{\rho' u_j''}}{\bar{\rho}} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\overline{\rho' u_i''}}{\bar{\rho}} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j} \tag{2}$$

La correlación $\overline{\rho' u_j''}$ se puede modelar de una ecuación de conservación truncada como ([6]):

$$\overline{\rho' u_j''} = -\frac{1}{4.3} \frac{\tilde{k}}{\varepsilon} u_i'' u_j'' \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j} \quad (3)$$

donde $k = 1/2 u_i'' u_i''$ es la energía cinética turbulenta y ε es su tasa de disipación. La contribución de este término es muy pequeña y frecuentemente se desprecia ([8] y [10]).

Con fines de modelización la correlación entre gradientes de presión fluctuante y fluctuaciones de velocidad, (b) , frecuentemente se divide en una parte re-distributiva y una parte isótropa [13]:

$$\left(\overline{u_i'' \frac{\partial p'}{\partial x_j}} + \overline{u_j'' \frac{\partial p'}{\partial x_i}} \right) = - \left(\overline{u_i'' \frac{\partial p'}{\partial x_j}} + \overline{u_j'' \frac{\partial p'}{\partial x_i}} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \overline{u_k'' \frac{\partial p'}{\partial x_k}} \right) - \frac{2}{3} \delta_{ij} \overline{u_k'' \frac{\partial p'}{\partial x_k}} \quad (4)$$

La parte isótropa se divide en dos términos, uno de transporte por presión y otro de dilatación por presión:

$$-\frac{2}{3} \delta_{ij} \overline{u_k'' \frac{\partial p'}{\partial x_k}} = \underbrace{-\frac{2}{3} \delta_{ij} \overline{\frac{\partial p' u_k''}{\partial x_k}}}_{(I)} + \underbrace{-\frac{2}{3} \delta_{ij} \overline{p' \frac{\partial u_k''}{\partial x_k}}}_{(II)} \quad (5)$$

En flujos de baja velocidad $Ma \ll 1$, el término (II) de la ecuación (5) generalmente se desprecia [4]. El término (I) se suma al término de transporte turbulento de los esfuerzos de Reynolds (c) para formar el término:

$$\frac{\partial}{\partial x_k} (C_{ijk}) = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\overline{\rho u_i'' u_j'' u_k''} + \frac{2}{3} \delta_{ij} \overline{p' u_k''} \right) \quad (6)$$

El término C_{ijk} se modela mediante un cierre de tipo gradiente [5]:

$$C_{ijk} = -C_s \frac{\tilde{k}}{\varepsilon} u_k'' u_l'' \frac{\partial u_i'' u_j''}{\partial x_l} \quad (7)$$

El término (e) es la correlación de la disipación viscosa:

$$\overline{\tau_{ik} \frac{\partial u_j''}{\partial x_k}} + \overline{\tau_{ik} \frac{\partial u_i''}{\partial x_k}} = \bar{\rho} \varepsilon_{ij} \quad (8)$$

Si se supone isotropía local, el término ε_{ij} se puede escribir en función de la disipación de energía cinética turbulenta ε como [6]:

$$\varepsilon_{ij} = \frac{2}{3} \varepsilon \delta_{ij} \quad (9)$$

La tasa de disipación de la energía cinética turbulenta, ε , se calcula de la siguiente ecuación de transporte, deducida por procedimientos similares a los utilizados en el caso de densidad constante [6]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \varepsilon u_j) = & \underbrace{-C_{\varepsilon 1} \bar{\rho} \frac{\varepsilon}{\tilde{k}} u_k'' u_j'' \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_j}}_{(A)} - \underbrace{C_{\varepsilon 2} \bar{\rho} \frac{\varepsilon^2}{\tilde{k}}}_{(B)} + \underbrace{C_{\varepsilon 3} \frac{\varepsilon}{\tilde{k}} \frac{\overline{\rho' u_j''}}{\bar{\rho}} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j}}_{(C)} \\ & + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\underbrace{C_{\varepsilon} \bar{\rho} \frac{\tilde{k}}{\varepsilon} u_j'' u_k'' \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j}}_{(D)} \right) \end{aligned} \quad (10)$$

Donde, de acuerdo con lo expuesto anteriormente, el término (C) se desprecia.

La parte re-distributiva de la correlación entre gradientes de presión fluctuante y fluctuaciones de velocidad, expresión (4), usualmente se divide en dos partes: una que incluye cantidades turbulentas, y otra que incluye la tasa de deformación media.

Modelos para este término se han propuesto por ejemplo por Launder et al [2] (modelo ML), Gibson y Younis [5] (modelo MG) y Musonge [9] (modelo MJ). Denotando al término redistributivo como Π_{ij} , los modelos se escriben como:

$$\Pi_{ij} = -C_1 \bar{\rho} \varepsilon \left(\frac{u_i'' u_j''}{\tilde{k}} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \right) + C_2 \delta_{ij} \bar{\rho} u_l'' u_m'' \frac{\partial \tilde{u}_l}{\partial x_m} - C_3 \bar{\rho} P_{ij} + C_4 \bar{\rho} \tilde{k} \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right)$$

$$-\frac{2}{3}C_4\bar{\rho}\tilde{k}\frac{\partial\tilde{u}_k}{\partial x_k}\delta_{ij}-\left(\frac{2}{3}C_2+C_3\right)\left(\bar{\rho}u_i''u_j''\frac{\partial\tilde{u}_l}{\partial x_i}+\bar{\rho}u_i''u_l''\frac{\partial\tilde{u}_l}{\partial x_j}\right)$$

(11)

Donde $P_{ij} = -(u_i''u_k''\partial\tilde{u}_j/\partial x_k + u_j''u_k''\partial\tilde{u}_i/\partial x_k)$.

Las constantes de las ecuaciones (7), (10), y (11) se presentan en la tabla 1.

Sustituyendo las ecuaciones (6), (9) y (11) en la ecuación de los esfuerzos de Reynolds (1) se tiene:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}u_i''u_j'') + \frac{\partial}{\partial x_k}(\bar{\rho}\tilde{u}_k u_i''u_j'') = \frac{\partial}{\partial x_k}(C_{ijk}) - \bar{\rho}\left(u_i''u_k''\frac{\partial\tilde{u}_j}{\partial x_k} + u_j''u_k''\frac{\partial\tilde{u}_i}{\partial x_k}\right) - \frac{2}{3}\bar{\rho}\tilde{\varepsilon}\delta_{ij} + \Pi_{ij} \quad (12)$$

Modelo	MG	ML	MJ
C _{ε1}	1.4	1.44	1.40
C _{ε2}	1.8	1.90	1.90
C _{ε3}	0.15	0.15	0.18
C _{ε4}	0.22	0.21	0.22
C ₁	3	1.50	3.00
C ₂	0.3	-0.582	-0.44
C ₃	-	0.764	0.46
C ₄	-	-0.182	-0.23

Tabla 1: Constantes de las ecuaciones (7), (10) y (11).

2 Modelos de viscosidad turbulenta.

Un método alternativo para determinar los esfuerzos de Reynolds $u_i''u_j''$, son los modelos basados en el concepto de viscosidad turbulenta, que suponen que, de la misma manera que en flujo laminar los esfuerzos viscosos son proporcionales al gradiente de la velocidad, en un flujo turbulento los esfuerzos causados por las fluctuaciones turbulentas son proporcionales al gradiente de la velocidad media. Esta relación entre los esfuerzos de Reynolds y las variables medias es:

$$\bar{\rho} u_i'' u_j'' = -\bar{\rho} \nu_T \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) + \frac{2}{3} \left(\bar{\rho} \tilde{k} + \bar{\rho} \nu_T \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \right) \delta_{ij}$$

(13)

Donde $\nu_T (= \mu_T / \bar{\rho})$ es la viscosidad turbulenta. A diferencia de la viscosidad molecular ($\nu = \mu / \rho$), ν_T no es una propiedad del fluido, sino una característica del estado del flujo, y puede variar significativamente de un punto a otro dentro del mismo flujo.

Para el flujo turbulento de escalar, el concepto de viscosidad turbulenta (o, propiamente, de difusividad turbulenta se expresa como:

$$\rho u_i'' u_\alpha'' = -\bar{\rho} \frac{\nu_T}{S_{c_T}} \frac{\partial \tilde{\phi}_\alpha}{\partial x_i} \quad (14)$$

Donde S_{c_T} es el número de Schmidt/Prandtl turbulento.

La viscosidad turbulenta ν_T puede calcularse de diferentes formas, dando lugar a una variedad de modelos con un número de variable de ecuaciones diferenciales. Los más populares de estos modelos son, probablemente, los de la familia del modelo $k - \varepsilon$. Las variantes utilizadas en este trabajo se presentan a continuación.

3 Modelo $k - \varepsilon$ (modelo de turbulencia utilizado en esta tesis).

En este modelo, se define como:

$$\nu_T = C_\mu \frac{\tilde{k}^2}{\tilde{\varepsilon}} \quad (15)$$

Donde C_μ es una constante determinada experimentalmente. Los valores de \tilde{k} y $\tilde{\varepsilon}$ se calculan a través de la ecuaciones de transporte.

La ecuación para la energía cinética turbulenta, \tilde{k} se obtiene de la ecuación (1), haciendo $i = j$, aplicando la hipótesis de isotropía local, y dividiendo entre dos:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{k}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{u}_j\tilde{k}) + \bar{\rho}u_i''u_j''\frac{\partial\tilde{u}_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial}{\partial x_j}\underbrace{\left(\frac{1}{2}\overline{\rho u_j''u_i''u_i''}\right)}_{(a)} - \bar{\rho}\varepsilon \quad (16)$$

Los esfuerzos de Reynolds $u_i''u_j''$ se expresan de acuerdo con la ecuación (13). El término (a) se aproxima como:

$$-\left(\frac{1}{2}\overline{\rho u_j''u_i''u_i''}\right) \approx \frac{\mu_T}{\sigma_k} \frac{\partial\tilde{k}}{\partial x_j} \quad (17)$$

Sustituyendo las expresiones (13) y (17) en la ecuación (18), se obtiene:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{k}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{u}_j\tilde{k}) = \bar{\rho}(P_k - \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\bar{\rho}\frac{\nu_T}{\sigma_k}\frac{\partial\tilde{k}}{\partial x_j}\right) \quad (18)$$

Donde:

$$P_k = \nu_T \left(\frac{\partial\tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial\tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial\tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{2}{3} \left(\tilde{k} + \nu_T \frac{\partial\tilde{u}_i}{\partial x_i} \right) \frac{\partial\tilde{u}_i}{\partial x_i} \quad (19)$$

Aplicando hipótesis similares a las utilizadas para la ecuación de \tilde{k} (18), la ecuación para la disipación de la energía cinética turbulenta, ε , se obtiene a partir de la ecuación (10):

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{u}_j\varepsilon) = \bar{\rho}\frac{\varepsilon}{\tilde{k}}(C_{\varepsilon 1}P_k - C_{\varepsilon 2}\varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\bar{\rho}\frac{\nu_T}{\sigma_k}\frac{\partial\varepsilon}{\partial x_j}\right) \quad (20)$$

Las constantes de las ecuaciones (18) y (20) se muestran en la tabla 2.

C_μ	σ_k	σ_ε	$C_{\varepsilon 1}$	$C_{\varepsilon 2}$
0.09	1.0	1.314	1.44	1.92

Tabla 2: Constantes del modelo $k - \varepsilon$ estándar.

El modelo $k-\varepsilon$ tal y como ha sido presentado se comporta satisfactoriamente en flujos sencillos, normalmente flujos parabólicos para los que el modelo fue desarrollado en los años 70. En flujos más complejos, incluyendo aquellos con rotación o con curvatura apreciable en las líneas de corriente (como los investigados en esta tesis), las hipótesis de isotropía en las que se basa el modelo no son aplicables, y las predicciones proporcionadas por el modelo son en general menos satisfactorias. La popularidad de este tipo de modelos, en la que sin duda juega un papel importante su sencillez y economía, ha dado lugar a una serie de modificaciones, o variantes, que intentan paliar estas deficiencias sin tener que abandonar la hipótesis de viscosidad turbulenta a favor de cierres de segundo orden.

Apéndice B

Esquemas de discretización.

En este apéndice se presentan los esquemas lineales que se usan en la discretización de término convectivo de la ecuación general (1) introducida en el capítulo 2.

En la formulación de la ecuación discretizada (2), se requiere conocer la densidad ρ y la variable escalar, ϕ , en la cara de la celda. Estas variables se calculan en el nodo de la celda, por lo que es necesario interpolar entre celdas para conocer su valor en la cara. Este cálculo de ϕ y ρ en la cara de la celda da lugar a los llamados esquemas de discretización. La determinación de los valores de estas variables en la cara es importante para la precisión y convergencia de la solución numérica.

A continuación, se presentan los esquemas de discretización lineales y no lineales que se usan en esta tesis. Estos esquemas se describirán en base al sistema de celdas que se ilustra en la figura 1. Como ejemplo, se obtendrá el valor de ϕ en la cara e de la celda P. La velocidad en la cara e se considerará, sin pérdida de generalidad, positiva ($u_e > 0$).

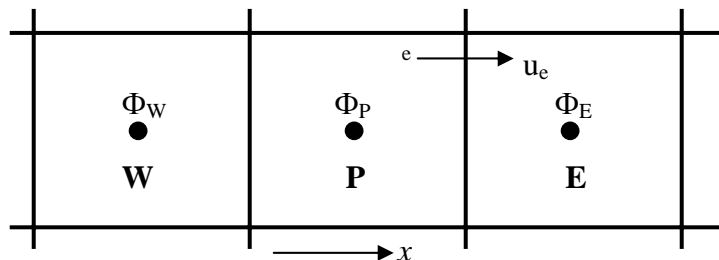


Figura 1: Diagrama esquemático de celdas.

1 Esquemas lineales

1.1 Diferencias desplazadas de primer orden

Con este esquema se supone que el valor de la variable ϕ en la cara e es igual al nodo adyacente aguas arriba, es decir, para $u_e > 0$ [19] :

$$\phi_e = \phi_P$$

(1)

Esta alternativa es de implementación sencilla, acotada y altamente estable casi bajo cualquier situación pero tiene los inconvenientes de su precisión, que es de primer orden y de presentar problemas de difusión numérica. Esta falsa difusión es mayor si en el flujo hay un desalineamiento en la dirección de la dirección del flujo y las líneas de malla, como por ejemplo en flujos de recirculación.

1.2 Diferencias centradas

Este esquema supone la variación lineal de ϕ entre los nodos P y E ; por tanto, el valor de la cara e es:

$$\phi_e = \frac{\phi_E + \phi_P}{2} \quad (2)$$

Este esquema tiene una precisión de segundo orden pero tiene el inconveniente de no estar acotado, por lo que puede presentar inestabilidades numéricas. El límite de estabilidad de este esquema viene dado en función del número de Peclet (ecuación 3 del capítulo 3), que es un parámetro comparativo entre los procesos convectivo y difusivo.

Para situaciones en que los procesos convectivos dominan sobre los difusivos ($Pe > 2$), por ejemplos flujos con número de Reynolds altos, el esquema presenta oscilaciones numéricas.

1.3 Híbrido

Este esquema fue introducido por Spalding [23] y consiste en combinar los esquemas de diferencias desplazadas y centradas para calcular el valor de la propiedad ϕ en la cara del volumen de control. La selección del esquema se hace en función del número de Peclet de la celda:

- Si $Pe \leq 2$, se usan diferencias centradas:

$$\phi_e = \frac{\phi_E + \phi_P}{2} \quad (3)$$

- Si $Pe > 2$, se usan diferencias desplazadas:

$$\phi_e = \phi_P, \quad Pe > 2$$

(4)

Para flujos con bajo número de Reynolds/Peclet el esquema utilizando es el de diferencias centradas, y por tanto resulta de orden 2; sin embargo, el esquema presenta problemas asociados al esquema de diferencias desplazadas cuando el flujo esta denominado por los procesos de convección $Pe > 2$.

Los esquemas lineales de alto orden presentan una buena precisión, pero no están acotados, por lo que pueden presentar oscilaciones numéricas. Su uso no es recomendado en el cálculo de cantidades que no aceptan valores negativos, o en general de cantidades acotadas (tales como concentraciones), pues la oscilaciones introducidas por el modela pueden sacar al escalar de su dominio de definición.

Apéndice C

Archivo de datos de entrada Q1.

TALK=F;RUN(1, 1);VDU=X11-TERM

GROUP 1. RUN TITLE AND OTHER PRELIMINARIES

** TITULO DEL Q1**

TEXT(LLAMA DE PROPANO)

** DECLARACION DE VARIABLES**

INTEGER(NYB,NZB,NYIN,NZIN,NZJ1,NZJ2)

REAL(WIFUL,VIN,GRHO)

REAL(WINF,GVIST,FINF,HAIRIN,SECIN,DILIN)

REAL(WAIR,WFU,WPR,CPAIR)

REAL(DTFS,HFU,STOIC,FSTOI,CEBU,CPFU,CPPR,HINF,EAIR,YREW,HCMB)

** CONSTANTES TERMODINAMICAS Y DE EDDY-BREAK-UP**

GRHO=1.161

PRESS0=1.E5

STEADY=T

WAIR=29.0;CPAIR=1032.5068;CPPR=1500.0;CPFU=2096.1

WFU=16.0;WPR=28.0;HFU=5.0E7;STOIC=17.24

FSTOI=1./(1.+STOIC);CEBU=4.0

** ESPECIFICACIONES DEL DOMINIO**

HAIRIN=1032.3374*300.0

HCMB=2075.072*300.0

EAIR=1.7064

FINF=.033083499

YREW=STOIC*EAIR/(STOIC*EAIR+1)

HINF=HFU*FINF+HAIRIN*YREW+HCMB*FINF

IRSMHM=0

GROUP 2. TRANSIENCE; TIME-STEP SPECIFICATION

ESPECIFICACION TIEMPO EN CADA INTERACION

TLAST=10E-2

TFRAC(1)=LSTEP;TFRAC(2)=TLAST/LSTEP

GSIGMA	STEFAN-BOLTZMANN CONSTANT
SCAT	SCATTIRING COEFFICIENT
ABSORB	ABSORPTION COEFFICIENT
EMIH	EMISSIVITY OF THE HOT WALL
EMIC	EMISSIVITY OF THE HOT WALL
THOT	HOT WALL TEMPERATURE
TCOLD	COLD WALL TEMPERATURE

REAL(GSIGMA,SCAT,ABSORB,EMIH,EMIC,THOT,TCOLD,RADW,ED2ME)

GSIGMA=5.6697E-8

SCAT=0.05

ABSORB=0.2

EMIH=0.5

EMIC=0.2

THOT=600.0

TCOLD=300.0

RADW=GSIGMA*300**4

ED2ME=EMIH/(2.0-EMIH)

GROUP 3. X-DIRECTION GRID SPECIFICATION

COORDENANADAS CILINDRICAS
CARTES=F

MALLA DIRECCION RADIAL
NX=32
GRDPWR(X,NX,3.141592654,1.0)

GROUP 4. Y-DIRECTION GRID SPECIFICATION

MALLA DIRECCION ANGULAR
NY=22
NREGY=8
IREGY=1; GRDPWR(Y,2,.0015,1.0)
IREGY=2; GRDPWR(Y,4,.00325,1.0)
IREGY=3; GRDPWR(Y,4,.00497,1.0)
IREGY=4; GRDPWR(Y,1,.00128,1.0)
IREGY=5; GRDPWR(Y,2,.00289,1.0)
IREGY=6; GRDPWR(Y,3,.00361,1.0)
IREGY=7; GRDPWR(Y,2,.00195,1.0)
IREGY=8; GRDPWR(Y,4,.00595,1.0)

GROUP 5. Z-DIRECTION GRID SPECIFICATION

MALLA DIRECCION AXIAL
NZ=120
NREGZ=2
IREGZ=1; GRDPWR(Z,30,.03,1.0)
IREGZ=2; GRDPWR(Z,90,.37,1.0)

GROUP 7. VARIABLES STORED, SOLVED & NAMED

VARIABLES RESULETAS EN EL Q1
SOLVE(P1,U1,V1,W1,H1)
SOLUTN(P1 ,Y,Y,Y,N,N,N)
SOLVE(YCH8,YO2,YCO,YH2O,YCO2,YN2,YNOW)
STORE(TMP1,RHO1,TNOW)
TURMOD(KEMODL)
RADIAT(FLUX,ABSORB,SCAT,H1)

GROUP 9. PROPERTIES OF THE MEDIUM

VARIABLES COMUNICADAS AL GROUND
ENUL=1.57968E-5
RHO1=GRND
TMP1=GRND

GROUP 11. INITIALIZATION OF VARIABLE OR POROSITY

** VARIABLES INICIALES**
FIINIT(TMP1)=2000.0
FIINIT(P1)=2.673
FIINIT(U1)=0.0
FIINIT(V1)=0.0
FIINIT(W1)=2.43
FIINIT(YCH8)=.0507
FIINIT(H1)=2.68077E+06
FIINIT(YCO)=0.0
FIINIT(YNOW)=0.0E+0
FIINIT(YH2O)=0.07
FIINIT(YCO2)=.3
FIINIT(YO2)=.0
FIINIT(YN2)=.628

GROUP 13. BOUNDARY CONDITIONS AND SPECIAL SOURCES

** ENERGIA CINETICA Y POTENCIAL**
VARMAX(W1)=20.0
VARMIN(W1)=-20.0
VARMAX(V1)=15.0
VARMIN(V1)=-15.0
REAL(KEINI,EPINI)
KEINI=(0.03*WIFUL)**2

EPINI=((0.09**0.75)*KEINI**1.5)/(0.1*56E-3)

****VELOCIDAD DE ENTRADA DE COMBUSTIBLE****

REAL(WIN,RHOENT,W1A)

WIN=10.6

RHOENT=1.1

****PARED DE LA BOQUILLA****

WALL(WALLP,LOW,1,NX,1,NY,1,1,1,1)

****ENTRADA DE COMBUSTIBLE Y ESPECIES QUIMICAS****

PATCH(IN1,LOW,1,32,1,2,1,1,1,1)

COVAL(IN1,P1,FIXFLU,WIN*RHOENT)

COVAL(IN1,U1,ONLYMS,0.0)

COVAL(IN1,V1,ONLYMS,0.0)

COVAL(IN1,W1,ONLYMS,WIN)

COVAL(IN1,YCH8,FIXVAL,0.0508)

COVAL(IN1,H1,FIXVAL,2.68077E+06)

COVAL(IN1,YCO,FIXVAL,0.0)

COVAL(IN1,YNOW,FIXVAL,0.0)

COVAL(IN1,YH2O,FIXVAL,0.0)

COVAL(IN1,YCO2,FIXVAL,0.0)

COVAL(IN1,YO2,FIXVAL,.2212)

COVAL(IN1,YN2,FIXVAL,.728)

PATCH(IN2,LOW,9,10,7,10,1,1,1,1)

COVAL(IN2,P1,FIXFLU,WIN*RHOENT)

COVAL(IN2,U1,ONLYMS,0.0)

COVAL(IN2,V1,ONLYMS,0.0)

COVAL(IN2,W1,ONLYMS,WIN)

COVAL(IN2,YCH8,FIXVAL,0.0508)

COVAL(IN2,H1,FIXVAL,2.68077E+06)

COVAL(IN2,YCO,FIXVAL,0.0)

COVAL(IN2,YNOW,FIXVAL,0.0)

COVAL(IN2,YH2O,FIXVAL,0.0)

COVAL(IN2,YCO2,FIXVAL,0.0)

COVAL(IN2,YO2,FIXVAL,.2212)

COVAL(IN2,YN2,FIXVAL,.728)

PATCH(IN3,LOW,21,22,7,10,1,1,1,1)

COVAL(IN3,P1,FIXFLU,WIN*RHOENT)

COVAL(IN3,U1,ONLYMS,0.0)

COVAL(IN3,V1,ONLYMS,0.0)

COVAL(IN3,W1,ONLYMS,WIN)

COVAL(IN3,YCH8,FIXVAL,0.0508)

COVAL(IN3,H1,FIXVAL,2.68077E+06)

COVAL(IN3,YCO,FIXVAL,0.0)

COVAL(IN3,YNOW,FIXVAL,0.0)

COVAL(IN3,YH2O,FIXVAL,0.0)

COVAL(IN3,YCO2,FIXVAL,0.0)

COVAL(IN3,YO2,FIXVAL,.2212)

COVAL(IN3,YN2,FIXVAL,.728)

PATCH(IN4,LOW,31,32,7,10,1,1,1,1)

COVAL(IN4,P1,FIXFLU,WIN*RHOENT)

COVAL(IN4,U1,ONLYMS,0.0)

COVAL(IN4,V1,ONLYMS,0.0)

COVAL(IN4,W1,ONLYMS,WIN)

COVAL(IN4,YCH8,FIXVAL,0.0508)

COVAL(IN4,H1,FIXVAL,2.68077E+06)

COVAL(IN4,YCO,FIXVAL,0.0)

COVAL(IN4,YNOW,FIXVAL,0.0)

COVAL(IN4,YH2O,FIXVAL,0.0)

COVAL(IN4,YCO2,FIXVAL,0.0)

COVAL(IN4,YO2,FIXVAL,.2212)

COVAL(IN4,YN2,FIXVAL,.728)

PATCH(IN5,LOW,1,2,12,12,1,1,1,1)

COVAL(IN5,P1,FIXFLU,WIN*RHOENT)

COVAL(IN5,U1,ONLYMS,0.0)

COVAL(IN5,V1,ONLYMS,0.0)

COVAL(IN5,W1,ONLYMS,WIN)

COVAL(IN5,YCH8,FIXVAL,0.0508)

COVAL(IN5,H1,FIXVAL,2.68077E+06)

COVAL(IN5,YCO,FIXVAL,0.0)

COVAL(IN5,YNOW,FIXVAL,0.0)

COVAL(IN5,YH2O, FIXVAL, 0.0)
COVAL(IN5,YCO2, FIXVAL, 0.0)
COVAL(IN5,YO2, FIXVAL, .2212)
COVAL(IN5,YN2, FIXVAL, .728)

PATCH(IN6,LOW,7,8,12,12,1,1,1,1)
COVAL(IN6,P1, FIXFLU, WIN*RHOENT)
COVAL(IN6,U1, ONLYMS, 0.0)
COVAL(IN6,V1, ONLYMS, 0.0)
COVAL(IN6,W1, ONLYMS, WIN)
COVAL(IN6,YCH8, FIXVAL, 0.0508)
COVAL(IN6,H1, FIXVAL, 2.68077E+06)
COVAL(IN6,YCO, FIXVAL, 0.0)
COVAL(IN6,YNOW, FIXVAL, 0.0)
COVAL(IN6,YH2O, FIXVAL, 0.0)
COVAL(IN6,YCO2, FIXVAL, 0.0)
COVAL(IN6,YO2, FIXVAL, .2212)
COVAL(IN6,YN2, FIXVAL, .728)

PATCH(IN7,LOW,13,14,12,12,1,1,1,1)
COVAL(IN7,P1, FIXFLU, WIN*RHOENT)
COVAL(IN7,U1, ONLYMS, 0.0)
COVAL(IN7,V1, ONLYMS, 0.0)
COVAL(IN7,W1, ONLYMS, WIN)
COVAL(IN7,YCH8, FIXVAL, 0.0508)
COVAL(IN7,H1, FIXVAL, 2.68077E+06)
COVAL(IN7,YCO, FIXVAL, 0.0)
COVAL(IN7,YNOW, FIXVAL, 0.0)
COVAL(IN7,YH2O, FIXVAL, 0.0)
COVAL(IN7,YCO2, FIXVAL, 0.0)
COVAL(IN7,YO2, FIXVAL, .2212)
COVAL(IN7,YN2, FIXVAL, .728)

PATCH(IN8,LOW,19,20,12,12,1,1,1,1)
COVAL(IN8,P1, FIXFLU, WIN*RHOENT)
COVAL(IN8,U1, ONLYMS, 0.0)
COVAL(IN8,V1, ONLYMS, 0.0)
COVAL(IN8,W1, ONLYMS, WIN)
COVAL(IN8,YCH8, FIXVAL, 0.0508)
COVAL(IN8,H1, FIXVAL, 2.68077E+06)
COVAL(IN8,YCO, FIXVAL, 0.0)
COVAL(IN8,YNOW, FIXVAL, 0.0)
COVAL(IN8,YH2O, FIXVAL, 0.0)
COVAL(IN8,YCO2, FIXVAL, 0.0)
COVAL(IN8,YO2, FIXVAL, .2212)
COVAL(IN8,YN2, FIXVAL, .728)

PATCH(IN9,LOW,25,26,12,12,1,1,1,1)
COVAL(IN9,P1, FIXFLU, WIN*RHOENT)
COVAL(IN9,U1, ONLYMS, 0.0)
COVAL(IN9,V1, ONLYMS, 0.0)
COVAL(IN9,W1, ONLYMS, WIN)
COVAL(IN9,YCH8, FIXVAL, 0.0508)
COVAL(IN9,H1, FIXVAL, 2.68077E+06)
COVAL(IN9,YCO, FIXVAL, 0.0)
COVAL(IN9,YNOW, FIXVAL, 0.0)
COVAL(IN9,YH2O, FIXVAL, 0.0)
COVAL(IN9,YCO2, FIXVAL, 0.0)
COVAL(IN9,YO2, FIXVAL, .2212)
COVAL(IN9,YN2, FIXVAL, .728)

PATCH(IN10,LOW,31,32,12,12,1,1,1,1)
COVAL(IN10,P1, FIXFLU, WIN*RHOENT)
COVAL(IN10,U1, ONLYMS, 0.0)
COVAL(IN10,V1, ONLYMS, 0.0)
COVAL(IN10,W1, ONLYMS, WIN)
COVAL(IN10,YCH8, FIXVAL, 0.0508)
COVAL(IN10,H1, FIXVAL, 2.68077E+06)
COVAL(IN10,YCO, FIXVAL, 0.0)
COVAL(IN10,YNOW, FIXVAL, 0.0)
COVAL(IN10,YH2O, FIXVAL, 0.0)
COVAL(IN10,YCO2, FIXVAL, 0.0)
COVAL(IN10,YO2, FIXVAL, .2212)
COVAL(IN10,YN2, FIXVAL, .728)

ENTRADA DE AIRE

PATCH(IN11,LOW,1,NX,13,NY,1,1,1,1)
 COVAL(IN11,P1,FIXFLU,0.05*RHOENT)
 COVAL(IN11,U1,ONLYMS,0.0)
 COVAL(IN11,V1,ONLYMS,0.0)
 COVAL(IN11,W1,ONLYMS,0.05)
 COVAL(IN11,YCH8,FIXVAL,0.0)
 COVAL(IN11,H1,FIXVAL,310605.0)
 COVAL(IN11,YCO,FIXVAL,0.0)
 COVAL(IN11,YNOW,FIXVAL,0.0)
 COVAL(IN11,YH2O,FIXVAL,0.0)
 COVAL(IN11,YCO2,FIXVAL,0.0)
 COVAL(IN11,YO2,FIXVAL,.27)
 COVAL(IN11,YN2,FIXVAL,.73)

****PARED DEL QUEMADOR****

WALL(WALL1,NORTH,1,NX,NY,NY,1,NZ,1,1)
 PATCH(WALLR1,NORTH,1,NX,NY,NY,1,NZ,1,1)
 COVAL(WALLR1,RADY,ED2ME,RADW)

****SALIDA DEL QUEMADOR****

PATCH(OUT2,HIGH,1,NX,1,NY,NZ,NZ,1,1)
 COVAL(OUT2,P1,FXIP,0.0)

****CONSTANTE PARTICULAR Y DIAMETRO DE PARTICULA DEL MEDIO POROSO****

REAL(POROS,DIAM,LENGTH)
 POROS=0.5
 DIAM=0.003
 LENGTH=DIAM*POROS/(1.0-POROS)

****INICIO DEL MEDIO POROSO****

PATCH(ERGUN1,VOLUME,1, NX,1,NY, 60,90,1,1)
 COVAL(ERGUN1,U1,150.0*ENUL/LENGTH**2,0.0)
 COVAL(ERGUN1,V1,150.0*ENUL/LENGTH**2,0.0)
 COVAL(ERGUN1,W1,150.0*ENUL/LENGTH**2,0.0)

****FINAL DEL MEDIO POROSO****

PATCH(ERGUN2,VOLUME,1, NX,1,NY, 60,90,1,1)
 COVAL(ERGUN2,U1,GRND,0.0)
 COVAL(ERGUN2,V1,GRND,0.0)
 COVAL(ERGUN2,W1,GRND,0.0)
 RG(2)=1.75/LENGTH

**** TASAS DE REACCION DE ESPECIES QUIMICAS****

PATCH(FUEN,PHASEM,1,NX,1,NY,1,NZ,1,1)
 COVAL(FUEN,YCH8,FIXFLU,GRND)
 COVAL(FUEN,YO2,FIXFLU,GRND)
 COVAL(FUEN,YCO,FIXFLU,GRND)
 COVAL(FUEN,YCO2,FIXFLU,GRND)
 COVAL(FUEN,YH2O,FIXFLU,GRND)

PATCH(NOXSSOUR,VOLUME,1,NX,1,NY,1,NZ,1,1)
 COVAL(NOXSSOUR,YNOW,FIXFLU,GRND)
 COVAL(NOXSSOUR,YN2,FIXFLU,GRND)

GROUP 15. TERMINATION OF SWEEPS

****NUMERO DE INTERACIONES****

LSWEEP=4000
 SELREF=F
 RESFAC=0.1

GROUP 17. UNDER-RELAXATION DEVICES

****RELAJACIONES****

REAL(DMAXY,DMAXZ,RELX)
 DMAXY=.11
 DMAXZ=.253
 RELX=0.01
 RELAX(P1 ,LINRLX, 3.000000E-01)
 RELAX(U1 ,FALSDT, 1.000000E-03)
 RELAX(V1 ,FALSDT, 1.000000E-03)
 RELAX(W1 ,FALSDT, 1.000000E-03)

```
RELAX(KE ,FALSDT, 1.000000E-03)
RELAX(EP ,FALSDT, 1.000000E-03)
RELAX(YCH8,LINRLX,0.4000)
RELAX(YO2,LINRLX,0.4000)
RELAX(YN2,LINRLX,0.4000)
RELAX(YCO2,LINRLX,0.4000)
RELAX(YH2O,LINRLX,0.4000)
RELAX(YCO,LINRLX,0.4000)
RELAX(H1 ,FALSDT, 1.000000E-03)
RELAX(RHO1,LINRLX,0.1000)
RELAX(RADX,FALSDT, 1.000000E-03)
RELAX(RADY,FALSDT, 1.000000E-03)
RELAX(RADZ,FALSDT, 1.000000E-03)
```

GROUP 18. LIMITS ON VARIABLES OR INCREMENTS TO THEM

****VALORES MAXIMOS Y MINIMOS PERMICIBLES****

```
VARMAX(P1 ) = 300000.0
VARMIN(P1 ) = -300000.0
VARMAX(KE ) = 40.000
VARMAX(EP ) = 5.000E+5
VARMIN(KE)=0.0
VARMIN(EP)=0.0
VARMAX(H1) =2.68077E+06
VARMIN(TMP1)=300.0
VARMIN(RHO1)=.3
VARMAX(YCH8 ) =1.0
VARMIN(YCH8 ) =0.0
VARMAX(YO2) =1.0
VARMIN(YO2) =0.0
VARMAX(YN2) =1.0
VARMIN(YN2) =0.0
VARMAX(YCO2) =1.0
VARMIN(YCO2) =0.0
VARMAX(YCO) =1.0
VARMIN(YCO) =0.0
VARMAX(YH2O) =1.0
VARMIN(YH2O) =0.0
```

GROUP 21. PRINT-OUT OF VARIABLES

```
NPRINT=LSWEEP
OUTPUT(P1,Y,Y,Y,Y,Y)
OUTPUT(V1,Y,Y,Y,Y,Y);OUTPUT(W1,Y,Y,Y,Y,Y)
```

GROUP 22. SPOT-VALUE PRINT-OUT

****PUNTO DE MONITORIZACION****
IXMON=1
IYMON=10
IZMON=15
TSTSWP=1

GROUP 23. FIELD PRINT-OUT AND PLOT CONTROL

****CAMPO DE RESULTADOS****
NPLT=1
ITABL=1

STOP

Apéndice D

Subrutina GROUND.

GROUP 9. PROPERTIES OF THE MEDIUM (OR MEDIA)

```
*****CÁLCULO DE LA DENSIDAD*****
C   FOR RHO1.LE.GRND--- DENSITY FOR PHASE 1   INDEX DEN1
      L0TEM1=L0F(LBNAME('TMP1'))
      L0P1=L0F(P1)
      L0DEN1=L0F(DEN1)
      L0YCH8=L0F(LBNAME('YCH8'))
      L0YN2=L0F(LBNAME('YN2'))
      L0YCO2=L0F(LBNAME('YCO2'))
      L0YCO=L0F(LBNAME('YCO'))
      L0YH2O=L0F(LBNAME('YH2O'))
      L0YO2=L0F(LBNAME('YO2'))
      DO IXX=IXF, IXL
      DO IYY=IYF, IYL
          ICELL=IYY+NY*(IXX-1)
          FMN2=AMAX1(0.0,F(L0YN2+ICELL))
          FMCO2=AMAX1(0.0, F(L0YCO2+ICELL))
          FMCO=AMAX1(0.0,F(L0YCO+ICELL))
          FMH2O=AMAX1(0.0, F(L0YH2O+ICELL))
          FMO2=AMAX1(0.0,F(L0YO2+ICELL))
          FMCH8=AMAX1(0.0, F(L0YCH8+ICELL))
          F(L0DEN1+ICELL)=(1.6E+5)*(FMCH8*44.09+FMN2*28.01
          & +FMCO2*44.01
          & +28.01*FMCO+FMH2O*18.0
          & +FMO2*32.0)/(8314.0*(L0TEM1+ICELL))
          IF(F(L0TEM1+ICELL).LE.300.0) THEN
              F(L0DEN1+ICELL)=1.0
          ELSE
              END IF
          END DO
      END DO
END DO
```

```
*****CÁLCULO DE LA TEMPERATURA*****
C   FOR TMP1.LE.GRND----- PHASE-1 TEMPERATURE INDEX TEMP1
      L0TEM=L0F(LBNAME('TMP1'))
      L0H1=L0F(H1)
      L0YCH8=L0F(LBNAME('YCH8'))
      L0YN2=L0F(LBNAME('YN2'))
      L0YCO2=L0F(LBNAME('YCO2'))
      L0YCO=L0F(LBNAME('YCO'))
      L0YH2O=L0F(LBNAME('YH2O'))
      L0YO2=L0F(LBNAME('YO2'))^
      DO IIX=IXF, IXL
      DO IYY=IYF, IYL
          ICELL=IYY+NY*(IIX-1)
          FMN2=AMAX1(0.0,F(L0YN2+ICELL))
          FMCO2=AMAX1(0.0, F(L0YCO2+ICELL))
          FMCO=AMAX1(0.0,F(L0YCO+ICELL))
          FMH2O=AMAX1(0.0, F(L0YH2O+ICELL))
          FMO2=AMAX1(0.0,F(L0YO2+ICELL))
          FMCH8=AMAX1(0.0, F(L0YCH8+ICELL))
          AAA=1000.*((FMN2)*.97035+
          & (FMCO2)*.98230 +
          & (FMCO)*.98687 +
          & (FMH2O)*1.9088 +
```

```

&      (FMO2)*1.0802+
&      (FMCH8)*1.1685)
BBB=1000.*((FMN2)*1.493E-4+
&      (FMCO2)*2.603E-4+
&      (FMCO)*1.7943E-4+
&      (FMH2O)*3.4833E-5+
&      (FMO2)*3.2656E-5+
&      (FMCH8)*2.72199E-3)
&      ARG=(AAA**2.-4.*BBB*(46.48E6*(FMCH8)+396412.44*
&      (FMCO)-F(L0H1+ICELL)))-AAA
      IF(ARG.LE.0.0) THEN
        TE=300.0
      ELSE
        TE=(SQRT(AAA**2.-4.*BBB*
&      (46.48E6*(FMCH8)+396412.44*
&      (FMCO)-F(L0H1+ICELL)))-AAA)/2./BBB
      END IF
F(L0TEM+ICELL)=TE
END DO
END DO

```

GROUP 13. BOUNDARY CONDITIONS AND SPECIAL SOURCES

```

*****ECUACIÓN MEDIO POROSO*****
IF(NPATCH.EQ.'ERGUN2') THEN
  L0CO=L0F(CO)
  L0U1=L0F(U1)
  L0V1=L0F(V1)
  L0W1=L0F(W1)
  IF(INDVAR.EQ.U1) THEN
    DO IXX=IXF, IXL
      DO IYY=IYF, IYL
        I=IYY+NY*(IXX-1)
        F(L0CO+I)=RG(2)*ABS(F(L0U1+I))
      END DO
    END DO
  END IF
  IF(INDVAR.EQ.V1) THEN
    DO IXX=IXF, IXL
      DO IYY=IYF, IYL
        I=IYY+NY*(IXX-1)
        F(L0CO+I)=RG(2)*ABS(F(L0V1+I))
      END DO
    END DO
  END IF
  IF(INDVAR.EQ.W1) THEN
    DO IXX=IXF, IXL
      DO IYY=IYF, IYL
        I=IYY+NY*(IXX-1)
        F(L0CO+I)=RG(2)*ABS(F(L0W1+I))
      END DO
    END DO
  END IF
END IF

```

```

*****MECANISMO GLOBLAL DE UN PASO*****
IF(NPATCH.EQ.'FUEN') THEN
  L0YCH8=L0F(LBNAME('YCH8'))
  L0YN2=L0F(LBNAME('YN2'))
  L0YCO2=L0F(LBNAME('YCO2'))
  L0YCO=L0F(LBNAME('YCO'))
  L0YH2O=L0F(LBNAME('YH2O'))
  L0YO2=L0F(LBNAME('YO2'))
  L0YNOW=L0F(LBNAME('YNOW'))
  L0VAL=L0F(VAL)
  L0KE=L0F(KE)
  L0EP=L0F(EP)
  DO IXX=IXF, IXL
    DO IYY=IYF, IYL
      ICELL=IYY+NY*(IXX-1)

```

C

CALCULO DE PASO 1

```

FMN2=AMAX1(0.0, F(L0YN2+ICELL))
FMCO2=AMAX1(0.0, F(L0YCO2+ICELL))
FMCO=AMAX1(0.0, F(L0YCO+ICELL))
FMH2O=AMAX1(0.0, F(L0YH2O+ICELL))
FMO2=AMAX1(0.0, F(L0YO2+ICELL))
FMCH8=AMAX1(0.0, F(L0YCH8+ICELL))

```

```

R1W=AMIN1(FMCH8,(FMO2+FMN2)/15.7)
R1W=AMIN1(R1W,(FMCO+FMH2O+FMN2)/16.7)
R1W=4.0*(F(L0EP+ICELL)/F(L0KE+ICELL))*R1W

IF(INDVAR.EQ.150) THEN
    F(L0VAL+ICELL)=-R1W
END IF
IF(INDVAR.EQ.149) THEN
    F(L0VAL+ICELL)=-R1W*3.658
END IF
IF(INDVAR.EQ.147) THEN
    F(L0VAL+ICELL)=R1W*1.6438
END IF
IF(INDVAR.EQ.146) THEN
    F(L0VAL+ICELL)=R1W*3.0142
END IF
END DO
END DO
END IF

*****MECANISMO GLOBAL DE DOS PASOS*****
IF(NPATCH.EQ.'FUEN') THEN
    L0YCH8=L0F(LBNAME('YCH8'))
    L0YN2=L0F(LBNAME('YN2'))
    L0YCO2=L0F(LBNAME('YCO2'))
    L0YCO=L0F(LBNAME('YCO'))
    L0YH2O=L0F(LBNAME('YH2O'))
    L0YO2=L0F(LBNAME('YO2'))
    L0YNOW=L0F(LBNAME('YNOW'))
    L0VAL=L0F(VA)
    L0KE=L0F(KE)
    L0EP=L0F(EP)

    DO IXX=IXF, IXL
        DO IYY=IYF, IYL
            ICELL=IYY+NY*(IXX-1)

C          CALCULO DE PASO 1

            FMN2=AMAX1(0.0,F(L0YN2+ICELL))
            FMCO2=AMAX1(0.0, F(L0YCO2+ICELL))
            FMCO=AMAX1(0.0,F(L0YCO+ICELL))
            FMH2O=AMAX1(0.0, F(L0YH2O+ICELL))
            FMO2=AMAX1(0.0,F(L0YO2+ICELL))
            FMCH8=AMAX1(0.0, F(L0YCH8+ICELL))
            R1W=AMIN1(FMCH8,(FMO2+FMN2)/10.92)
            R1W=AMIN1(R1W,(FMCO+FMH2O+FMN2)/11.92)
            R1W=4.0*(F(L0EP+ICELL)/F(L0KE+ICELL))*R1W

C          CALCULO DE PASO 2

            R2W=AMIN1(FMCO,(FMO2+FMN2)/2.45)
            R2W=AMIN1(R2W,(FMCO2+FMN2)/3.45)
            R2W=4.0*(F(L0EP+I)/F(L0KE+I))*R2W

            IF(INDVAR.EQ.150) THEN
                F(L0VAL+ICELL)=-R1W
            END IF
            IF(INDVAR.EQ.149) THEN
                F(L0VAL+ICELL)=(-R1W*2.544)-(R2W*0.57085)
            END IF
            IF(INDVAR.EQ.148) THEN
                F(L0VAL+ICELL)=(R1W*1.9066)-R2W
            END IF
            IF(INDVAR.EQ.147) THEN
                F(L0VAL+ICELL)=R1W*1.6373
            END IF
            IF(INDVAR.EQ.146) THEN
                F(L0VAL+ICELL)=R2W*1.57085
            END IF
        END DO
    END DO
END IF

```

Bibliografía

- [1] R. Aris. *Vectors, Tensors and the Basic Equations of Fluid Mechanics*.
Prentice Hall International Series in the Physical and Chemical Engineering Sciences.
1962.
- [2] B. E. Launder, G. J. Reece and W. Rodi. Progress in the development of a Reynolds
stress turbulence closure. *Journal of Fluid Mechanics*, 65:537, 1975.
- [3] F. Biagioli. Comparison Between Presumed and Monte Carlo PDF Transport Methods
for Turbulent Combustion Modeling. *AIAA-Journal of Propulsion and Power*,
13(1):109-116, 1997.
- [4] R. W. Bilger. Turbulent Jet Diffusion Flames. *Progress Energy Combustion Science*,
1 :87-109, 1976.
- [5] B. J. Daly and F. H. Harlow. Transport Equations in Turbulence. *Physics of Fluids*,
13(11):2634-2649, 1970.
- [3] A. Favre. *Problems of Hydrodynamics and Continuum Mechanics*. SIAM, 1969.
- [4] H. H. Ferziger and M. Peric. *Computational Methods for Fluid Dynamics*. Springer-
Verlag. 1996.
- [5] M. M. Gibson and B. A. Younis. Calculation of Swirling Jets with a Reynolds Stress
Closure. *Physics of Fluids*, 29-38,1986.
- [6] W. P. Jones. Models for Turbulent Flows with Variable Density and Combustion. IN
W. Kollmann, editor, *Prediction Methods for Turbulent Flows*, Lecture Series 1979-2.

- Von Karman Institute for Fluid Dynamics. Rhode Saint Genese Belgium, January 1979.
- [7] W. P. Jones. *Turbulence Modeling and Numerical Solutions Methods for Variable Density and Combustion Flows*, pages 306-374. Academic Press. 1994.
- [8] W. P. Jones and M. Kakhi. *Mathematical Modeling of Turbulent Flames*, v. 306 of *Series E. Applied Science*, Kluwer Academic Publishers, pages 411-492. 1996.
- [9] W. P. Jones and P. Musonge. Closure of the Reynolds Stress and Scalar Flux Equations. *Physics of Fluids*, 31(12):3589-3604, 1988.
- [10] T. Landefeld, A. Kremer, E. P. Hassel, and J. Janicka. Reynolds Stress Closures for Strongly Swirling Combusting Jets. In *11th Symposium on Turbulent Shear Flows*, Grenoble, 1997.
- [11] R. P. Lindstedt and E. M. Váos. Modeling of Premixed Flames with Second Moment Methods. *Combustion and flame*, 116:461-485. 1999.
- [12] J. C. Ludwing, H. Q. Qin, and D. B. Spalding. The PHOENICS Reference Manual. Technical Report CHAM TR/200, CHAM Ltd, London, 1989.
- [13] J. L. Lumey. Pressure-Strain Correlation. *Physics of Fluids*, 18(6):750, 1975.
- [14] S. Magnussen and Hjertager. On Mathematical Models of Turbulent Combustion with Special Emphasis on Soot Formation and Combustion. and Combustion. In the Combustion Institute, *16th Symposium on Combustion*, pages 719-729, Pittsburg, 1977.
- [15] E.A. Moreira, M.D. M. Innocentini, *Journal of the European Ceramic Society* 24(2004) 3209-3218, *Permeability of ceramic foams to compressible and incompressible flow*, November 2003.
- [16] A. T. Norris and A. T. Hsu. Comparison of PDF and Moment Closure Methods in the Modeling of Turbulent Reacting Flows. In SAE and ASEE ASME, editor, *30th Joint Propulsion Conference-AIAA*, Indianapolis, Indiana, June 27-29 1994.

- [17] J.C. Pan, W. J. Schmoll and D. R. Ballal. Turbulent Combustion Properties Behind a Confined Conical Stabilizer. *ASME-Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 114:33-38, 1992.
- [18] S. V. Patankar. *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. Series in Computational Methods in Mechanics and Thermal Science. Hemisphere Publishing Corporation, January 1980.
- [19] S. V. Patankar and D. B. Spalding. A Calculation Procedure for Heat, Mass and Momentum Transfer in Three Dimensional Parabolic Flows. *Int. J. Heat and Mass Transfer*, 15:1787-1806, 1972.
- [20] L.D. Smoot and P.J Smith. *Coal Combustion and Gasification*, Plenum Press, New York, 1985.
- [21] L. D. Soot and P. J. Smith. *Coal Combustion and Gasification*. Plenum Press, New York, 1985.
- [22] D. B. Spalding. D. B. Spalding. Mathematical Modeling of Fluid Dynamics, *Heat Transfer and Math Transfer Process*. Technical Report HTS/8011, Imperial College of Science Technology and Medicine, 1980.
- [23] D. B. Spalding. A Novel Finite-Difference Formulation for Differential Expressiions Involving Both First and Second Derivates. *Int. Journal. Num. Methods Engineering*, 4:551, 1992.
- [24] W. Vicente, “*Simulación numérica de la combustión y formación de contaminantes en llamas turbulentas premezcladas pobres*”, Zaragoza, mayo 2000.
- [25] J. Warnatz, U. Mass, and R. W. Dibble. *Combustion Springer*. 1996.
- [26] F. A. Williams. *Combustion Theory*. Secons Edition, the Benjamin/Cummings Publishing Company. 1985.