



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA
DE MÉXICO**

FACULTAD DE INGENIERÍA

**“EVALUACION DE MODELOS QUÍMICOS
REDUCIDOS EXTENDIDOS EN UNA
LLAMA TURBULENTA DE PREMEZCLA
POBRE”**

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

P R E S E N T A:

JOSÉ LUIS HERNÁNDEZ ELISEA



DIRECTOR DE TESIS: DR. WILLIAM VICENTE Y RODRÍGUEZ

MÉXICO, D.F. CD. UNIVERSITARIA

2006



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.

Agradecimientos

Primeramente doy gracias a mis padres que me han guiado y apoyado en este duro camino que poco a poco se fue convirtiendo en un sueño y que ahora es una realidad, y que éste es su regalo por su gran esfuerzo, los quiero mucho papas.

A mis hermanos y demás familiares que me han dado palabras de aliento y animo para seguir adelante.

Al Doctor William Vicente y Rodríguez, por haberme dado la oportunidad de colaborar con el y por haberme dado los conocimientos que me hicieron ser mas grande cada día, por ser mi guía, y por su invaluable amistad, por que mas que un profesor es un gran amigo.

Al Dr. Martín Salinas por su amistad y los conocimientos que me ha proporcionado.

Al M.I. Antonio Zepeda Sánchez por su gran apoyo y conocimiento que me proporcionó, además de ser un buen amigo y guía en mi carrera.

A todos mis amigos de la Facultad que me han apoyado, y que he contado con ellos en todos momentos, los cuales han sido y serán como una segunda familia.

A mis amigos de la Torre de Ingeniería por su valiosa ayuda y amistad.

Al DEGAPA por el apoyo recibido bajo el proyecto IN109106.

A la Universidad Nacional Autónoma de México que fue mi segundo hogar y que me brindó la oportunidad de haber sido parte de ella y que me convirtió en un profesionista y en una mejor persona.

A mis amigos en general que siempre estuvieron conmigo y a las personas que creyeron en mi, aquí está la forma de agradecerles; a los que les fui indiferente, es la mejor manera de hacer notar lo que he logrado y los que nunca creyeron que lo lograría: “Todo se puede hacer en esta vida, aquel que no fija su mirada en lo alto se encuentra ya derrotado en su existencia”.

A Dios por permitirme llegar hasta este día, por estar conmigo en todo momento, por haberme dado las fuerzas para seguir adelante y por concederme esta hermosa vida.

“Siempre hay que mirar hacia arriba y solo hay que mirar hacia abajo cuando el universo este a tus pies”

ÍNDICE GENERAL

Capítulo	Página
1. Introducción	
1.1 Antecedentes.....	8
1.2 Importancia de una buena combustión.....	9
1.3 Configuración y problema a resolver.....	10
1.4 Objetivo de la tesis.....	12
1.5 Estructura de la tesis.....	12
2. Ecuaciones de Transporte	
2.1 Introducción.....	14
2.2 Continuidad.....	14
2.3 Conservación de cantidad de movimiento.....	15
2.4 Conservación de especies.....	15
2.5 Conservación de la energía total.....	17
2.6 Ecuaciones de estado y flujo difusivo.....	19
2.7 Ecuación diferencial homogénea y fracción de mezcla.....	22
2.8 Promedio de las ecuaciones.....	24
2.9 Función de densidad de probabilidad conjunta.....	28
2.10 Ecuación de transporte para la función de densidad de probabilidad conjunta.....	30
2.10.1 Deducción e interpretación.....	30
2.10.2 Modelos de mezcla.....	35
2.10.3 Modelo Linear Mean Square Estimation.....	36
2.10.4 Modelo de Curl modificado.....	37
3. Modelos de combustión	
3.1 Introducción.....	39
3.2 Clasificación de los sistemas con reacción.....	42
3.3 Modelo Eddy Break Up.....	46
3.4 Función de densidad de probabilidad de forma supuesta.....	47
3.5 Modelos de flamelet.....	50
3.6 Mecanismos reducidos.....	51
3.7 Mecanismos químicos para el metano.....	53
3.7.1 Mecanismo sistemáticamente reducido de cinco pasos.....	53
3.7.2 Mecanismo sistemáticamente reducido de siete pasos.....	55
3.7.3 Mecanismo sistemáticamente reducido de nueve pasos.....	56
3.8 Método de representación de la química.....	57
3.8.1 Método de la tabla de interpolación.....	57

3.8.2	Redes neuronales artificiales.....	62
3.9	Tabulación in-situ estructurada.....	64
3.10	Modelo de radiación.....	65

4. Método de solución

4.1	Introducción.....	68
4.2	Método de volúmenes finitos.....	69
4.3	Método de Monte Carlo.....	75
4.3.1	Discretización de la ecuación de la FDP.....	77
4.3.2	Técnica de pasos fraccionados.....	78
4.3.3	Pasos de evolución.....	80
4.3.4	Paso fraccionado de transporte.....	80
4.3.5	Proceso de remoción.....	83
4.3.6	Paso fraccionado de mezcla.....	83
4.3.7	Paso fraccionado de reacción química.....	85
4.4	Acoplamiento de los métodos de volúmenes finitos y Monte Carlo.....	86

5. Predicción de una llama premezclada de metano y aire

5.1	Introducción.....	88
5.2	Configuración experimental.....	88
5.3	Detalles numéricos.....	95
5.4	Resultados del caso base. Análisis.....	97
5.4.1	Campos de velocidades, temperaturas y fracciones molares.....	98
5.4.2	Velocidad axial. Comparaciones con datos experimentales.....	101
5.4.3	Temperatura. Comparación con datos experimentales.....	102
5.4.4	Especies de concentración mayoritaria. Comparación con datos experimentales.....	104
5.4.5	Especies de concentración minoritaria. Comparación con datos experimentales.....	105
5.4.6	Modificaciones en la simulación y conclusiones.....	106

6. Conclusiones y recomendaciones para investigaciones futuras

6	Conclusiones.....	126
---	-------------------	-----

Apéndice A: Esquemas de discretización

1	Introducción.....	128
2	Esquemas lineales.....	129

2.1 Diferencias desplazadas de primer orden.....	129
2.2 Diferencias centradas.....	129
2.3 Híbrido.....	130

Apéndice B: Modelización del NO_x

1 Introducción.....	131
2 Rutas de formación del NO_x	131
2.1 Mecanismo de Zeldovich.....	131
2.2 Mecanismo N_2O intermedio.....	132
2.3 Mecanismo de Prompt.....	133

Apéndice C: Modelos de turbulencia

1 Introducción.....	135
2 Cierres de segundo orden.....	135
3 Modelos de viscosidad turbulenta.....	139
4 Modelo $k - \varepsilon$	140

Bibliografía.....	143
-------------------	-----

ÍNDICE DE FIGURAS

Cap.	Fig.	Página
2	2.1 Función de densidad de probabilidad en una posición x del dominio y en un tiempo t	29
	2.2 Representación discreta de la función densidad de probabilidad en una posición x del dominio y en un tiempo t	34
	3.1 Representación esquemática de una llama premezclada.....	43
	3.2 Diagrama de Borghi.....	45
	3.3 Formas para la FDP: (a) Delta de Dirac, (b) Gaussiana truncada y (c) beta.....	49
3	3.4 Estructura esquemática de la tabla que representa el sistema químico de cuatro pasos de reacción del metano.....	63
	3.5 Estructura esquemática de las redes neuronales artificiales.....	64
	3.6 Representación esquemática de la discretización (bidimensional) del espacio de composición.....	65
	4.1 Representación del sistema discretizado en volúmenes finito.....	71
	4.2 Diagrama esquemático de un volumen de control bidimensional.....	71
4	4.3 Representación esquemática de las partículas en la malla de volúmenes finitos.....	77
	4.4 Representación del paso fraccionado de transporte en la dirección x para la celda.....	82
	4.5 Representación del proceso de agitación en la celda P	84
	4.6 Representación esquemática del acoplamiento entre los métodos de volúmenes finitos y de Monte Carlo.....	87
	5.1 Representación esquemática del quemador (cotas en mm).....	90
	5.2 Localización de la llama de metano y aire en el diagrama de Borghi.....	93
	5.3 Representación esquemática de las posiciones axiales donde se tienen medidas experimentales.....	94
	5.4 Representación del dominio de simulación. El número de celdas en la dirección axial, z , es 45 y en la dirección radial, r , es 40.....	97
	5.5 Representación del campo de velocidad media en la llama.....	99
	5.6 Contornos de líneas de corriente.....	100
	5.7 Frecuencia de mezcla local.....	103
	5.8 Contornos de Temperatura [K].....	107

	5.9 Contornos de fracción molar media de CH ₄ (ppm).....	107
	5.10 Contornos de fracción molar media de OH (ppm).....	108
	5.11 Contornos de fracción molar media de CO (ppm).....	108
	5.12 Contornos de fracción molar media de NO (ppm).....	109
	5.13 Contornos de fracción molar media de H ₂ O	109
	5.14 Perfiles radiales de velocidad en $z/D_0 = 0.1$. Para los tres modelos de reacción.....	110
	5.15 Perfiles radiales de velocidad en $z/D_0 = 0.3$. Para los tres modelos de reacción.....	110
	5.16 Perfiles radiales de velocidad en $z/D_0 = 0.6$. Para los tres modelos de reacción.....	111
	5.17 Perfiles radiales de velocidad en $z/D_0 = 1.0$. Para los tres modelos de reacción.....	111
	5.18 Perfiles radiales de temperatura en $z/D_0 = 0.1$. Caso base.....	112
	5.19 Perfiles radiales de temperatura en $z/D_0 = 0.3$. Caso base.....	112
	5.20 Perfiles radiales de temperatura en $z/D_0 = 0.6$. Caso base.....	113
5	5.21 Perfiles radiales de temperatura en $z/D_0 = 1.0$. Caso base.....	113
	5.22 Perfiles radiales de fracción molar de CH ₄ en $z/D_0 = 0.1$. Caso base.....	114
	5.23 Perfiles radiales de fracción molar de CH ₄ en $z/D_0 = 0.3$. Caso base.....	114
	5.24 Perfiles radiales de fracción molar de CH ₄ en $z/D_0 = 0.6$. Caso base.....	115
	5.25 Perfiles radiales de fracción molar de CH ₄ en $z/D_0 = 1.0$. Caso base.....	115
	5.26 Perfiles radiales de fracción molar de CO ₂ en $z/D_0 = 0.1$. Caso base.....	116
	5.27 Perfiles radiales de fracción molar de CO ₂ en $z/D_0 = 0.3$. Caso base.....	116
	5.28 Perfiles radiales de fracción molar de CO ₂ en $z/D_0 = 0.6$. Caso base.....	117
	5.29 Perfiles radiales de fracción molar de CO ₂ en $z/D_0 = 1.0$. Caso base.....	117
	5.30 Perfiles radiales de fracción molar de H ₂ O en $z/D_0 = 0.1$. Caso base.....	118
	5.31 Perfiles radiales de fracción molar de H ₂ O en $z/D_0 = 0.3$. Caso base.....	118

5.32 Perfiles radiales de fracción molar de H_2O en $z/D_0 = 0.6$. Caso base.....	119
5.33 Perfiles radiales de fracción molar de H_2O en $z/D_0 = 1.0$. Caso base.....	119
5.34 Perfiles radiales de fracción molar de CO en $z/D_0 = 0.1$. Caso base.....	120
5.35 Perfiles radiales de fracción molar de CO en $z/D_0 = 0.3$. Caso base.....	120
5.36 Perfiles radiales de fracción molar de CO en $z/D_0 = 0.6$. Caso base.....	121
5.37 Perfiles radiales de fracción molar de CO en $z/D_0 = 1.0$. Caso base.....	121
5.38 Perfiles radiales de fracción molar de OH en $z/D_0 = 0.1$. Caso base.....	122
5.39 Perfiles radiales de fracción molar de OH en $z/D_0 = 0.3$. Caso base.....	122
5.40 Perfiles radiales de fracción molar de OH en $z/D_0 = 0.6$. Caso base.....	123
5.41 Perfiles radiales de fracción molar de OH en $z/D_0 = 1.0$. Caso base.....	123
5.42 Perfiles radiales de fracción molar de NO en $z/D_0 = 0.1$. Caso base.....	124
5.43 Perfiles radiales de fracción molar de NO en $z/D_0 = 0.3$. Caso base.....	124
5.44 Perfiles radiales de fracción molar de NO en $z/D_0 = 0.6$. Caso base.....	125
5.45 Perfiles radiales de fracción molar de NO en $z/D_0 = 1.0$. Caso base.....	125

Apéndice A

1 Diagrama esquemático de celdas.....	128
---------------------------------------	-----

ÍNDICE DE TABLAS

Cap.	Tabla	Página
	5.1 Parámetros experimentales de la llama de metano y aire [100]	91
	5.2 Características y parámetros turbulentos de la llama de metano y aire.....	92
5	5.3 Incertidumbre típica de las medidas experimentales reportadas por Nandula et al [100].....	93
	5.4 Valores de equilibrio para una mezcla metano y aire con una relación de equivalencia de 0.586. Los valores de las especies están expresados en fracción molar, salvo indicación contraria.....	94
	5.5 Porcentaje del tiempo de cálculo por los módulos del modelo numérico: Volúmenes finitos (VF) y Monte Carlo (MC).....	95
1	Constantes de las ecuaciones (7), (10) y (11).....	139
2	Constantes del modelo $k - \varepsilon$	141

Capítulo 1

INTRODUCCIÓN

1.1 Antecedentes

Conforme avanza la tecnología computacional se abren caminos antes no explorados en los campos de la investigación de simulación numérica. En la actualidad existen ordenadores de muy alta velocidad que pueden realizar cientos de operaciones por segundo; con esto se pueden simular modelos, resolver ecuaciones muy complejas, seguir secuencias de algoritmos complicados, etc. Por lo tanto es de suma importancia que los avances en desarrollo de hardware y software sean cada vez mayores, dándonos facilidad de resolver cosas que antes eran inconcebibles de realizar.

Así la simulación numérica es una herramienta muy útil para diversas áreas de la investigación científica en general, pero debido al tema en estudio, se enfoca principalmente en lo que se llama Dinámica de Fluidos Computacional (Computational Fluid Dynamics ó CFD), que es ya una herramienta cada vez mas usada por los científicos o diseñadores en la industria.

Cabe mencionar que al utilizar computadoras más potentes para la simulación de modelos de dinámica de fluidos se pueden obtener generalmente mejores resultados en menos tiempo, debido principalmente a que la mayoría de estos métodos utilizados para resolver las ecuaciones que gobiernan el movimiento del fluido, y que son cada vez más eficientes y complejos, necesitan de procesadores de más alta velocidad por el alto número de operaciones que se llevan a cabo en los mismos.

Actualmente existe la tendencia a utilizar más la simulación numérica de modelos físicos y experimentales, con la finalidad de evitar la construcción de estos mismos.

Al realizar el análisis por computadora se ha llegado a buenas aproximaciones, que son muy cercanas a la realidad. Sin embargo, no se debe dejar a un lado la parte experimental, ya que ésta valida los resultados computacionales, aunque en las industrias se da un proceso de reingeniería, en el cual se va mejorando un producto, tomando en cuenta aspectos y defectos de modelos o productos anteriores; esta información se almacena en bases de datos para después tomarse en cuenta en proyectos posteriores. De esta forma, se tiene información de experimentos, pruebas reales, simulaciones, etc. para así concatenarlos y tratar de simular los nuevos procesos lo más apegados a la realidad.

1.2 Importancia de una buena combustión.

En esta tesis se estudia el fenómeno de combustión que es un caso específico en la dinámica de fluidos, el cual se puede simular mediante la Dinámica de Fluidos Computacional.

En ingeniería existe una infinidad de procesos que implican la reacción química de especies en el seno de un fluido, tal es el caso del fenómeno de combustión, del cual es muy interesante estudiar las condiciones en que se puede llevar a cabo, sus características, los modelos que lo describen, etc.; sin embargo, se debe de tomar en cuenta que cuando se lleva a cabo la combustión de ciertos combustibles como el metano (CH_4), se liberan ciertos gases que llegan a ser nocivos para la salud. En una combustión completa se debe de generar dióxido de carbono (CO_2) y agua (H_2O) únicamente, sin embargo en la realidad esto no se da correctamente, ya que las formas y condiciones en que puede llevarse a cabo este fenómeno dependen del tipo de mezcla que se introduzca para la combustión y del tipo de quemador o medio en el que se realice el fenómeno. Cuando se introduce una mezcla rica en combustible se puede llegar a tener una combustión incompleta, dando como resultado combustible sin quemar en los gases de escape; sin embargo si la mezcla es pobre en combustible se puede disminuir considerablemente la temperatura, con lo cual existe una reducción de los niveles de noxes, sin embargo al tener una mezcla pobre casi en el límite de flamabilidad se pueden llegar a tener muchas

inestabilidades; esto puede llegar a generar altos niveles de CO lo cual es algo no deseado ya que es un contaminante (al igual que los noxes) muy malo para la salud y el medio ambiente

Por su parte, el monóxido de carbono en concentraciones elevadas en el aire representa una amenaza para la salud. El CO inhalado se combina con la hemoglobina de la sangre, dando lugar a la formación de carboxihemoglobina, lo que reduce la capacidad de la sangre para el transporte de oxígeno desde los pulmones hasta los tejidos del cuerpo humano, lo cual puede llegar a ser mortal.

Una saturación de carboxihemoglobina que rebase el 10% puede llegar a provocar efectos en las funciones psicomotoras, estas se pueden llegar a manifestar con síntomas de cansancio, cefaleas y alteraciones de la coordinación. Por arriba del 5% de saturación se producen cambios funcionales cardíacos y pulmonares y se aumenta el umbral visual. No se han encontrado pruebas que indiquen efectos significativos con una concentración de carboxihemoglobina inferior al 2%.

Los óxidos de nitrógeno, NO_x , son contaminantes muy peligrosos también para la salud y el medio ambiente. El más tóxico de los contaminantes de este tipo es el NO_2 . Los efectos producidos por el NO_2 sobre los animales y los seres humanos afectan, en su mayor parte, al aparato respiratorio. Una concentración media de 190 microgramos de NO_2 por m^3 de aire, en un 40% del día, aumenta la frecuencia de infecciones de las vías respiratorias en la población expuesta. Otro factor es que a partir de los óxidos de nitrógeno y la radiación solar se forma ozono (O_3), el cual es un contaminante que afecta principalmente al sistema respiratorio, causando una reducción en la capacidad pulmonar de los individuos, deteriora el sistema respiratorio, empeora enfermedades respiratorias y actualmente se ha encontrado que también inhibe la capacidad de transporte de oxígeno en los glóbulos rojos.

1.3 Configuración y problema a resolver

Una forma de reducir gran parte de contaminantes como el CO y los NO_x es diseñando mejores tipos de quemadores. A los quemadores se les puede dar varias

configuraciones y condiciones con el fin de la reducción de estos contaminantes. Existen diferentes formas de poder realizar esto, sin embargo esta tesis se concentra en el caso de un quemador de premezcla pobre; en dicho quemador la llama es estabilizada por medio de un cuerpo romo.

El sistema en estudio consta de una geometría multidimensional y de una mezcla multicomponente de gases que reacciona químicamente.

Se estudia principalmente la formación de CO y NO_x en una flama turbulenta de premezcla pobre por medio de un modelo estocástico, enfocando la investigación sobre la influencia de los modelos de reacción química en la formación de las especies químicas principalmente. La configuración simulada consiste de una flama premezclada, estabilizada por medio de un cuerpo romo con una zona de recirculación. Se usaron tres modelos diferentes para el caso de la cinética-química, estos son: 5, 7 y 9 pasos de reacción. Con respecto a la cinética-química, se utiliza el método de tabulación adaptable para representar este caso. Finalmente los resultados obtenidos son comparados con datos experimentales, considerando diferentes parámetros tales como temperatura, velocidades, así como diferentes concentraciones de especies. Se encuentra que las estimaciones muestran que concentraciones de especies tales como CO , OH y CH_3 son influenciados fuertemente por el modelo químico usado. Se encontró que existen mejoras conforme aumenta el número de pasos en el modelo, sin embargo al extender el número de pasos se requiere un mayor tiempo de cómputo.

Los fenómenos de combustión tales como la estabilidad de una flama, extinción local o total, formación de CO y NO son gobernados por efectos químicos finitos. Pero se requiere además estudiar su interacción de estos componentes con el campo de flujo. Las herramientas numéricas para el manejo de tal interacción dentro de un flujo turbulento están disponibles, para casos que consisten en la solución de una ecuación de transporte, de una función de densidad de probabilidad (FDP). Sin embargo, este método está restringido a pocos escalares, los cuales son necesarios

para la estimación del estado termo-químico. El término de esta reacción química es cerrado para el caso de esta aproximación, por cual no requiere ser modelado.

Una PDF es definida por varios escalares, por eso los recursos computacionales están restringidos solo para investigaciones detallada. Sin embargo existen grandes progresos en la búsqueda de nuevos métodos de representación como el método de tabulación adaptable *in-situ* [8] (en la cual, los parámetros están controlados por medio de tablas dinámicas, de las cuales sus entradas están estimadas, y en constante actualización durante el curso de la simulación turbulenta de la flama) permitiendo el uso de más esquemas químicos reducidos extendidos, apoyando de esta manera a un gran número de especies químicas, así como de pasos de reacción en simulaciones de flamas turbulentas.

1.4 Objetivo de la tesis

El objetivo de esta tesis es evaluar los mecanismos reducidos extendidos para el CH_4 , relacionados para las predicciones del CO y el NO principalmente por medio de simulación numérica, realizados para una flama turbulenta de premezcla pobre.

Los datos detallarán parámetros tales como: velocidad, temperatura, especies químicas de concentración mayoritaria (CH_4 , CO_2 , H_2O y O_2) y minoritaria (CO , OH y NO), empleando para esto, modelos químicos reducidos de 5, 7 y 9 pasos para la simulación.

1.5 Estructura de la tesis

Esta tesis se compone principalmente de cinco partes. La primera es la introducción, en la cual se dan antecedentes, objetivos, métodos de solución y el porque del estudio de combustión en este tipo de geometría especial para un quemador.

Posteriormente, en el capítulo 2 se presentan las ecuaciones de transporte que gobiernan el movimiento de un fluido que reacciona químicamente. Inicialmente se

muestran las ecuaciones instantáneas de continuidad, cantidad de movimiento, energía y especies químicas; por último, se presentan sus respectivas ecuaciones promediadas.

En el capítulo 3 se estudian los modelos de combustión. Se aborda el problema de cierre de la ecuación de transporte de la fracción másica asociado a la reacción química, así como algunas aproximaciones propuestas para describir la reacción química en el flujo turbulento. También se presentan los mecanismos químicos reducidos para la combustión del metano y modelos para representar la química del proceso.

En el capítulo 4 se presentan los métodos de volúmenes finitos y de Monte Carlo; este último resuelve una función de densidad de probabilidad conjunta, llamada FDP por sus siglas. Se estudia además su interacción mutua entre estos dos métodos para poder resolver los modelos que permiten conocer la aerodinámica y evolución de las especies químicas.

Posteriormente, en el capítulo 5 se describe en detalle el fenómeno de combustión de premezcla pobre en un quemador estabilizado por medio de un cuerpo romo, así como de los estudios realizados y los resultados obtenidos, en los cuales se incluyen esquemas y gráficas.

Al final se encuentran las conclusiones del trabajo así como algunas recomendaciones para trabajos futuros.

Capítulo 2

ECUACIONES DE TRANSPORTE

2.1 Introducción

Existen ecuaciones que gobiernan el movimiento de un fluido que reacciona químicamente, las cuales permiten realizar la simulación numérica de una llama turbulenta. En este capítulo se muestran inicialmente las ecuaciones instantáneas que gobiernan las condiciones del flujo, partiendo de las ecuaciones de continuidad, cantidad de movimiento, energía y por ultimo, la ecuación de la especie química.

A continuación se presenta la alternativa de ecuaciones promediadas (Reynolds o Favre Averaged Navier- Stokes Equations, RANS), que tienen exigencias razonables de cómputo en comparación con la DNS (Direct Numerical Simulations).

Por ultimo, se muestra una ecuación de transporte para la función de densidad de probabilidad conjunta de todos los escalares que determinan el estado termoquímico de la mezcla reactiva. Esta ecuación se formula en la última parte de este capítulo.

2.2 Continuidad

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

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = 0 \quad (2.1)$$

donde \vec{v} y ρ son la velocidad y la densidad instantáneas de la mezcla reactiva respectivamente.

2.3 Conservación de cantidad de movimiento

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

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \bar{v}) + \nabla \cdot (\rho \bar{v} \bar{v}) = -\nabla p + \nabla \cdot \bar{\tau}' + \rho \bar{f}_m \quad (2.2)$$

donde p es la presión, $\bar{\tau}'$ es el tensor de esfuerzos viscosos y \bar{f}_m son las fuerzas másicas, por ejemplo la gravedad, \bar{g} . La ley de Navier-Poisson establece que el tensor de esfuerzos viscosos es [4]:

$$\bar{\tau}' = \mu(\nabla \bar{v} + \nabla \bar{v}^T) + (\mu_v - 2/3\mu)(\nabla \cdot \bar{v})\bar{\delta} \quad (2.3)$$

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. El coeficiente de viscosidad volumétrico, μ_v , es nulo para los gases monoatómicos. Por lo general, el coeficiente de viscosidad volumétrico se desprecia [141].

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

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \bar{v}) + \nabla \cdot (\rho \bar{v} \bar{v}) = -\nabla p + \nabla \cdot \left[\mu \left(\nabla \bar{v} + (\nabla \bar{v})^T - \frac{2}{3}(\nabla \cdot \bar{v})\bar{\delta} \right) \right] + \rho \bar{g} \quad (2.4)$$

2.4 Conservación de las especies

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

$$Y_\alpha = \frac{m_\alpha}{m_T} \quad (2.5)$$

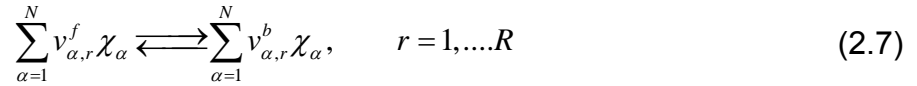
donde m_α es la masa de la especie y m_T es la masa total de la mezcla (contenida en el mismo volumen). De acuerdo con la definición (5), la suma de todas las fracciones másicas de las especies es uno. $\sum_{\alpha=1}^N Y_\alpha = 1$.

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

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_\alpha) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} Y_\alpha) = -\nabla \cdot \vec{J}_\alpha + S_\alpha, \quad \alpha = 1, 2, \dots, N \quad (2.6)$$

donde \vec{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 (2.1), se cumple que $\sum_{\alpha=1}^N S_\alpha = 0$ y $\sum_{\alpha=1}^N \vec{J}_\alpha = 0$. El flujo difusivo de la especie α , \vec{J}_α se trata más adelante.

Una expresión más general para la velocidad de reacción química, S_α , se puede obtener si se supone que un sistema químico con R reacciones presenta la siguiente forma general:



donde χ_α es el símbolo químico de cada especie, v_α son los coeficientes estequiométricos, el superíndice f indica la reacción directa (forward) y b reacción inversa (backward).

Cuando la reacción (2.7) es elemental, la tasa de producción S_α es:

$$S_\alpha = W_\alpha \sum_{r=1}^R (v_{\alpha,r}^b - v_{\alpha,r}^f) \dot{\omega}_{\alpha,r}, \quad \alpha = 1, \dots, N \quad (2.8)$$

donde W_α es el peso molecular de la especie α y $\dot{\omega}_{\alpha,r}$ es la velocidad de reacción de la especie α , debido a la reacción r . La velocidad de reacción neta $\dot{\omega}_{\alpha,r}$ de la reacción r es:

$$\dot{\omega}_{\alpha,r} = k_{f,r} \prod_{\alpha=1}^N [X_\alpha]^{v_{\alpha,r}^f} - k_{b,r} \prod_{\alpha=1}^N [X_\alpha]^{v_{\alpha,r}^b} \quad (2.9)$$

donde $[X_\alpha]$ es la fracción molar de las especies α , $k_{f,r}$ 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:

$$k_{f,r} = A_r T^{b_r} e^{\left(-\frac{E_r}{R_C T}\right)} \quad (2.10)$$

donde A_r es el 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 constante de reacción inversa $k_{b,r}$, se relaciona con la constante de reacción directa $k_{f,r}$, mediante la constante de equilibrio:

$$k_{b,r} = \frac{k_{f,r}}{k_{e,r}}, \quad k_{e,r} = \exp\left(-\frac{\Delta Z^o}{RT}\right) \quad (2.11)$$

donde ΔZ^o es el cambio de la energía libre de Helmholtz en el estado estándar. El cambio en la energía libre de Helmholtz en el estado estándar es:

$$\Delta Z^o = \sum_{\alpha=1}^N (s_\alpha^b - s_\alpha^f)(U_\alpha^o - T_\alpha S_\alpha^o) \quad (2.12)$$

donde U_α^o , T_α^o y S_α^o son respectivamente la energía interna, temperatura y entropía en el estado estándar de la especie α .

La ecuación (2.5) también puede formularse en términos de la molalidad, n_α (número de moles por unidad de masa de la mezcla), definida como:

$$n_\alpha = Y_\alpha / W_\alpha \quad (2.13)$$

2.5 Conservación de la energía total

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

$$e = u + \frac{1}{2}|\vec{v}|^2 + U \quad (2.14)$$

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

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\rho \left(u + \frac{1}{2}|\vec{v}|^2 + U \right) \right] + \nabla \cdot \left[\rho \vec{v} \left(u + \frac{1}{2}|\vec{v}|^2 + U \right) \right] = \nabla \cdot (\vec{\tau}' \cdot \vec{v}) - \nabla \cdot (p \vec{v}) - \nabla \cdot \vec{J}_e + \dot{Q}_r \quad (2.15)$$

donde \vec{J}_e es el flujo difusivo de calor y \dot{Q}_r es el intercambio de calor por radiación. En la ecuación (2.15), 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:

$$h = u + \frac{p}{\rho} \quad (2.16)$$

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

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\rho \left(h + \frac{1}{2}|\vec{v}|^2 + U \right) \right] + \nabla \cdot \left[\rho \vec{v} \left(h + \frac{1}{2}|\vec{v}|^2 + U \right) \right] = \frac{Dp}{Dt} + (\vec{\tau}' : \nabla \vec{v}) - \nabla \cdot \vec{J}_h + \dot{Q}_r \quad (2.17)$$

donde $D/Dt = \partial/\partial t + \vec{v} \cdot \nabla$, es la derivada sustancial, y $\vec{\tau}' : \nabla \vec{v}$ 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 los calores específicos a presión y a volumen constante) es pequeño, $Ma \ll 1$ y por lo tanto, la energía cinética comparada con la entalpía es despreciable [145].

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 [141], que no es el caso a analizar en esta Tesis.

El número de Eckert, $Ec = \bar{v}_o^2 / CpT_o$ es un indicador de la contribución de la disipación de la energía cinética al nivel total de la entalpía. En 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. Inicialmente no se considera en esta Tesis; más adelante, el efecto de la radiación en los flujos estudiados se evalúa con el modelo de pérdidas de calor por radiación que se introduce en el capítulo 3.

2.6 Ecuaciones de estado y flujo difusivo

Las ecuaciones anteriores deben ser complementadas con ecuaciones de estado que relacionen la presión, la densidad y la temperatura, y por expresiones para los flujos difusivos (leyes de Fick).

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

$$\rho = \frac{1}{\sum_{\alpha=1}^N \frac{Y_{\alpha}}{\rho_{\alpha}}} \quad (2.18)$$

Si se supone una mezcla de gases ideales:

$$\rho = \frac{p}{RT \sum_{\alpha=1}^N \frac{Y_{\alpha}}{W_{\alpha}}} \quad (2.19)$$

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

$$h = \sum_{\alpha=1}^N Y_{\alpha} h_{\alpha} \quad (2.20)$$

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:

$$h_{\alpha} = \int_{T_o}^T C_{p_{\alpha}} T' dT' + \Delta h_{f,\alpha} \quad (2.21)$$

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

El flujo difusivo (\vec{J}_{α}), se produce por gradientes de concentraciones de especies, de su temperatura (efecto Soret), y de la presión [145]. Estos dos últimos efectos son generalmente despreciados en flujos con combustión ([141] y [145]). El flujo difusivo (\vec{J}_{α}) se expresa según la ley de Fick, que se escribe como [141]:

$$\vec{J}_{\alpha} = \frac{\rho W_{\alpha}}{W_m^2} \sum_{\beta \neq \alpha}^N D_{\alpha\beta} W_{\beta} \nabla X_{\beta} \quad (2.22)$$

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:

$$\vec{J}_{\alpha} = -D_{\alpha}^M \rho \frac{Y_{\alpha}}{X_{\alpha}} \nabla X_{\alpha} \quad (2.23)$$

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, $D_{\alpha\beta}$:

$$D_\alpha^M = \frac{1 - Y_\alpha}{\sum_{\beta \neq \alpha}^N x_\beta / D_{\alpha\beta}} \quad (2.24)$$

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 ([141] y [145]); por lo tanto el término (\bar{J}_h) se expresa con la ley de Fourier:

$$\bar{J}_h = -k \nabla T \quad (2.25)$$

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

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

$$Sc_\alpha = \frac{\mu}{D_\alpha \rho} \quad (2.26)$$

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

$$\bar{J}_\alpha = -\Gamma_\alpha \nabla Y_\alpha \quad \Gamma_\alpha = \frac{\mu}{Sc_\alpha} = \rho D_\alpha \quad (2.27)$$

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:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = 0 \quad (2.28)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \vec{v}) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) = -\nabla p + \nabla \cdot \left[\mu \left(\nabla \vec{v} + (\nabla \vec{v})^T - \frac{2}{3}(\nabla \cdot \vec{v})\vec{\delta} \right) \right] + \rho \vec{g} \quad (2.29)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_\alpha) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} Y_\alpha) = \nabla \cdot \Gamma_\alpha \nabla Y_\alpha + S_\alpha \quad (2.30)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} h) = -\nabla \cdot \vec{J}_h + \dot{Q}_R + \tau'' \cdot \nabla v \quad (2.31)$$

Cuando C_p puede suponerse constante, la expresión (2.25) se puede escribir como:

$$\vec{J}_h = -\frac{k}{C_p} \nabla h \quad (2.32)$$

El número de Prandtl, Pr , Se define como:

$$Pr = \mu \frac{C_p}{k} \quad (2.33)$$

En términos del número de Prandtl, la expresión (2.32) se puede escribir como:

$$\vec{J}_h = -\Gamma_h \nabla h \quad \Gamma_h = \frac{\mu}{Pr} \quad (2.34)$$

2.7 Ecuación diferencial homogénea y fracción de mezcla

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

$$\Gamma = \Gamma_\alpha = \Gamma_h \quad (2.35)$$

El número de Lewis Le , se define como:

$$Le = \frac{Sc_\alpha}{Pr} = \frac{k}{\rho D_\alpha C_p} \quad (2.36)$$

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 de transporte turbulento $\overline{v''\phi''_\alpha}$. Este flujo turbulento frecuentemente se modela como un término de difusión turbulenta con igual coeficiente de difusión para las especies y la entalpía (expresión (2.75)), por lo que la hipótesis de igual difusividad esta 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 tiene como consecuencia que sus ecuaciones de conservación tienen la misma forma:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi_z) + \nabla \cdot (\rho\vec{v}\phi_z) - \nabla \cdot \Gamma \nabla \phi_z = 0 \quad (2.37)$$

donde ϕ_z es la especie inerte o la entalpía. A la ecuación (2.37) 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 del número de Lewis unitario, la entalpía también responde a la ecuación diferencial homogénea (2.37).

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 (2.37) por lo tanto también representa estas

combinaciones resultantes, que se denominan frecuentemente funciones de acoplamiento [145].

Cuando el sistema a estudiar tiene solo (a lo sumo) 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:

$$\frac{\phi_z - \phi_{z,2}}{\phi_{z,1} - \phi_{z,2}} = \frac{h - h_2}{h_1 - h_2} \quad (2.38)$$

donde los subíndices 1 y 2 indican las dos entradas. El cociente de la expresión (2.38) 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 del 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 mezcla (2.38) también responde a la ecuación diferencial (2.37), al ser una combinación lineal de soluciones de esa ecuación.

2.8 Promedio 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 promediado 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 las 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, no ponderado con la densidad, y usado generalmente en flujos con densidad constante, y el otro es el propuesto por Favre [46], que es ponderado con la densidad.

Con fines de ilustración, se representa 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:

$$\Phi = \bar{\Phi} + \Phi' \quad (2.39)$$

$$\Phi = \tilde{\Phi} + \Phi'' \quad (2.40)$$

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

$$\bar{\Phi} = \lim_{n_e \rightarrow \infty} \frac{1}{n_e} \sum_{i=1}^{n_e} \Phi^{(i)} \quad \text{Promedio muestral de Reynolds} \quad (2.41)$$

$$\tilde{\Phi} = \frac{1}{\bar{\rho}} \lim_{n_e \rightarrow \infty} \frac{1}{n_e} \sum_{i=1}^{n_e} \rho^{(i)} \Phi^{(i)} \quad \text{Promedio muestral de Favre} \quad (2.42)$$

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

De las definiciones anteriores:

$$\overline{\phi'} = 0 \quad \overline{\rho \Phi''} = 0 \quad \overline{\Phi''} \neq 0 \quad \overline{\rho \Phi'} \neq 0 \quad (2.43)$$

Con la definición de los dos promedios se obtiene:

$$\bar{\Phi} = \tilde{\Phi} + \overline{\Phi''} \quad (2.44)$$

$$\overline{\Phi''} = -\frac{\overline{\rho'\Phi''}}{\bar{\rho}} \quad (2.45)$$

$$\overline{\rho'\Phi''} = \overline{\rho'\Phi'} \quad (2.46)$$

$$\overline{u_i'\phi'} = \overline{u_i''\phi''} - \frac{\overline{\rho'u_i''\phi''}}{\bar{\rho}} + \overline{u_i''\phi''} \quad (2.47)$$

Uno de los motivos para aplicar el promedio de Favre en las ecuaciones instantáneas de transporte, es la forma más sencilla de las ecuaciones resultantes, que no incluyen correlaciones 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 obtiene [141]:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{v}}) = 0 \quad (2.48)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho} \tilde{\mathbf{v}}) + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{v}} \tilde{\mathbf{v}}) = -\nabla \cdot \bar{p} + \underbrace{\nabla \cdot \left[\mu \left(\nabla \tilde{\mathbf{v}} + (\nabla \tilde{\mathbf{v}})^T - \frac{2}{3} (\nabla \tilde{\mathbf{v}}) \bar{\delta} \right) \right]}_I - \underbrace{\nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{v}}'' \tilde{\mathbf{v}}'')}_{II} + \bar{\rho} \bar{\mathbf{g}} \quad (2.49)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho} \tilde{Y}_\alpha) + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{v}} \tilde{Y}_\alpha) = \underbrace{\nabla \cdot \bar{\Gamma}_\alpha \nabla \tilde{Y}_\alpha}_I - \underbrace{\nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{v}}'' \tilde{Y}_\alpha'')}_{II} + \bar{S}_\alpha \quad (2.50)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho} \tilde{h}) + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{v}} \tilde{h}) = -\underbrace{\nabla \cdot \tilde{\mathbf{J}}_h}_I - \underbrace{\nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{v}}'' \tilde{h}'')}_{II} \quad (2.51)$$

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

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho} \tilde{\phi}_z) + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{v}} \tilde{\phi}_z) = \underbrace{\nabla \cdot (\bar{\Gamma} \nabla \tilde{\phi}_z)}_I - \underbrace{\nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{v}}'' \tilde{\phi}_z'')}_{II} \quad (2.52)$$

Las ecuaciones anteriores tienen una forma idéntica a las correspondientes ecuaciones instantáneas, con un término adicional $\overline{u_i''\Phi''}$, 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 (2.48), (2.49), (2.50), (2.51) y (2.52) se escriben como:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{v}}) = 0 \quad (2.53)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{v}}) + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{v}} \tilde{\mathbf{v}}) = -\nabla \cdot \bar{p} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \overline{\mathbf{v}'' \mathbf{v}''}) + \bar{\rho} \bar{\mathbf{g}} \quad (2.54)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{Y}_\alpha) + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{v}} \tilde{Y}_\alpha) = \nabla \cdot (\bar{\rho} \overline{\mathbf{v}'' Y''}_\alpha) + \bar{S}_\alpha \quad (2.55)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{h}) + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{v}} \tilde{h}) = -\nabla \cdot (\bar{\rho} \overline{\mathbf{v}'' h''}) \quad (2.56)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{\phi}_z) + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{v}} \tilde{\phi}_z) = -\nabla \cdot (\bar{\rho} \overline{\mathbf{v}'' \phi''}_z) \quad (2.57)$$

Si el flujo es de baja velocidad ($Ma \ll 1$) generalmente se supone que las fluctuaciones de la presión son despreciables [63]. 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_o :

$$\bar{\rho} = p_o \left(R_c T \sum_{\alpha=1}^N \frac{Y_\alpha}{W_\alpha} \right)^{-1} \quad (2.58)$$

$$\bar{S}_\alpha(p, \rho, \phi_\alpha) = S_\alpha(p, \bar{\rho}, \tilde{\phi}_\alpha) \quad (2.59)$$

Donde $\tilde{\phi}_\alpha$ representa la fracción másica de las especies y la entalpía, por lo tanto $\alpha = 1, \dots, N + 1$.

Los flujos turbulentos $\overline{\mathbf{v}'' \Phi''}$, de la ecuaciones (2.54), (2.55) y (2.56) son términos desconocidos que requieren modelización. El cierre del término $\overline{\rho \mathbf{v}'' \mathbf{v}''}$ de la ecuación media de cantidad de movimiento (2.54) se trata en el apéndice B.

El tratamiento del término $\bar{\rho} \bar{v}'' \phi''_\alpha$, se puede consultar en Jones et al [63] y [64], y Lindstedt [84]

Para hacer el cierre de las ecuaciones (2.53), (2.54), (2.55) y (2.56) hace falta, también conocer el valor medio de la tasa de reacción de la especie química, \bar{S}_α y la densidad $\bar{\rho}$. Estas cantidades se pueden escribir como:

$$\bar{S}_\alpha = S_\alpha(\tilde{T}, \bar{\rho}, \tilde{\phi}_1, \dots, \tilde{\phi}_N) \quad (2.60)$$

$$\bar{\rho} = \rho(\tilde{T}, \tilde{\phi}_1, \dots, \tilde{\phi}_N) \quad (2.61)$$

La tasa de reacción media se puede, en primera instancia, representar mediante desarrollos en series de Taylor entorno a los valores medios. Sin embargo, este método tiene el inconveniente de que es necesario modelar un gran número de correlaciones de alto orden de la temperatura ([141] y [6]); y además la convergencia de la serie Taylor es mala. Otra aproximación es la evaluación de la tasa de reacción media con valores medios, pero esta aproximación puede solamente ser válida para reacciones que son muy lentas comparadas con los cambios en el campo de flujo turbulento local. En la combustión, las principales reacciones son muy rápidas para hacer esta aproximación ([128], [106]).

La falta de información sobre la forma de las fluctuaciones es el inconveniente que se presenta en la evaluación de estas cantidades. Una opción para la introducción de esta forma es la función de densidad de probabilidad. A continuación se presenta este método.

2.9 Función de densidad de probabilidad conjunta.

La función de densidad de probabilidad (Figura 2-1), $P(\underline{\psi}; \underline{x}, t)$, se define como la densidad de probabilidad del evento $\phi(\underline{x}, t) = \underline{\psi}$ para una localización \underline{x} y un tiempo, t , dados, donde ϕ es el vector de composición aleatorio y $\underline{\psi}$ es el espacio muestral de ϕ .

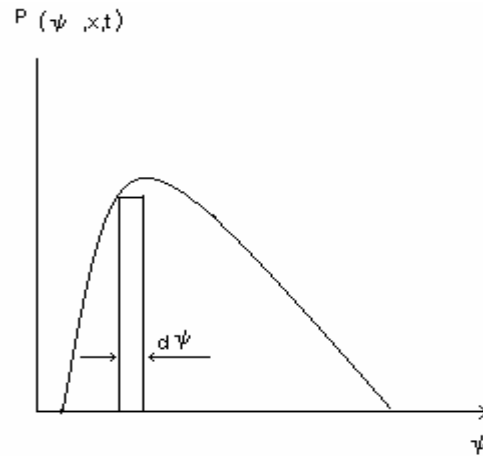


Figura 2.1. Función de densidad de probabilidad en una posición x del dominio y en un tiempo t .

En adelante, $P(\underline{\psi}; \underline{x}, t)$, y $\phi(\underline{x}, t)$ se escriben respectivamente como $P(\underline{\psi})$ y ϕ , y las dependencias en \underline{x} y en t se consideran implícitas. La FDP, es una FDP conjunta y es función de los escalares (ρ, ϕ_α) .

Algunas de las propiedades básicas de la función de densidad de probabilidad conjunta son:

$$P(\underline{\psi}) \geq 0 \quad (2.62)$$

$$\int P(\underline{\psi}) d\underline{\psi} = 1 \quad (2.63)$$

Si $Q(\phi)$ es una función de ϕ entonces su valor esperado o medio (denotado por $\langle \rangle$) es:

$$\langle Q(\phi) \rangle = \int Q(\underline{\psi}) P(\underline{\psi}) d\underline{\psi} \quad (2.64)$$

Con esta propiedad se obtienen las cantidades medias de la tasa de reacción o la densidad como:

$$\bar{S}_\alpha(\phi) = \int S_\alpha(\underline{\psi}) P(\underline{\psi}) d\underline{\psi}; \quad \bar{\rho}(\phi) = \int \rho(\underline{\psi}) P(\underline{\psi}) d\underline{\psi} \quad (2.65)$$

Para evaluar la media de la tasa de reacción química y densidad hace falta conocer la forma de la FDP, para lo cual se emplean comúnmente dos alternativas:

- La FDP se calcula a partir de una ecuación de transporte.
- La FDP se calcula a partir de alguno(s) de sus momentos, suponiendo que tiene una forma determinada.

A continuación se presenta el primer método, que es el utilizado en las simulaciones presentadas en esta Tesis. La segunda alternativa se presenta en el capítulo 3.

2.10 Ecuación de transporte para la función densidad de probabilidad conjunta

En este apartado se deduce una ecuación de transporte para la FDP conjunta (de todos los escalares que determinan el estado termoquímico local de la mezcla multicomponente reactiva).

2.10.1 Deducción e interpretación

Una ecuación de transporte para $P(\underline{\psi})$ se puede obtener a partir de la definición de la FDP en términos de la media de funciones delta [116]:

$$P(\underline{\psi}) = \langle P'(\underline{\psi}) \rangle \quad (2.66)$$

donde $\langle \rangle$ indica un el valor medio de un conjunto de realizaciones (ecuaciones (2.41) y (2.42)) y $P'(\underline{\psi})$ es la FDP granular, escrita en términos de la función delta de Dirac como.

$$P'(\underline{\psi}) = \prod_{\alpha=1}^{N+1} \delta(\phi_{\alpha} - \psi_{\alpha}) \quad (2.67)$$

donde $N + 1$ es la dimensión de $\underline{\psi}$ que es igual al número de especies químicas más la entalpía total.

Las derivadas de $P'(\underline{\phi})$ son:

$$\frac{\partial P'(\underline{\psi})}{\partial t} = \frac{\partial P'(\underline{\psi})}{\partial \psi_\alpha} \frac{\partial \phi_\alpha}{\partial t} \quad (2.68)$$

$$\nabla P'(\underline{\psi}) = - \frac{\partial P'(\underline{\psi})}{\partial \psi_\alpha} \nabla \phi_\alpha \quad (2.69)$$

Las ecuaciones instantáneas de conservación de la especie química y de la energía total (ecuaciones (2.6) y (2.31)) se pueden escribir con la forma general:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \phi_\alpha) + \nabla \cdot (\rho u \phi_\alpha) = -\nabla \cdot \bar{J}_{\phi_\alpha} + S_\alpha \quad (2.70)$$

En el caso de que ϕ_α sea la entalpía total, h , $S_h = 0$.

Sustituyendo $\partial \phi_\alpha / \partial t$ y $\nabla \phi_\alpha$ de la ecuación (2.70) en las ecuaciones (2.68) y (2.69), y haciendo el promedio condicionado, se obtiene la ecuación de evolución para la FDP granular:

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial t} [\rho P(\underline{\psi})]}_{(a)} + \underbrace{\nabla \cdot [\rho \langle v / \phi = \underline{\psi} \rangle P(\underline{\psi})]}_{(b)} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} [S_\alpha P(\underline{\psi})]}_{(c)} = \frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} \underbrace{\left[\left\langle \frac{\partial J_{\phi_\alpha}}{\partial x_i} \middle| \phi = \underline{\psi} \right\rangle P(\underline{\psi}) \right]}_{(d)} \quad (2.71)$$

donde (a/b) es el valor esperado de a condicionado por un evento particular b [119].

El promedio de la ecuación (2.71), se condiciona a: $\phi = \underline{\psi}$

Los términos del lado izquierdo de la ecuación (2.71) representan: el transporte en el tiempo de $P(\underline{\psi})$ (a), el transporte en el espacio físico por convección (b), el transporte en el espacio de composición por reacción química (c). El término (d) de la parte derecha representa el transporte en el espacio de composición por flujos difusivos (llamado también término de mezcla molecular). El término de reacción

química, (c), está cerrado y por ello no necesita modelización, lo cual es una de las ventajas del método. La ecuación (2.71), igualmente puede ser deducida a partir de la integración de la FDP conjunta de composición-velocidad, $P(\underline{V}, \underline{\phi})$, sobre el espacio de velocidad [121].

La FDP de Favre puede definirse como:

$$\tilde{P}(\underline{\psi}) = \frac{\rho P(\underline{\psi})}{\langle \rho \rangle} \quad (2.72)$$

El término de transporte convectivo (b) de la ecuación (2.71) se puede reexpresar como:

$$\langle \underline{v} | \underline{\phi} = \underline{\psi} \rangle = \tilde{\underline{v}} + \langle \underline{v}'' | \underline{\phi} = \underline{\psi} \rangle \quad (2.73)$$

Sustituyendo las expresiones (2.72) y (2.73) en la ecuación (2.71) se obtiene la ecuación para la FDP de Favre conjunta (de todas las variables termoquímicas del sistema):

$$\frac{\partial}{\partial t} [\bar{\rho} \tilde{P}(\underline{\psi})] + \nabla \cdot [\bar{\rho} \tilde{\underline{v}} \tilde{P}(\underline{\psi})] = - \underbrace{\frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} [\bar{S}_\alpha \tilde{P}(\underline{\psi})]}_{(I)} - \underbrace{\nabla \cdot [\bar{\rho} \langle \underline{v}'' | \underline{\phi} = \underline{\psi} \rangle \tilde{P}(\underline{\psi})]}_{(II)} - \underbrace{\frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} [\langle \nabla \cdot \underline{J}_{\phi_\alpha} | \underline{\phi} = \underline{\psi} \rangle \tilde{P}(\underline{\psi})]}_{(III)} \quad (2.74)$$

De la ecuación (2.74), los términos (II) y (III) son no cerrados y requieren modelización.

El término de transporte turbulento en el espacio físico, (II), se puede representar con un modelo de difusión turbulenta [116]:

$$- \nabla \cdot [\bar{\rho} \langle \underline{v}'' | \underline{\phi} = \underline{\psi} \rangle \tilde{P}(\underline{\psi})] = \nabla \cdot [\bar{\rho} \Gamma_{T, \phi} \nabla \tilde{P}(\underline{\psi})] \quad (2.75)$$

donde $\Gamma_{T,\phi} = \tilde{\mu}_T / Sc_T$ es el coeficiente de difusión turbulenta del escalar ϕ , y es igual para todos los escalares (especies químicas y entalpía). Los parámetros $\tilde{\mu}_T$ y Sc_T son respectivamente la viscosidad y el número de Schmidt turbulentos (apéndice B).

Haciendo uso de la ley de Fick (si ϕ_α es la fracción másica) y la ley de Fourier (si ϕ_α es la entalpía), el término de transporte de $\tilde{P}(\underline{\psi})$ en el espacio de composición por difusión, (III), se puede representar como [70]:

$$\frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} \left[\left\langle \nabla \cdot \vec{J}_{\phi_\alpha} \mid \underline{\phi} = \underline{\psi} \right\rangle \tilde{P}(\underline{\psi}) \right] = \underbrace{\sum_{\alpha=1}^{N+1} \nabla \left\langle \frac{\mu}{Sc} \nabla \phi_\alpha \frac{\partial \tilde{P}'(\underline{\psi})}{\partial \psi_\alpha} \right\rangle}_{(a)} - \underbrace{\sum_{\alpha=1}^{N+1} \frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} \left\langle \frac{\mu}{Sc} \nabla \phi_\alpha \nabla \tilde{P}'(\underline{\psi}) \right\rangle}_{(b)} \quad (2.76)$$

En flujos con altos números de Reynolds, el término (a) es despreciable comparado con el término (b) [120]. Haciendo uso de la ecuación (2.69), la ecuación (2.76) queda:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} \left[\left\langle \nabla \cdot \vec{J}_{\phi_\alpha} \mid \underline{\phi} = \underline{\psi} \right\rangle \tilde{P}(\underline{\psi}) \right] &= \sum_{\alpha=1}^{N+1} \frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} \left\langle \frac{\mu}{Sc} \nabla \phi_\alpha \left(\nabla \phi_\beta \frac{\partial \tilde{P}'(\underline{\psi})}{\partial \psi_\beta} \right) \right\rangle \\ &= \sum_{\alpha=1}^{N+1} \sum_{\beta=1}^{N+1} \frac{\partial^2}{\partial \psi_\alpha \partial \psi_\beta} \left[\left\langle \frac{\mu}{Sc} \nabla \phi_\alpha \nabla \phi_\beta \mid \underline{\phi} = \underline{\psi} \right\rangle \tilde{P}(\underline{\psi}) \right] \end{aligned} \quad (2.77)$$

El efecto de este término es transportar $\tilde{P}(\underline{\psi})$ en el espacio de composición tal manera que la media, $\langle \phi_\alpha \rangle$, permanezca sin cambio y la varianza, $\langle \phi_\alpha'^2 \rangle$, disminuya [120].

La solución de la ecuación de transporte de la FDP puede requerir tiempos de cálculo considerables dada la alta dimensionalidad de $P(\psi_1, \psi_2, \psi_3, \dots, \psi_{N+1})$. Un método viable para la solución de la ecuación de transporte de la FDP con múltiples dimensiones son el método de Monte Carlo [119], uno de los cuales, que se usará en esta Tesis, será tratado en los siguientes capítulos. Con este método, la FDP conjunta en algún punto del dominio se representa mediante un conjunto de N_p vectores de

composición llamados partículas [119]. En la Figura 2.2 se representa esquemáticamente el conjunto de partículas en un punto \underline{x} del sistema y en un tiempo t . Si la partícula i del conjunto tiene las propiedades: $\underline{\phi}^{(i)} = \phi_1^{(i)}, \phi_2^{(i)}, \phi_3^{(i)}, \dots, \phi_{N+1}^{(i)}$, promedio del conjunto de cualquier función $\bar{Q}(\phi)$ es:

$$\hat{Q}(\phi) = \frac{1}{N_p} \sum_{i=1}^{N_p} Q(\phi^{(i)}) \quad (2.78)$$

donde N_p es el número de partículas del conjunto y el superíndice i indica la partícula.

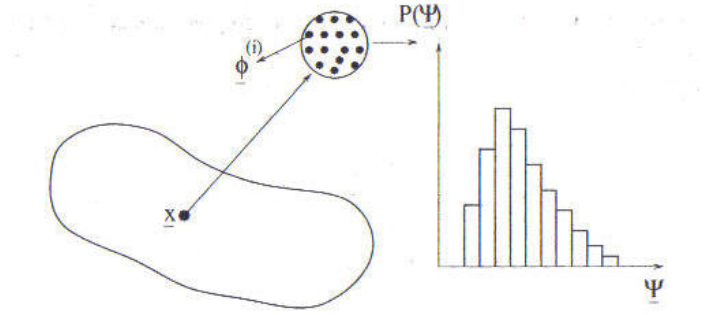


Figura 2.2. Representación discreta de la función densidad de probabilidad en una posición x del dominio y en un tiempo t .

De acuerdo con las ecuaciones (2.41) y (2.42), el promedio del conjunto tenderá a la media, cuando N_p tienda infinito:

$$\langle Q(\phi) \rangle = \lim_{N_p \rightarrow \infty} \hat{Q}(\phi) \quad (2.79)$$

A continuación se presentan algunas aproximaciones del término de mezcla. Teniendo en cuenta la representación discreta de la FDP que se utiliza en la solución, los modelos de mezcla se expresarán también con esta representación.

2.10.2 Modelos de mezcla

El término (III) de la ecuación (2.74), llamado término de mezcla molecular, requiere cierre, pues contiene correlaciones entre la variable y sus gradientes, correlaciones que son desconocidas. Las propuestas de cierre de este término son generalmente formuladas por referencia a flujos inertes, con turbulencia homogénea e isotrópica. Con estas condiciones, la ecuación de la FDP (2.74) queda como [121]:

$$\frac{\partial \tilde{P}(\psi)}{\partial t} = \frac{\partial^2}{\partial \psi^2} \left(\left\langle \frac{\mu}{Sc_\alpha} (\nabla \phi)^2 \middle| \phi = \psi \right\rangle \tilde{P}(\psi) \right) \quad (2.80)$$

Los modelos de mezcla deben cumplir el requisito de dejar sin cambio la media del escalar:

$$\frac{d \langle \phi \rangle}{dt} = 0 \quad (2.81)$$

y predecir una tasa de decaimiento de la varianza, $\langle (\phi - \langle \phi \rangle)^2 \rangle = \langle \phi'^2 \rangle$ de acuerdo con:

$$\frac{d \langle \phi'^2 \rangle}{dt} = C_D \frac{\tilde{\epsilon}}{\tilde{k}} \langle \phi'^2 \rangle \quad (2.82)$$

donde $C_D \approx 2.0$, \tilde{k} es la energía cinética turbulenta y $\tilde{\epsilon}$ es su tasa de disipación (Apéndice B).

Lo que persigue el modelo de mezcla en estas circunstancias es reproducir la evolución de la FDP del escalar, que de acuerdo con resultados numéricos [45] y experimentales [138] evoluciona hacia una distribución Gaussiana. El escalar es una cantidad acotada, por lo que la FDP del escalar no puede tener una forma exactamente Gaussiana [104]. Así, el modelo de mezcla, además de reproducir las condiciones de evolución para la media y la varianza, debe hacer tender la función densidad de probabilidad hacia una forma aproximadamente Gaussiana, por lo que el coeficiente de asimetría (momento normalizado de tercer orden), el coeficiente de

aplastamiento (momento normalizado de cuarto orden), y el coeficiente de supersimetría (momento normalizado de sexto orden) tienen que cumplir:

$$\frac{\langle \phi'^3 \rangle}{\langle \phi'^2 \rangle^{\frac{3}{2}}} \rightarrow 0 \quad (2.83)$$

$$\frac{\langle \phi'^4 \rangle}{\langle \phi'^2 \rangle^2} \rightarrow 3 \quad (2.84)$$

$$\frac{\langle \phi'^6 \rangle}{\langle \phi'^2 \rangle^3} \rightarrow 15 \quad (2.85)$$

Los modelos deben cumplir también condiciones de consistencia y aplicabilidad [121].

Se puede consultar información más detallada sobre los modelos de mezcla en Dopazo [42] y en Pope [118]. A continuación se presentan los modelos de mezcla Linear Mean Square Estimation y Curl modificado utilizados en esta Tesis.

2.10.3 Modelo Linear Mean Square Estimation

El modelo "Linear Mean Square Estimation" (LMSE) es [40]:

$$-\frac{\partial^2}{\partial \psi^2} \left(\left\langle \frac{\mu}{Sc_\alpha} (\nabla \phi)^2 \right| \phi = \psi \right) \tilde{P}(\psi) = \frac{1}{2} \frac{1}{\tau_{mez}} \frac{\partial}{\partial \psi} (\psi - \langle \phi \rangle) \quad (2.86)$$

donde $\tau_{mez} = \tilde{k} / C_D \tilde{\epsilon}$, es el tiempo característico de mezcla. (La frecuencia de mezcla es el inverso de τ_{mez} .)

En términos de partículas de fluido, el modelo LMSE propone que [42]:

$$\phi^{(p)}(t + \Delta t) = -\frac{1}{2} \frac{1}{\tau_{mez}} (\phi^{(p)}(t) - \langle \phi \rangle(t)) \quad (2.87)$$

Así, con el tiempo, una partícula evoluciona hacia la media, $\langle \phi \rangle$, con una tasa proporcional a su distancia con la media. Con este modelo la forma de la FDP de un escalar inerte en turbulencia homogénea e isotrópica permanece sin cambio, y no relaja la forma inicial arbitraria de la FDP hacia una distribución Gaussiana [121].

2.10.4 Modelo de Curl modificado

Los modelos de Curl original [36] y modificado ([59] y [41]) están basados en una analogía entre la mezcla y la coalescencia y rotura de gotas en flujo turbulento bifásico.

En el modelo de Curl modificado, el término de mezcla molecular es:

$$\begin{aligned} & -\frac{\partial^2}{\partial \psi^2} \left(\left\langle \frac{\mu}{Sc_\alpha} \nabla^2 \phi \right| \phi = \psi \right) \tilde{P}(\psi) = \\ & = \frac{1}{\tau_{mez}} \left[\iint [P(\psi') P(\psi'') H(\psi', \psi'' | \psi) d\psi' d\psi''] - P(\psi) \right] \end{aligned} \quad (2.88)$$

donde H es la probabilidad de transición:

$$H(\psi', \psi'' | \phi = \psi) = \frac{1}{|\psi'' - \psi'|} \quad \text{para } \psi' \leq \psi \leq \psi'' \quad \text{o} \quad \psi'' \leq \psi \leq \psi' \quad = 0 \quad \text{para los} \quad (2.89)$$

demás

La probabilidad de transición, H , es la probabilidad de que la interacción de un punto material $\phi = \psi''$ con otro punto $\phi = \psi'$ produzcan $\psi \leq \phi \leq \psi + d\psi$ y $(\psi'' + \psi' - \psi) \leq \phi \leq (\psi'' + \psi' - \psi) + d\psi$.

Para una representación discreta de la FDP del escalar, el modelo propone una selección aleatoria de un par de partículas, $\phi^{(p)}$ y $\phi^{(q)}$ que se mezclan y dan nuevas concentraciones (Dopazo [41] y Janicka et al [59]):

$$\phi^{(p)}(t + \Delta t) = \phi^{(p)}(t) + \frac{1}{2}\xi \left[\phi^{(q)}(t) - \phi^{(p)}(t) \right] \quad (2.90)$$

$$\phi^{(q)}(t + \Delta t) = \phi^{(q)}(t) + \frac{1}{2}\xi \left[\phi^{(p)}(t) - \phi^{(q)}(t) \right] \quad (2.91)$$

donde ξ es una variable aleatoria entre cero y uno, y es la variable que controla la extensión de la mezcla ($0 \leq \xi \leq 1$), con $\xi = 0$ no hay mezcla y con $\xi = 1$ se obtiene el modelo Curl original [36].

En el caso de que x tenga una distribución continua, el número de pares de partículas que se seleccionan para mezclarse es [119]:

$$N_{p,mez} = 6\Delta t \frac{\tilde{\epsilon}}{k} N_p \quad (2.92)$$

Las partículas que no son seleccionadas permanecen sin cambio.

Capítulo 3

MODELOS DE COMBUSTIÓN

3.1 Introducción

En este capítulo se aborda el problema de cierre de la ecuación de transporte de la fracción másica asociado a la reacción química (ecuación (2.50)), así como algunas de las aproximaciones propuestas para describir la reacción química en el flujo turbulento (y que son alternativas a la utilizada en esta Tesis). También se presentan los mecanismos químicos reducidos para la combustión de metano que se utilizan para obtener los resultados mostrados en capítulos posteriores. A continuación, se exponen algunos métodos para representar la química. En la última parte del capítulo se presenta el modelo de radiación con el que se incluye en el cálculo el efecto en las predicciones de las pérdidas de calor por radiación.

En la ecuación de transporte del escalar (2.50) aparece, como último término, el valor medio de la tasa de reacción, \bar{S}_α para la especie α .

La modelación de esta 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 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. Matemáticamente:

$$\bar{S}_\alpha \neq S_\alpha(\bar{h}, \bar{\rho}, \bar{Y}_1, \bar{Y}_2 \dots \bar{Y}_N) \quad (3.1)$$

En la modelación del término de reacción química es útil referirse a dos casos extremos que limitan el rango de situaciones posibles, que son las hipótesis de reacciones 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 la turbulencia (por ejemplo, la escala integral, t_I). El número de Damköhler es la relación entre estos tiempos: $Da_I = t_I / t_q$. La hipótesis de química rápida implica que $t_q \ll t_I$ o $Da_I \gg 1$ y la de química lenta $t_q \gg t_I$, $Da_I \ll 1$.

Si se supone que la cinética química es infinitamente rápida ($Da_I \gg 1$), se puede considerar que la reacción ocurre en una capa delgada a la cual la turbulencia le puede proporcionar movimiento, alabear, estirar o comprimir, pero cuya estructura interna no es afectada por ella. Este tipo de hipótesis ha dado lugar al desarrollo de modelos del tipo "mixed is burned" y "laminar" [14]. Los primeros ignoran totalmente la cinética química, y los segundos consideran que la reacción en esa capa delgada es laminar. Un modelo de 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 los reactantes a nivel molecular, dando lugar a los modelos de combustión de la familia Eddy Break Up (EBU) [91]. Estos modelos son discutidos en más detalle posteriormente en este capítulo.

En el otro extremo del rango de números de Damköhler ($Da_I \ll 1$) se supone que la mezcla tiene lugar de forma mucho más rápida que la reacción química, y que por 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:

$$\bar{S}_\alpha \approx S_\alpha(\bar{h}, \bar{\rho}, \bar{Y}_1, \bar{Y}_2, \bar{Y}_3 \dots \bar{Y}_N) \quad (3.2)$$

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 sea válida ([128] y [106]).

En la formación de contaminantes como el CO y NO, los tiempos característicos de la cinética química y de la escala integral de la turbulencia son aproximadamente del mismo orden. Por lo tanto, ninguna de las aproximaciones anteriores son válidas en

el estudio de estas especies químicas. En estas circunstancias, el uso de una función de densidad de probabilidad (FDP) representa una opción alternativa. El método de la FDP permite evaluar el término químico sin ninguna aproximación si se conoce la FDP conjunta de los escalares que intervienen en el término. Para determinar la FDP local se puede recurrir a dos métodos:

- Resolver la ecuación de transporte para la FDP conjunta (ecuación (2.74)).
- Suponer que la FDP tiene una forma determinada (por ejemplo, Gaussiana), y calcular su forma local a partir de algunos momentos de la FDP (por ejemplo, la media y la varianza) para los cuales se escriben ecuaciones de transporte.

En el capítulo 2 se presentó la primera aproximación. La segunda alternativa se presenta brevemente en este capítulo.

En sistemas con combustión, la cinética química involucra un gran número de reacciones y de especies. Por ejemplo, en la combustión del metano y aire, el mecanismo químico real, tiene unas 279 reacciones y unas 49 especies si se incluye la formación de NO_x . En cálculos con geometría compleja, el uso de un mecanismo de este tamaño es inviable por su gran costo computacional. Este costo está determinado no sólo por la dimensiones del sistema (en términos de especies), sino por que es un sistema inflexible al resolverlo, asociada a la presencia de escalas temporales muy dispares ligadas a las diversas velocidades de reacción. Por este motivo, se requiere un mecanismo de reacción que modele la química con un número mucho menor de especies y reacciones. A este mecanismo se le denomina mecanismo reducido, y su número de especies es del orden de 10. Aún con mecanismos reducidos, la resolución del sistema de ecuaciones diferenciales que proporcionan la evolución del sistema químico durante la simulación del flujo requiere un tiempo de cálculo excesivo. Una estrategia para reducir este tiempo de cálculo es el uso de algún método de representación de la química, que permita precalcular las tasas de reacción química y almacenarlas como función de la composición local. Algunos de estos métodos, usados en esta Tesis, se presentan al final de este capítulo.

3.2 Clasificación de los sistemas con reacción

A efectos de su descripción matemática y modelización, es frecuente clasificar las configuraciones con reacción química de acuerdo al estado de los reactantes cuando entran a la zona donde la reacción tiene lugar: de difusión, si los reactantes están segregados en un flujo de difusión; y de premezcla si los reactantes están mezclados.

Existen también sistemas intermedios entre los premezclados y los no premezclados, en los que los reactantes entran parcialmente premezclados a la zona de reacción, pero uno de ellos es aportado en una cantidad adicional (y necesaria para la reacción completa) con posterioridad.

Como en esta Tesis los sistemas reactivos bajo análisis son premezclados, la configuración premezclada será revisada con un poco de más detalle.

Además del estado de los reactantes, un segundo aspecto que caracteriza un sistema con reacción química es el tipo de flujo: laminar o turbulento.

La combustión turbulenta premezclada idealizada considera dos zonas bien determinadas: la de reactantes y la de productos. Estas regiones están separadas por una zona de reacción, en la cual tiene lugar la transformación de reactantes a productos. En la Figura 3.1 se ilustra el caso de una llama premezclada, que se estabiliza mediante un cuerpo romo que crea una zona de recirculación.

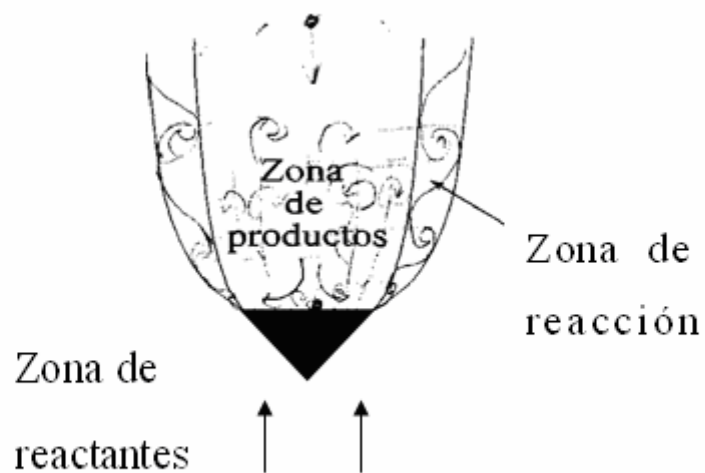


Figura 3.1. Representación esquemática de una llama premezclada.

Los flujos premezclados se pueden clasificar de según el diagrama propuesto por Borghi ([11] y [113]). Este diagrama utiliza dos ejes, cada uno de los cuales representa una relación: la ordenada es la relación entre la intensidad turbulenta y la velocidad de propagación de llama laminar (\sqrt{k}/u_F) y la abcisa es la relación entre la escala integral de turbulencia y el espesor de llama laminar (l_I/l_F). El diagrama de Borghi se presenta en la Figura 3.2.

Para el análisis de las zonas de combustión en este diagrama es conveniente definir tres números adimensionales:

- El número de Damkóhler, Da_I , que se define como la relación del tiempo de la escala integral al tiempo químico:

$$Da_I = \frac{t_I}{t_q} = \frac{u_F l_I}{\sqrt{k} l_F} \quad (3.3)$$

donde u es la velocidad, k es la energía cinética turbulenta, y l y t se refieren a la longitud y tiempo característicos respectivamente. Los subíndices indican: I , la escala integral; F , una característica de llama laminar; y q , la cinética química.

En el diagrama (Figura 3-2), las líneas de Damköhler constante pasan por el punto (1,1) y la bisectriz del diagrama corresponde a $Da_I = 1$, es decir $t_I = t_q$.

- El número de Reynolds turbulento:

$$Re_T = \frac{\sqrt{kl_I}}{\nu} \quad (3.4)$$

Donde ν es la viscosidad molecular. Las líneas de número de Reynolds constante son perpendiculares a la bisectriz del diagrama [11].

- El número de Karlovitz, Ka , que es la relación entre los tiempos característicos químico y de Kolmogorov:

$$K_a = \frac{t_q}{t_{Ko}} = \frac{l_F}{l_{Ko}} = \frac{\mathcal{N}_F}{u_F} \quad \gamma = \frac{1}{t_{Ko}} = \left(\frac{\varepsilon}{\nu} \right)^{1/2} \quad (3.5)$$

donde ε es la tasa de disipación de la energía cinética turbulenta, y el subíndice Ko se refiere a la escala de Kolmogorov.

Las cantidades adimensionales (3.3), (3.4) y (3.5) se relacionan con las tasas \sqrt{k}/u_F y l_I/l_F según las siguientes ecuaciones:

$$\frac{\sqrt{k}}{u_F} = Re_T \left(\frac{l_I}{l_F} \right)^{-1} \quad \frac{\sqrt{k}}{u_f} = Da_I^{-1} \frac{l_I}{l_F} \quad (3.6)$$

$$\frac{\sqrt{k}}{u_F} = Ka^{\frac{2}{3}} \left(\frac{l_I}{l_F} \right)^{\frac{1}{3}} \quad Re_T = (Da_I Ka)^2 \quad (3.7)$$

A las zonas de llama laminar y de mezcla perfecta, les corresponden $Re_T < 1$ y $Da_I < 1$ respectivamente. En la zona de mezcla perfecta, la mezcla, inducida por la turbulencia, tiene lugar de forma mucho más rápida que la reacción. En esta zona, la

tasa de reacción media se calcula frecuentemente (con una buena aproximación) mediante valores medios de las variables.

La zona de "flamelet" (zona de llamas alabeadas) está caracterizada por $Re_T \gg 1$ (régimen turbulento), $Da_t \gg 1$ (química rápida), y $Ka < 1$ (llama suficientemente delgada). La zona reactiva se puede considerar muy estrecha (grosor menor que la escala de Kolmogorov) y no afectada internamente por la turbulencia. Esta zona de reacción puede simularse como una llama laminar afectada en su forma por el transporte turbulento. Esta región del mapa es habitualmente subdividida en dos, por debajo y por encima de la línea $\sqrt{k}/l_f = 1$. Por debajo de esa línea, la velocidad de la llama es mayor que la fluctuación típica de la velocidad, y la zona de reacción es simplemente "ondulada" por la escala de Kolmogorov. Cuando la velocidad de llama es simplemente menor que la fluctuación turbulenta de la velocidad, los torbellinos en las escalas grandes pueden convolucionar la zona de reacción hasta formar zonas múltiplemente conexas. La literatura se refiere a estas dos situaciones como "wrinkled flamelets" y "corrugated flamelets". En $Ka = 1$, que es la frontera con la zona de de reacción distribuida o de llama gruesa, el espesor de la zona de reacción es del orden de la escala de Kolmogorov.

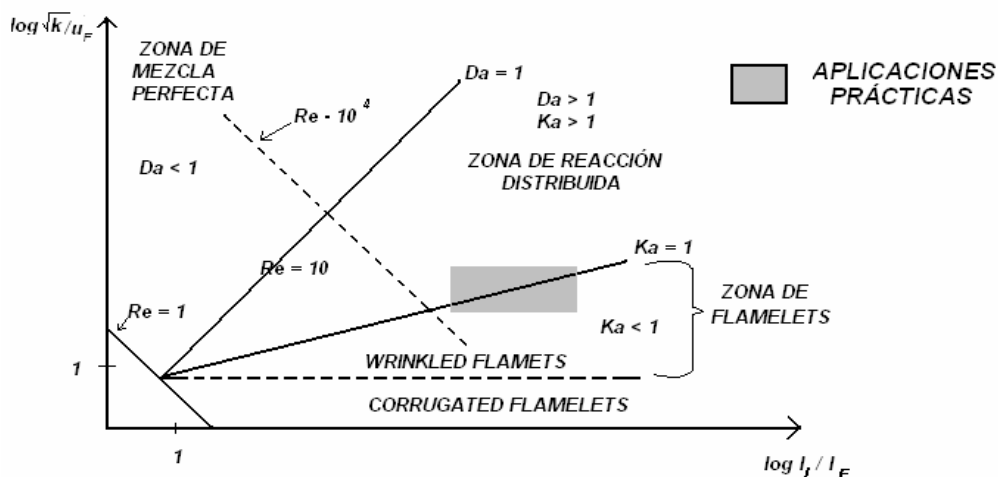


Figura 3.2. Diagrama de Borghi.

La zona con parámetros $Re > 1$, $Da_t > 1$ y $Ka > 1$ es la zona de reacción distribuida. La condición $Ka > 1$ indica que el espesor de la zona de reacción es más grueso que las estructuras más pequeñas de la turbulencia. De la mezcla turbulenta asociada a estos vórtices depende la estructura interna de zona de la reacción [30].

La mayoría de las aplicaciones industriales están en la frontera entre las zonas de "flamelet" laminar y de reacción distribuida [30], en la zona sombreada de la Figura 3.2.

3.3 Modelo Eddy Break Up

En llamas premezcladas con química rápida, el término de reacción química, \bar{S}_α , se modela frecuentemente mediante el modelo llamado de "Eddy Break-Up" (EBU). Este modelo, propuesto inicialmente por Spalding ([130], [132]) y después modificado por varios autores, 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:

$$\bar{S}_c = -C_{EBU} \bar{\rho} \frac{\bar{\epsilon}}{\bar{K}} \sqrt{\bar{Y}_c'^2} \quad (3.8)$$

donde C_{EBU} es una constante y $\bar{Y}_c'^2$ es la varianza de Fravre 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.

Magnussen et. al. [91] proponen, para evitar este problema, sustituir $\sqrt{\bar{Y}_c'^2}$ y por la fracción másica media de la especie con menor presencia:

$$\overline{S_c} = -C_{EBU} \bar{\rho} \frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{K}} \min \left(\tilde{Y}_c, \frac{\tilde{Y}_o}{S}, \frac{\tilde{Y}_p}{1+s} \right) \quad (3.9)$$

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). La presencia de los términos en la función mínimo en esta ecuación asegura que la velocidad de reacción es nula cuando alguno de los reactantes no está en proporciones suficientes para la reacción. La presencia de y_p representa, en reacciones exotérmicas, la existencia de altas temperaturas (a través de la presencia de productos calientes), necesarias para la reacción; es, por tanto, una forma indirecta de limitar la reacción cuando la velocidad cinética es inferior a la velocidad de la mezcla.

Este modelo de combustión es frecuentemente utilizado en aplicaciones prácticas para describir la reacción química en flujos premezclados. Las constantes A y B de la ecuación (3.9), suelen tomar valores de 4 y 2 respectivamente, pero a menudo se ajustan para configuraciones concretas.

La ausencia (o presencia de forma muy simplificada) de efectos cinéticos hacen el uso de este modelo desaconsejable cuando dichos efectos son relevantes (por ejemplo, en formación y destrucción de contaminantes, o en fenómenos de ignición y extinción de llama).

3.4 Función de densidad de probabilidad de forma supuesta

Como se introdujo en el capítulo 2, una alternativa para conocer la FDP local es suponer una forma genérica, y determinar la forma concreta a partir de algunos de sus momentos, tales como la media o la varianza.

La función de densidad de probabilidad debe satisfacer las siguientes condiciones (capítulo 2):

$$P(\phi) \geq 0 \quad 0 \leq \phi \leq 1 \quad (3.10)$$

$$P(\phi) = 0 \quad \phi < 0, \phi > 1 \quad (3.11)$$

donde ϕ es un escalar genérico acotado entre 0 y 1.

Algunas formas para la FDP se muestran en la Figura 3.3. Si la variable tiene un valor constante, entonces la forma de la FDP es una delta de Dirac en ese valor constante (que es por tanto el valor medio) $\tilde{\phi}$, Figura 3.3 (a). Otra posible forma para la FDP es la Gaussiana truncada [85], Figura 3.3 (b), derivada de la Gaussiana pero truncando y agrupando en los extremos (en forma de deltas) la probabilidad de las colas asociadas a intervalos no físicos del escalar (por debajo de cero y por encima de 1, en la figura) [63]:

$$P(\phi) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{\phi-\gamma}{\sigma}\right)^2} [H(\phi) - H(\phi-1)] + B\delta(\phi) + C\delta(1-\phi) \quad (3.12)$$

donde δ es la delta de Dirac y H es la función escalón de Heaviside, y σ y γ son respectivamente la media y la desviación típica de la Gaussiana sin trincar. Los parámetros B y C de la expresión (3.12) son la probabilidad de las colas de la Gaussiana en los tramos $[-\infty, 0]$ y $[1, \infty]$.

$$B = \int_{-\infty}^0 \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{\phi-\gamma}{\sigma}\right)^2} d\phi, \quad C = \int_1^{\infty} \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{\phi-\gamma}{\sigma}\right)^2} d\phi \quad (3.13)$$

Los parámetros σ y γ se pueden calcular a partir de las definiciones de la media, $\tilde{\phi}$, y la varianza, $\overline{\phi'^2}$:

$$\tilde{\phi} = \int_0^1 \phi P(\phi) d\phi, \quad \overline{\phi'^2} = \int_0^1 (\phi - \tilde{\phi})^2 P(\phi) d\phi \quad (3.14)$$

donde la media ($\tilde{\phi}$) y la varianza ($\overline{\phi^{n^2}}$) se obtienen a partir de ecuaciones de transporte.

Las relaciones entre $\tilde{\phi}$ y $\overline{\phi^{n^2}}$ y σ y γ no son explícitas por, lo que hay que iterar para hallar σ y γ a partir de $\tilde{\phi}$ y $\overline{\phi^{n^2}}$.

Otra distribución alternativa es la función beta [60] , figura 3.3 (c):

$$P(\phi) = \frac{\phi^{a-1} (1-\phi)^{b-1}}{\int_0^1 \phi^{a-1} (1-\phi)^{b-1} d\phi} \quad (3.15)$$

donde los exponentes a y b se relacionan con la media y la varianza del escalar mediante las ecuaciones:

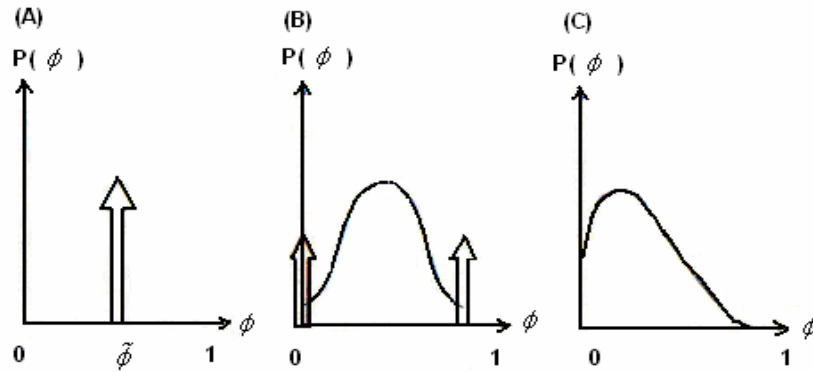


Figura 3.3. Formas para la FDP: (a) Delta de Dirac, (b) Gaussiana truncada y (c) beta mediante

$$a = \tilde{\phi} \left(\frac{\tilde{\phi}(1-\tilde{\phi})}{\overline{\phi^{n^2}}} \right) \quad b = \frac{(1-\tilde{\phi})}{\tilde{\phi}} a \quad (3.16)$$

La forma β tiene la ventaja de estar acotada entre 0 y 1. Además, los exponentes a y b son función explícita de $\tilde{\phi}$ y $\overline{\phi^{n^2}}$.

Esta aproximación de la FDP de forma asumida presenta algunos inconvenientes, entre los que se cuenta la elección de una distribución apropiada para la FDP. Así, se toma frecuentemente una función Gaussiana para la temperatura, y funciones beta para los escalares. Cuando la FDP depende de más de una variable, la determinación de la forma es más compleja y frecuentemente se supone independencia estadística entre las variables para evitar tener que resolver ecuaciones para los momentos cruzados de los diferentes escalares.

3.5 Modelos de flamelet

Los modelos "flamelet" describen al flujo turbulento reactivo como un conjunto de elementos de llama laminar denominados "flamelet" [14]. Estos elementos son transportados por convección y distorsionados por el movimiento turbulento pero conservan su estructura de llama laminar. En los modelos "flamelet" se supone que la reacción tiene lugar en una capa muy estrecha ($Da_t \gg 1$) y la tasa de consumo del combustible (masa de combustible quemado por unidad de tiempo y por unidad de volumen) se expresa como:

$$\bar{S}_c = \omega_F \Sigma \quad \omega_F = \rho_o Y_c U_F \quad (3.17)$$

donde ρ_o es la densidad de los gases frescos, Y_c es la fracción másica del combustible de los gases frescos, Σ es la densidad de superficie de la llama (superficie de la llama por unidad de volumen) y U_F es la velocidad de llama laminar.

Se pueden encontrar estimaciones de U_F en Bray [15], Haworth et al [54] [10]. La densidad de superficie de llama Σ necesita ser modelada, lo cual deriva en varios grados de complejidad en los modelos "flamelet". De forma general, se propone una ecuación de transporte de la forma ([21], [17], [92], [140], [12]):

$$\frac{\partial \Sigma}{\partial t} + \frac{\partial(u_i \Sigma)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\mu_T}{S_{c_T}} \frac{\partial \Sigma}{\partial x_i} \right) + P_\Sigma - D_\Sigma \quad (3.18)$$

donde S_{C_T} es el número de Schmidt turbulento, P_Σ es el término de producción de superficie de la llama que describe el incremento del área de la llama debido a la tasa de deformación local y D_Σ representa la disipación de superficie de la llama debida a la interacción mutua de los elementos adyacentes de la llama. Los términos P_Σ y D_Σ requieren modelización; algunos modelos son presentados por Duclos et al [44].

3.6 Mecanismos reducidos

La combustión de los hidrocarburos aún más sencillos, como el metano, tiene lugar a través de un gran número de reacciones y de especies. En la combustión del metano en aire, el mecanismo real tiene aproximadamente 279 reacciones y 49 especies si se incluye la formación de NO_x [13]. El conjunto de estas reacciones reales y especies que participan en el sistema químico se conoce como mecanismo detallado de la reacción.

La inclusión de un mecanismo detallado en cálculos de geometrías multidimensionales requiere una gran cantidad de memoria y tiempo de cálculo [121]. Estos requerimientos computacionales se deben no sólo a la dimensionalidad del sistema (en términos de especies), sino a la inflexibilidad del sistema, asociada a la presencia de escalas temporales muy dispares ligadas a las diversas velocidades de reacción.

Para disminuir el número de especies (y a la vez reducir la inflexibilidad del sistema), es práctica habitual reducir el sistema químico detallado a un número tratable de especies y ecuaciones. El mecanismo resultante se denomina "mecanismo reducido".

Este mecanismo reducido debe ser suficientemente detallado para predecir de forma correcta los fenómenos de interés al ser aplicado en una simulación. En aplicaciones que requieren simulaciones multidimensionales, las limitaciones de cálculo obligan a que el número máximo de especies que conforman estos mecanismos sea actualmente del orden de 10. Este número es, en general, suficiente para predecir las características fundamentales de la llama, tales como especies mayoritarias,

temperatura o velocidad de liberación de calor; pero puede ser insuficiente para la predicción precisa de especies intermedias, ciertos contaminantes o la ignición o extinción.

Los mecanismos reducidos pueden clasificarse en dos tipos: los sistemáticamente reducidos y los globales.

Los mecanismos sistemáticamente reducidos se obtienen generalmente al aplicar a los llamados mecanismos "skeletal" (mecanismos intermedios de reacción) las hipótesis de estado estacionario para algunas especies y de equilibrio parcial para reacciones particulares [53]. Los mecanismos "skeletal" se deducen a partir de un análisis del sistema completo, que identifica la importancia de las especies y reacciones en el proceso de combustión. Las reacciones que no contribuyen de forma importante en la reacción se eliminan del mecanismo detallado, el resultado es el sistema químico "skeletal". El resultado de esta reducción sistemática no es sólo un sistema de ecuaciones más sencillo (por la eliminación de especies), sino también un sistema menos inflexible, ya que las reacciones más rápidas se han puesto en equilibrio. El análisis y reducción del sistema se hace para determinadas condiciones, por lo que frecuentemente el mecanismo reducido es sólo válido para una zona específica del espacio termoquímico. Fuera de esta zona, los modelos presentan predicciones con baja exactitud.

Los mecanismos globales se desarrollan típicamente a partir de una proposición inicial en cuanto a especies y reacciones que compondrán el modelo químico. Estas especies y reacciones se pueden escoger con base a un conocimiento previo del sistema, a necesidades de modelización (por ejemplo, que esté presente determinada especie), o un análisis sistemático para identificar qué especies y reacciones son eliminadas. Los parámetros cinéticos asociados a las distintas reacciones del mecanismo propuesto son ajustados de forma que el mecanismo reducido reproduzca algunos de los comportamientos fundamentales del sistema original, como por ejemplo la velocidad de propagación del frente de reacción.

Otra aproximación que se ha desarrollado recientemente para simplificar la cinética química es el llamado método de colectores intrínsecos de baja dimensión o

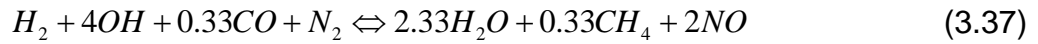
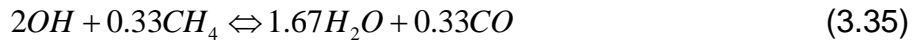
"Intrinsic Low Dimensional Manifolds" (ILDM) ([89] [150]). El ILDM se basa en que las reacciones más rápidas conducen rápidamente los estados de composición a superficies en el espacio de composición. La cinética química se simplifica con la suposición de que estos puntos de composición se moverán (reaccionando) a lo largo de esta superficie de baja dimensión hacia el equilibrio químico, mientras que la reacción química será despreciable fuera de ella. Con esta aproximación no se requiere un conocimiento previo de las especies que se situarán en estado estacionario, o de las reacciones que se supondrán en equilibrio parcial; solamente es necesario suponer la dimensión de este espacio químico que configura el colector o superficie. La superficie se identifica mediante un análisis de autovectores de las ecuaciones que gobiernan la cinética química. Este método ha sido aplicado con resultados aceptables tanto en llamas laminares como turbulentas ([88], [90], [107]).

A continuación se presentan los mecanismos reducidos de cinco, siete y nueve pasos de reacción para el metano.

3.7 Mecanismos químicos para el metano

3.7.1 Mecanismo sistemáticamente reducido de cinco paso

Recientemente, Mallampalli et al [93] han desarrollado un mecanismo químico reducido para modelar la combustión en llamas de premezcla pobre que incluye la formación de NO. El mecanismo es de cinco pasos de reacción y nueve especies. Este modelo químico es deducido del mecanismo completo GRI 2.11 [13], que consta de 277 reacciones elementales y 49 especies. El mecanismo se reduce sistemáticamente mediante el método de reducción CARM (Computer-Assisted Reduction Mechanism) de Chen [22]. El mecanismo ha sido validado por sus autores en reactores perfectamente mezclados (PSR) [52] y en llamas premezcladas laminares para presiones de 1 a 30 atm. y relaciones de equivalencia de 0.4 a 1.0. Como el modelo presentaba problemas de solución a bajas temperaturas [20], el mecanismo reducido ha sido actualizado. El nuevo mecanismo de cinco pasos de reacción consiste en cuatro pasos para la combustión y un paso para la formación de NO [94]:



El paso de producción del NO incorpora, según sus autores, las tres rutas de formación relevantes en llamas de metano: Zeldovich, Prompt y N_2O . Estas rutas están descritas en más detalle en el apéndice C.

Por ser el mecanismo sistemáticamente reducido, las velocidades de reacción de los pasos (3.34), (3.35), (3.36), (3.37) y (3.38) son función de las tasas de las reacciones del mecanismo GRI-2.11. El subíndice en las tasas que siguen indica el número de reacción del mecanismo GRI-2.11 [13]:

$$\begin{aligned} \omega_{R1} = & +\omega_1 - \omega_{31} - \omega_{37} - \omega_{43} - \omega_{45} - \omega_{47} + \omega_{84} - \omega_{116} - \omega_{118} - \omega_{119} - \omega_{121} - \omega_{124} - \omega_{134} \\ & - \omega_{142} - \omega_{143} - \omega_{153} - \omega_{154} - \omega_{169} - \omega_{171} - \omega_{174} - \omega_{177} + \omega_{179} + \omega_{182} + \omega_{185} - \omega_{187} \\ & - \omega_{192} - \omega_{193} - \omega_{218} - \omega_{224} - \omega_{257} \end{aligned} \quad (3.39)$$

$$\begin{aligned} \omega_{R2} = & +\omega_2 + \omega_{11} - \omega_{14} + \omega_{15} + \omega_{18} + \omega_{19} + \omega_{22} + \omega_{23} + \omega_{25} + \omega_{27} + \omega_{32} \\ & + \omega_{33} + \omega_{34} + \omega_{35} + \omega_{36} + \omega_{37} + \omega_{38} + \omega_{39} + \omega_{40} + \omega_{41} + \omega_{42} + \omega_{43} + \omega_{45} + \omega_{47} \\ & + \omega_{52} + \omega_{55} + \omega_{56} + \omega_{57} + \omega_{61} + \omega_{66} + \omega_{67} + \omega_{68} + \omega_{70} + \omega_{73} + \omega_{74} + \omega_{77} + \omega_{78} \\ & - \omega_{91} - \omega_{93} + \omega_{95} + \omega_{96} + \omega_{97} - \omega_{98} + \omega_{100} + \omega_{103} + \omega_{104} - \omega_{105} + \omega_{108} + \omega_{111} \\ & + \omega_{112} - \omega_{117} + \omega_{118} + \omega_{120} + \omega_{121} + \omega_{124} - \omega_{126} - \omega_{127} + \omega_{131} + \omega_{134} - \omega_{135} - \omega_{136} \\ & - \omega_{137} + \omega_{143} - \omega_{144} - \omega_{145} - \omega_{147} + \omega_{153} + \omega_{154} - \omega_{155} - \omega_{158} - \omega_{164} - \omega_{165} + \omega_{169} - \omega_{170} \\ & + \omega_{171} + \omega_{174} + \omega_{176} + \omega_{177} - \omega_{179} - \omega_{180} - \omega_{182} - \omega_{183} + \omega_{187} - \omega_{188} - \omega_{189} - \omega_{190} \\ & - \omega_{191} - \omega_{195} + \omega_{198} + \omega_{200} + \omega_{201} + \omega_{204} + \omega_{205} + \omega_{206} + \omega_{207} + \omega_{208} + \omega_{210} \\ & - \omega_{215} - \omega_{217} + \omega_{218} - \omega_{219} - \omega_{220} - 2\omega_{222} - \omega_{224} - 2\omega_{225} - \omega_{227} + \omega_{229} + \omega_{230} \\ & + \omega_{231} + 2\omega_{235} - \omega_{238} + \omega_{242} + \omega_{245} + \omega_{253} + 2\omega_{254} + \omega_{257} + \omega_{259} + \omega_{262} \\ & + \omega_{265} - \omega_{266} + \omega_{272} + 2\omega_{273} + \omega_{274} \end{aligned} \quad (3.40)$$

$$\begin{aligned}
\omega_{R3} = & +\omega_3 - \omega_8 - \omega_9 - 2\omega_{10} + \omega_{13} + \omega_{14} + \omega_{15} - \omega_{23} + \omega_{24} - \omega_{30} + \omega_{32} - \omega_{38} - \omega_{39} \\
& - \omega_{40} - \omega_{41} - \omega_{44} - \omega_{46} + 2\omega_{48} + \omega_{49} - \omega_{50} - \omega_{52} - \omega_{53} - \omega_{59} + 2\omega_{60} + 2\omega_{61} - \omega_{64} \\
& + 2\omega_{65} + 2\omega_{66} - \omega_{67} - \omega_{68} - \omega_{70} - \omega_{73} - \omega_{74} - \omega_{77} - \omega_{79} - \omega_{82} + \omega_{83} + \omega_{89} + \omega_{90} \\
& - \omega_{91} + \omega_{92} - 2\omega_{93} - 2\omega_{94} - \omega_{95} + \omega_{99} + \omega_{100} + \omega_{110} - \omega_{116} - 2\omega_{118} + \omega_{120} + \omega_{121} + 2\omega_{122} \\
& + \omega_{123} - \omega_{124} - 2\omega_{126} + \omega_{127} - \omega_{128} - \omega_{129} - \omega_{131} + 2\omega_{132} + 2\omega_{135} + \omega_{136} + \omega_{138} + \omega_{139} \\
& - \omega_{141} + \omega_{144} - 2\omega_{145} - \omega_{146} - \omega_{147} + \omega_{149} - \omega_{150} - 2\omega_{151} - 2\omega_{153} - 2\omega_{154} - 2\omega_{156} - 2\omega_{157} \\
& + \omega_{158} + \omega_{159} + \omega_{164} + \omega_{165} + \omega_{166} - \omega_{169} + \omega_{170} - 2\omega_{171} + \omega_{173} + \omega_{176} - \omega_{180} - \omega_{188} \\
& - 2\omega_{189} - \omega_{191} - \omega_{193} - \omega_{195} + \omega_{198} + \omega_{199} + \omega_{201} - \omega_{207} + \omega_{210} - \omega_{211} - 2\omega_{212} - \omega_{213} \\
& - 2\omega_{214} + \omega_{216} + \omega_{218} + \omega_{219} - \omega_{220} - \omega_{222} - \omega_{224} - \omega_{225} + \omega_{229} + \omega_{230} + \omega_{232} \\
& + \omega_{233} - \omega_{238} - \omega_{239} + \omega_{240} + \omega_{242} + \omega_{243} + \omega_{245} - \omega_{246} + 2\omega_{247} + \omega_{248} + \omega_{249} + \omega_{250} \\
& + \omega_{255} - \omega_{263} - \omega_{264} - \omega_{266} + \omega_{268} - \omega_{274} - \omega_{275}
\end{aligned} \tag{3.41}$$

$$\begin{aligned}
\omega_{R4} = & +\omega_7 + \omega_9 - \omega_{13} - \omega_{14} + \omega_{15} + \omega_{25} + \omega_{32} + \omega_{48} - \omega_{53} - \omega_{54} + \omega_{57} - \omega_{89} + \omega_{90} - \omega_{99} \\
& + \omega_{100} + \omega_{120} - \omega_{121} - \omega_{122} - \omega_{123} + \omega_{124} + \omega_{131} + \omega_{134} - \omega_{158} + \omega_{159} - \omega_{164} - \omega_{165} - \omega_{166} \\
& + \omega_{169} + \omega_{171} - \omega_{176} + \omega_{180} + \omega_{188} + \omega_{189} + \omega_{191} + \omega_{193} - \omega_{198} - \omega_{199} - \omega_{200} - \omega_{201} - \omega_{210} \\
& + \omega_{211} + \omega_{212} + \omega_{213} + \omega_{214} - \omega_{216} - \omega_{218} + \omega_{220} + \omega_{222} + \omega_{224} + \omega_{225} - \omega_{229} - \omega_{230} \\
& - \omega_{232} - \omega_{233} - \omega_{235} + \omega_{238} + \omega_{239} - \omega_{242} - \omega_{243} - \omega_{245} + \omega_{246} - \omega_{247} - \omega_{250} - \omega_{254} - \omega_{255} \\
& - \omega_{259} + \omega_{263} + \omega_{266} - \omega_{268} - \omega_{273}
\end{aligned} \tag{3.42}$$

$$\omega_{R5} = +\omega_{12} + \omega_{14} + \omega_{30} + \omega_{31} + \omega_{98} + \omega_{119} - \omega_{131} - \omega_{151} + \omega_{224} + \omega_{227} + \omega_{260} + \omega_{266} \tag{3.43}$$

El mecanismo reducido supone que las siguientes especies están en estado estacionario:

$H, O, HO_2, H_2O_2, C, CH, CH_2, CH_2S, CH_3, HCO, CH_2O, CH_2OH, CH_3O, CH_3OH, C_2H, C_2H_2, C_2H_3, C_2H_4, C_2H_5, C_2H_6, HCCO, CH_2CO, HCCOH, N, NH, NH_2, NH_3, NNH, NO_2, N_2O, HNO, CN, HCN, H_2CN, HCNN, HCNO, HOCN, HNCO$ y NCO .

3.7.2 Mecanismo sistemáticamente reducido de siete pasos

Este mecanismo, al igual que el mecanismo de 5 pasos de reacción, es deducido del mecanismo completo GRI 2.11 [13] con el método de reducción CARM (Computer-Assisted Reduction Mechanism) de Chen [22].

Los elementos que participan en esta reacción para nuestro análisis son: O, H, C y N. El número de especies químicas que participan son 11 y son: H_2 , H, O_2 , OH, H_2O , CH_4 , CO, CO_2 , NO, N_2O y N_2 .

Las reacciones que se llevan a cabo en este mecanismo de 7 pasos son:

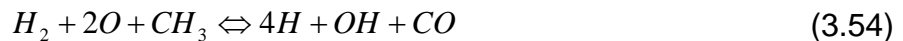


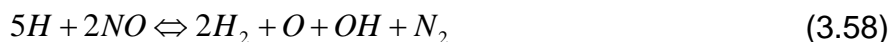
3.7.3 Mecanismo sistemáticamente reducido de nueve pasos

Este mecanismo es derivado del mismo mecanismo completo que los mecanismos anteriores y en su derivación se utiliza el mismo método de reducción.

En este mecanismo de nueve pasos de reacción el número de especies químicas es: H_2 , H, O, O_2 , OH, H_2O , CH_3 , CH_4 , CO, CO_2 , NO, N_2O y N_2 .

Las reacciones que se llevan a cabo en este mecanismo son:





3.8 Método de representación de la química

La evolución del sistema termoquímico está determinada localmente por la solución del sistema de ecuaciones diferenciales:

$$\frac{d}{dt}(\phi_\alpha) = S_\alpha, \quad \alpha = 1, \dots, N \quad (3.60)$$

donde el lado de la derecha son las tasas de reacción presentadas (en su versión molar) en la sección anterior.

La integración de la ecuación anterior durante la simulación del flujo requiere un tiempo de cálculo excesivo, incluso para los sistemas reducidos empleados en esta Tesis. Esto es debido a que la resolución de sistemas Inflexibles, como el representado por la ecuación (3.60), requiere utilizar pasos temporales pequeños y métodos de integración especiales [57]. Algunas de las rutinas numéricas para resolver estos sistemas inflexibles son VODE [16] o LSODE [57].

Una estrategia para reducir el tiempo de cálculo del sistema químico es el uso de algún método alternativo de representación de la cinética química. Estos métodos generalmente calculan y almacenan las tasas de reacción como función de la composición de forma previa a la simulación del flujo. A continuación se presentan los métodos de representación de la química que son usados en la Tesis. Estos son: la tabla de interpolación, las redes neuronales artificiales y las tabulación in-situ estructurada.

3.8.1 Método de la tabla de interpolación

El método de la tabla de interpolación consiste en construir, de forma previa a la simulación del flujo, una tabla que contenga los cambios de las especies químicas (y

además la temperatura y la densidad en su caso) como función de la composición y para un intervalo temporal dado. En esta tabla se almacenan los resultados obtenidos al integrar previamente a la simulación las ecuaciones del sistema químico para puntos de un mallado que cubre el espacio de composición al que se va acceder durante la simulación. Así, durante la simulación del flujo, los cambios en las especies serán obtenidos de la tabla por interpolación multidimensional [61].

Para evitar almacenar regiones del espacio de composición a las que no se accederá durante la simulación, generalmente se limita el dominio almacenado para cada escalár. El dominio se limita con las ecuaciones de conservación de los átomos, y con la condición que las especies no tienen valores negativos ([25] y [70]).

La construcción de la tabla química se ilustrará aquí con el modelo químico para la combustión de metano de Jones y Lindstedt [67] (sección 6). Este mecanismo reducido es de cuatro pasos de reacción y tiene las siguientes especies: $CH_4, CO, CO_2, H_2, H_2O, O_2$ y N_2 . Suponiendo que no hay pérdidas de calor por radiación, el estado termoquímico de la mezcla se puede determinar con tres escalares (que son los grados de libertad correspondientes a 7 especies menos 4 relaciones de conservación de átomos: C, H, O y N). A estos escalares se les denomina escalares independientes.

Para limitar el dominio almacenado de estos escalares independientes se hace uso de las ecuaciones de conservación de átomos, que para el sistema en cuestión son: C, H, O y N. Estas ecuaciones son las siguientes (η_α es el número de moles de especie α por unidad de masa de mezcla, o molalidad, W_α es el peso molecular de la especie α y ψ es la relación entre los átomos de N y O en el aire, 0.79/0.21):

Átomos de C

$$n_{CH_4} + n_{CO_2} + n_{CO} = \frac{f}{W_{CH_4}} \quad (3.61)$$

Átomos de H

$$n_{H_2} + 2n_{H_2O} + 4n_{CH_4} = \frac{4f}{W_{CH_4}} \quad (3.62)$$

Átomos de O

$$2n_{O_2} + n_{H_2O} + n_{CO} + 2n_{CO_2} = \frac{2\psi(1-f)}{W_{N_2} + \psi W_{O_2}} \quad (3.63)$$

Átomos de N

$$n_{N_2} = \frac{(1-f)}{W_{N_2} + \psi W_{O_2}} \quad (3.64)$$

El número total de moles por unidad de masa de mezcla es:

$$n_T = n_{H_2} + n_{O_2} + n_{H_2O} + n_{CH_4} + n_{CO} + n_{CO_2} + n_{N_2} \quad (3.65)$$

En la deducción de las ecuaciones (3.61), (3.62), (3.63) y (3.64) se ha supuesto que las especies tienen igual difusividad y se incluye (adicionalmente) un escalar conservado denominado fracción de mezcla, f , introducido en el capítulo 2.

Bajo la hipótesis de igual difusividad de los componentes de la mezcla y del calor, y en ausencia de transferencia de calor por radiación entre el dominio y el exterior, el estado termoquímico de la mezcla queda determinado por cuatro escalares (7 especies más la fracción de mezcla menos 4 relaciones de conservación de átomos).

Los cuatro escalares utilizados en este trabajo son: f, n_{CH_4}, n_{CO} y n_T .

Los límites del espacio accedido para estos cuatro escalares son los siguientes:

- La fracción de mezcla, f , toma, en el caso más general, valores entre cero (en la corriente de aire) y uno (en la corriente de combustible). En llamas parcialmente premezcladas, el rango de valores de f puede ser más reducido. Cuando la llama es totalmente premezclada, como en la llama de metano que se simula

en esta Tesis, la fracción de mezcla es constante, y las tablas químicas se generan para este único valor de f .

- Límites para n_{CH_4} dado un valor de f .

De la ecuación (3.61), n_{CH_4} es máximo cuando $n_{CO_2} = n_{CO} = 0$:

$$n_{CH_4}^{\max} = \frac{f}{W_{CH_4}} \quad (3.66)$$

La mínima cantidad de n_{CH_4} depende de la cantidad de oxígeno disponible; como la llama es pobre se tiene suficiente cantidad de oxígeno para consumir todos los átomos de carbono, y por lo tanto, el mínimo para n_{CH_4} es:

$$n_{CH_4}^{\min} = 0 \quad (3.67)$$

- Límites para n_{CO} dados unos valores de f y n_{CH_4}

De la ecuación (3.61), el máximo para n_{CO} se obtiene si cuando $n_{CO_2} = 0$:

$$n_{CO}^{\max} = \frac{f}{W_{CH_4}} - n_{CH_4} \quad (3.68)$$

Como hay suficiente oxígeno para consumir todo el carbono disponible para formar CO_2 el mínimo de n_{CO} es cero:

$$n_{CO}^{\min} = 0 \quad (3.69)$$

- Límites para n_T dados valores para f , n_{CH_4} y n_{CO} .

Haciendo uso de las ecuaciones (3.61) y (3.62) y con la determinación de los límites máximo y mínimo para n_{O_2} , se obtienen los límites para n_T [25]:

$$n_T^{\max} = \frac{(1+\psi)(1-f)}{W_{N_2} + \psi W_{O_2}} + 2 \left(\frac{f}{W_{CH_4}} + \frac{n_{CO}}{4} \right) - n_{CH_4} \quad (3.70)$$

$$n_T^{\min} = \frac{(1-f)}{W_{N_2} + \psi W_{O_2}} + \frac{3f}{W_{CH_4}} - 2n_{CH_4} + \max \left[\frac{\psi(1-f)}{W_{N_2} + \psi W_{O_2}} - \frac{2f}{W_{CH_4}} + 2n_{CH_4} + \frac{1}{2}n_{CO}, 0 \right] \quad (3.71)$$

Las tablas termoquímicas se generan para valores de los escalares f , n_{CH_4} , n_{CO} , y n_T entre los límites superior e inferior de cada uno. Esta "cascada de cotas" se ilustra esquemáticamente en la Figura 3.4. La discretización del espacio termoquímico puede ser regular o de anchura variable. En este último caso, se generan intervalos más reducidos en aquellas zonas del espacio en las que se prevé que la reacción química será más importante, como por ejemplo en el entorno de la fracción de mezcla estequiométrica.

Las tablas de velocidad de reacción se generan para varios intervalos temporales (típicamente dos o tres), interpolándose para tiempos intermedios. Adicionalmente se generan dos tablas más que proporcionan la densidad y la temperatura como función del estado termoquímico.

Este método de representación de la reacción química es eficiente computacionalmente pero presenta algunos inconvenientes, los más relevantes de los cuales son:

- Número de escalares. El tamaño de la tabla se incrementa exponencialmente con el número de escalares [18], haciendo el método prácticamente inviable para más de 6 escalares.
- Tamaño del intervalo de discretización. La precisión del método depende de la anchura de la malla (o tamaño del intervalo con el que se discretiza el espacio termoquímico), lo cual requiere una elección cuidadosa. Una malla muy fina puede requerir excesiva memoria.
- Dominio de los escalares. El rango del espacio de composición de la tabla, delimitado por consideraciones de conservación de átomos, como se

- muestra más arriba, es mayor que el espacio realmente accedido durante la simulación, por lo que el uso de memoria no es eficiente.

3.8.2 Redes neuronales artificiales

En los últimos años se ha desarrollado en el Área de Mecánica de Fluidos de la Universidad de Zaragoza un método de representación de la cinética química mediante redes neuronales artificiales (RNA). Este método de representación de la química presenta la ventaja de requerir memorias y tiempos de cálculo moderados. En la representación del sistema químico de cuatro pasos para el metano de Peters [112], Blasco et al [9] muestran la ventaja en memoria RAM y tiempo de cálculo de la RNA sobre los métodos de integración directa y de la tabla de interpolación respectivamente.

La estructura de las redes neuronales artificiales es análoga al del sistema nervioso animal [55]. Las RNA están formadas por un conjunto de elementos denominados "neuronas". Las neuronas están agrupadas por capas interconectadas, que típicamente son capas de entrada, salida y una o varias capas ocultas. La neurona de una capa recibe información de las neuronas de la capa anterior, la procesa y transmite el resultado a neuronas de las capas siguientes. Comúnmente la operación que realizan las neuronas es:

$$y_i = \sum_{j=1}^n w_{ij} x_j \frac{1}{1 - e^{-x_j}} \quad (3.72)$$

donde y_i es la información que sale de la neurona i , x_j es la información de la neurona de la capa anterior y w_{ij} es un parámetro denominado "peso sináptico".

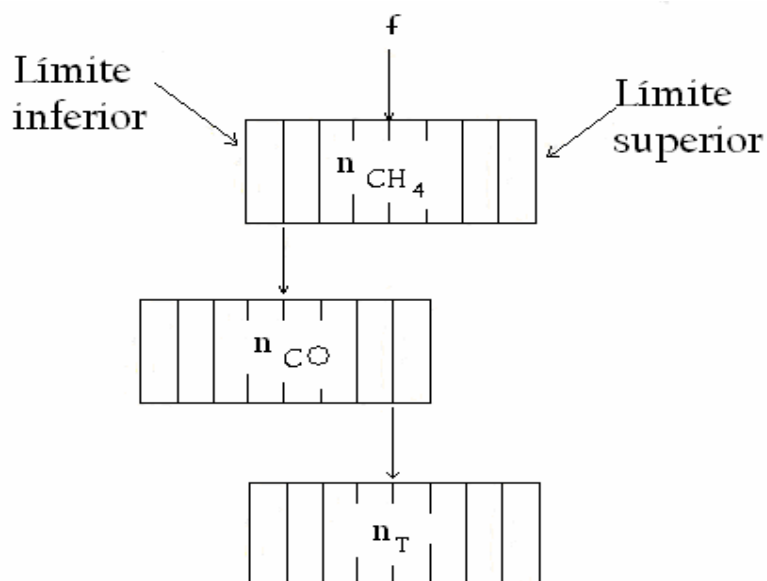


Figura 3.4 Estructura esquemática de la tabla que representa el sistema químico de cuatro pasos de reacción del metano.

En la figura 3.5 se ilustra la estructura de una RNA. En la capa de entrada se introducen un conjunto de valores, en este caso concentraciones iniciales de las variables termoquímicas. Estos datos son procesados por las capas ocultas y de salida, que son las que proporcionan el resultado del procesamiento de la RNA, esto es concentraciones en un tiempo posterior, $t + \Delta t$.

Los pesos w_{ij} de ecuación (3.72) se ajustan a través de un proceso iterativo llamado fase de entrenamiento, en la cual un conjunto de ejemplos son presentados a la RNA. Después de esta fase de aprendizaje, la RNA puede ser usada para simular un proceso deseado, en este caso la evolución del sistema químico.

En la simulación de flujos reactivos, la RNA ha sido aplicada satisfactoriamente por Christo et al ([29] y [28]) y Blasco ([8] y [9]).

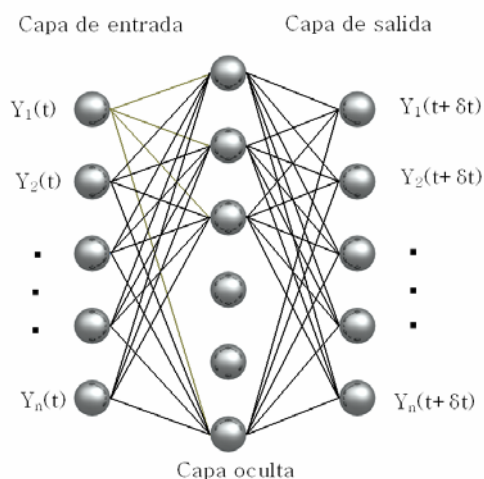


Figura 3.5 Estructura esquemática de las redes neuronales artificiales.

Detalles del uso de las RNA para la representación de la química se puede consultar en Blasco [8].

3.9 Tabulación estructurada in-situ

A diferencia de los dos métodos de representación de la química anteriores, que son calculados de forma previa a la simulación, el método de tabulación "in-situ" estructurada (TISE) [8] calcula y almacena la termoquímica "en línea" durante la simulación del flujo.

El método TISE es una variante del método de tabulación in-situ adaptativo [122] y del método de la tabla de interpolación. En el método TISE, se construye una tabla de incrementos de la reacción durante la simulación. El tamaño de la tabla se incrementa de acuerdo al espacio de composición al que se accede durante la simulación.

El espacio de composición se discretiza en celdas, cuyos vértices están definidos por los componentes de un estado termoquímico arbitrario. En el caso de que se requiera conocer el incremento de la reacción en alguna parte del dominio por vez primera, se integra el sistema de ecuaciones químico (3.60) y se almacena su valor en la tabla de composición. Cuando en la simulación se requiera posteriormente de nuevo el valor de las tasas de reacción para esa composición, en lugar de integrar el

sistema de ecuaciones de la química, se accede a la tabla. En la figura 3.6 se ilustra esquemáticamente la representación del dominio mediante celdas, en las que se almacena un valor accedido durante el cálculo.

Durante la simulación, los cambios se obtienen directamente de la tabla, sin interpolación, por lo que esta aproximación puede introducir cierto error en el cálculo de los incrementos químicos. Para minimizar los errores se debe usar una anchura de celda suficientemente pequeña. Se puede determinar una anchura óptima a partir de comparaciones con la integración directa del sistema de ecuaciones de la química, por ejemplo en el reactor parcialmente mezclado (PaSR).

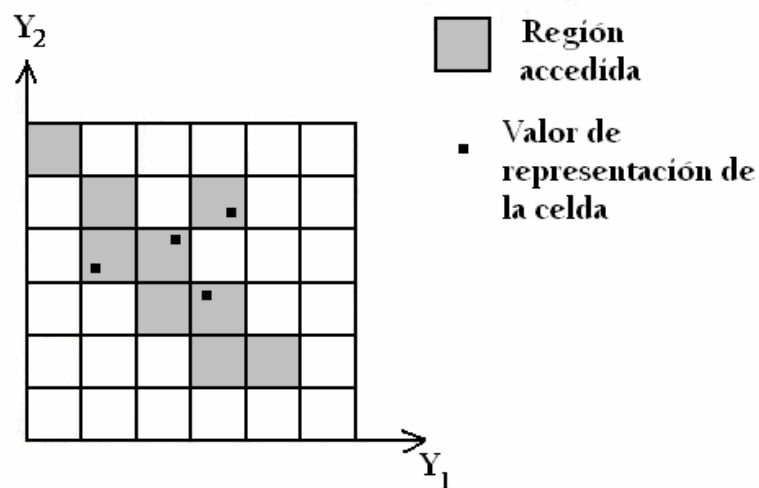


Figura 3.6. Representación esquemática de la discretización (bidimensional) del espacio de composición.

Este método tiene la ventaja de que no se necesita conocer "a-priori" el dominio de definición de los escalares, y de almacenar solamente el espacio de composición que se necesita durante el cálculo.

3.10 Modelo de radiación

Las temperaturas alcanzadas en sistemas de combustión premezclada pobre son considerablemente más bajas que las alcanzadas en sistemas de combustión

convencionales. Sin embargo, 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, particularmente en la formación de contaminantes como el CO y NO, se incluye en la simulación un modelo sencillo de radiación, que se describe en esta sección.

La ecuación integro-diferencial de transporte de la energía radiante establece que ésta cambia por emisión, absorción y dispersión del medio [145]. Para la resolución de esta ecuación de transporte, que además de ser integro-diferencial puede tener dependencias angulares y espectrales, se han desarrollado varios métodos, como los métodos estocásticos de Monte Carlo, los métodos de transferencia discreta, los de ordenadas discretas y los de flujos [39].

Para acotar el efecto de la radiación en las llamas simuladas sin incurrir en costes computacionales excesivos, se considerará la hipótesis de llama ópticamente delgada (absorción del gas despreciable) y se desprecia el efecto de la dispersión. Por lo tanto, el flujo de calor por radiación se puede escribir como ([26], [127]):

$$q_{rad} = -4\sigma K_p (T^4 - T_\infty^4) \quad (3.73)$$

donde σ es la constante de Stefan-Boltzmann ($5.67(10^{-8}) Wm^{-2}K^{-4}$) y K_p es el coeficiente de absorción medio de Planck. El coeficiente K_p es [26]:

$$K_p = X_{CO} K_{p,CO_2}(T) + X_{H_2O} K_{p,H_2O}(T) \quad (3.74)$$

donde K_{p,CO_2} y K_{p,H_2O} son los coeficientes de absorción del CO_2 y H_2O :

$$K_{p,CO_2} = 10.0^a \quad (3.75)$$

$$K_{p,H_2O} = 10.0^b \quad (3.76)$$

Los exponentes a y b de las ecuaciones (3.75) y (3.76) son:

$$a = 2.689 - 0.2986(10^{-2})T + 0.1080(10^{-5})T^2 - 0.1317(10^{-9})T^3 \quad (3.77)$$

y

$$b = -1.262396(10^{-3})\left(\frac{T}{300}\right)^4 + 3.020593(10^{-2})\left(\frac{T}{300}\right)^3 - 2.532505(10^{-1})\left(\frac{T}{300}\right)^2 + 6.776739(10^1)\left(\frac{T}{300}\right) + 1.032984 \quad (3.78)$$

Cuando las pérdidas de calor por radiación se consideran en la simulación, el sistema termoquímico tiene un grado de libertad más (puesto que la entalpía total no está entonces linealmente relacionada con la fracción de mezcla) y por tanto se requiere un escalar adicional para definir el estado termoquímico. En esta Tesis el escalar que se usa es la temperatura.

Capítulo 4

MÉTODO DE SOLUCIÓN

4.1 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 2.

La ecuación de transporte de la función de densidad de probabilidad (FDP) merece atención especial, pues presenta para su solución el inconveniente adicional de su alta dimensionalidad. Las variables independientes de la FDP son, además del espacio y del tiempo, los escalares (típicamente concentraciones) que determinan el estado termoquímico local de la mezcla. En principio, esta ecuación de dimensionalidad superior se puede resolver mediante las conocidas técnicas de volúmenes, diferencias o elementos finitos. Sin embargo, el tiempo de cálculo asociado a estas técnicas se incrementa exponencialmente con el número de variables independientes. Los métodos estocásticos de Monte Carlo son una alternativa viable, ya que el tiempo de cálculo se incrementa sólo linealmente con el número de variables independientes [117].

En esta Tesis, se utiliza un método de Monte Carlo para resolver la ecuación de transporte de la FDP; la solución se acopla a un método de volúmenes finitos, que resuelve las ecuaciones promediadas de continuidad, cantidad de movimiento y estadísticas de la turbulencia. Este sistema híbrido, consta así, de dos módulos, relacionados pero también diferenciados: uno que proporciona la aerodinámica del flujo y otro que resuelve la termoquímica.

Este capítulo comienza con la descripción del método de volúmenes finitos, que se utiliza para resolver las ecuaciones que caracterizan la aerodinámica del flujo medio. Después se presenta el método de Monte Carlo, con el cual se resuelve la ecuación de transporte de la FDP. Finalmente, se trata brevemente el acoplamiento entre ambos módulos.

4.2 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 $\tilde{\phi}$:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{\phi}) + \nabla \cdot (\bar{\rho}\tilde{u}_i\tilde{\phi}) - \nabla \cdot (\Gamma_{\phi}\nabla\tilde{\phi}) = \bar{S}_{\phi} \quad (4.1)$$

donde Γ_{ϕ} es el coeficiente de difusión y \bar{S}_{ϕ} es el término fuente. Los términos del lado derecho de la ecuación (4.1) 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 (4.1) se puede discretizar con el método de volúmenes finitos. Con este método, el dominio se divide en pequeños volúmenes de control (figura 4.1), asociando a cada uno de ellos con 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:

$$a_P\tilde{\phi}_P = \sum_{i,I=E,W,N,S,H,L} a_i\tilde{\phi}_I + a_T\tilde{\phi}_T + B \quad (4.2)$$

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 (4.2) puede consultarse en numerosos textos de fluidodinámica computacional, por ejemplo en Patankar [110], Ferziger y Peric [48]. A continuación, se proporciona un somero resumen, con el objetivo, fundamental, de servir de base para introducir más adelante la forma en la que el método de Monte Carlo se integra al cálculo.

En el caso de una malla cartesiana, decalada (“staggered”) y uniforme (celdas de iguales dimensiones espaciales), un volumen de control bidimensional (por sencillez) es como el que se muestra en la figura 4.2. (el espesor de la celda en dirección z puede considerarse la unidad.) En una malla decalada, las variables escalares como por ejemplo, la presión, entalpía o las fracciones másicas, 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 4.2 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 .

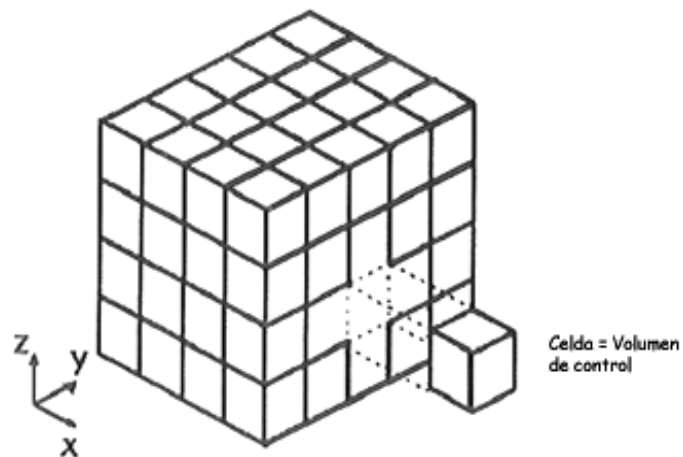


Figura 4.1 Representación del sistema discretizado en volúmenes finitos.

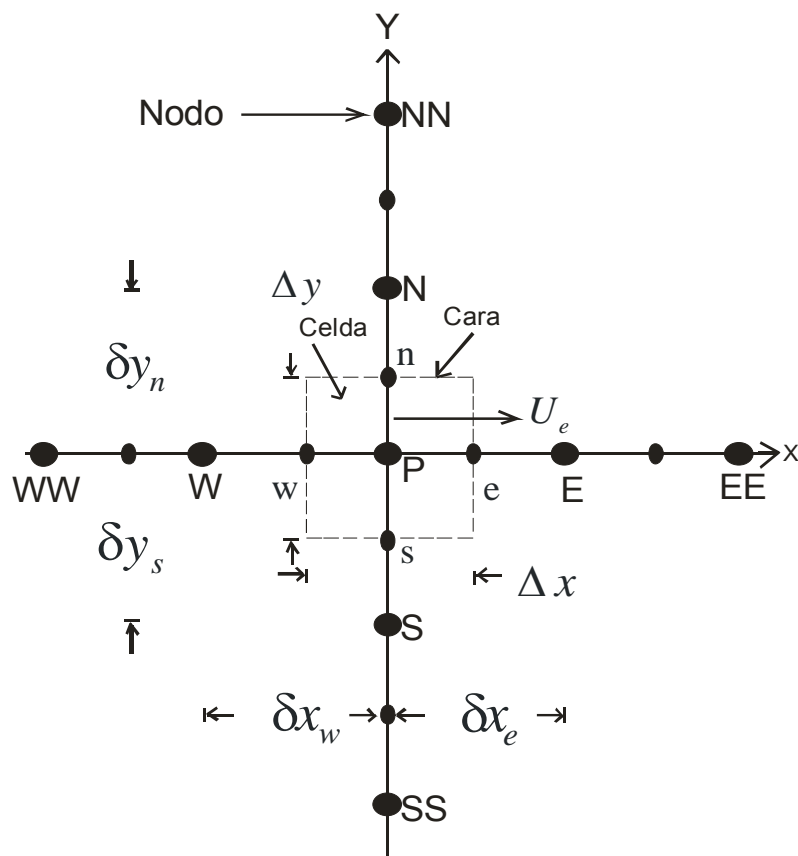


Figura 4.2 Diagrama esquemático de un volumen de control bidimensional

A continuación, se presentan los términos de la ecuación discretizada (4.2).

Definiendo los símbolos F , D , y Pe como:

$$F = \bar{\rho} \tilde{v}_i, \quad D = \frac{\Gamma}{\delta_i}, \quad Pe = \frac{F}{D} \quad (4.3)$$

donde \tilde{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, \tilde{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 (4.1) respectivamente.)

Los coeficientes a_i de la ecuación (4.2) son:

$$a_i = D_i f(|Pe|_i) + \max(-F_i, 0) \quad (4.4)$$

Los valores F y D en la cara de la celda de la ecuación (4.4) son:

$$F_i = (\bar{\rho} \tilde{v})_i \Delta_i, \quad D_i = \frac{\Gamma_i \Delta_i}{(\delta_i)}, \quad i=n, s, e, w \quad (4.5)$$

donde Δ_i es la longitud de la cara i .

Para determinar F_i se necesita conocer $\bar{\rho}$ y \tilde{u}_i en la cara de la celda. El cálculo del término convectivo de la ecuación de transporte (4.1) 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 si la malla es decalada; 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 (4.2). 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

(4.4) depende el esquema de interpolación. Por ejemplo, en el esquema de diferencias desplazadas, $f(|Pe|) = 1$, y para el sistema híbrido [110]:

$$f(|Pe|) = \max(0, 1 - 0.5|Pe|) \quad (4.6)$$

En el apéndice A se presentan algunos de los esquemas de discretización lineales, que se utilizan en esta Tesis en la discretización del término convectivo de las ecuaciones de cantidad de movimiento y del modelo de turbulencia.

El coeficiente para el término transitorio es:

$$a_T = \frac{\bar{\rho}_T \Delta x \Delta y}{\Delta t} \quad (4.7)$$

Para el cálculo del término D_i (4.5) 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 a la cara. Esta interpolación puede ser aritmética o armónica. Para la cara “e”, por ejemplo, estas interpolaciones son:

$$\Gamma_e = \frac{\Delta x (\Gamma_P + \Gamma_E)}{2 \delta x_e} \quad \Gamma_e = \frac{2 \delta x_e}{\Delta x \left(\frac{1}{\Gamma_P} + \frac{1}{\Gamma_E} \right)} \quad (4.8)$$

El término fuente de la ecuación general (4.1), \bar{S}_ϕ , se linealiza como:

$$\bar{S}_\phi = \bar{S}_{\phi,c} + \bar{S}_{\phi,v} \tilde{\phi}_P \quad (4.9)$$

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 (4.2) son:

$$B = \bar{S}_\phi \Delta x \Delta y + a_T \tilde{\phi}_T \quad (4.10)$$

$$a_p = a_e + a_w + a_n + a_s + a_T - \bar{S}_{\phi,v} \Delta x \Delta y \quad (4.11)$$

La ecuación (4.2) 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) ([111], [110] y [133]). 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 imbalance 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 o 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 influencia diagonal de la matriz de coeficientes al agregar a la ecuación de cualquier variable $\tilde{\phi}$ el término fuente:

$$\bar{S}_{\phi,r} = \frac{\bar{\rho}V_P}{\Delta t_f} (\tilde{\phi}_P^{(n-1)} - \tilde{\phi}_P^{(n)}) \quad (4.12)$$

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:

$$\tilde{\phi}_P^{(n)} = \alpha \tilde{\phi}_P^{sol} + (1 - \alpha) \tilde{\phi}_P^{(n-1)} \quad (4.13)$$

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 [86] para resolver las ecuaciones que describen aerodinámica del flujo: continuidad, cantidad de movimiento y turbulencia. Al código PHOENICS se le ha acoplado el método Monte Carlo, con el cual se resuelve la ecuación de transporte de la FDP. Este método de Monte Carlo se trata en la siguiente sección.

4.3 Método Monte Carlo

Como se ha apuntado en la introducción a este capítulo, la solución de la ecuación de transporte de la FDP es solo factible, dada su adimensionalidad, mediante técnicas de Monte Carlo [117].

Estos métodos consisten en simular la FDP, $\tilde{P}(\underline{\psi})$, mediante un conjunto Φ , de N_p vectores llamados partículas, cada uno de los cuales representa una realización del estado termoquímico:

$$\Phi = [\underline{\Phi}^{(1)}, \underline{\Phi}^{(2)}, \dots, \underline{\Phi}^{(N_p)}] , \quad \underline{\Phi}^{(i)} = \Phi_{\alpha}^{(i)} = [\Phi_1^{(1)}, \Phi_2^{(2)}, \dots, \Phi_N^{(i)}] \quad (4.14)$$

En estas expresiones, el índice superior, i , representa el índice de la partícula; el inferior, α , indica el escalar termoquímico dentro de la partícula; N es el número total de propiedades que determinan el estado termoquímico. En la notación de $P(\underline{\psi})$ se incluye implícitamente la dependencia de la FDP con la posición espacial \underline{x} y el tiempo t .

Los métodos de Monte Carlo simulan la función de densidad de probabilidad en el caso límite de que se consideren infinitas partículas, es decir:

$$\tilde{P}(\underline{\psi}) = \lim_{N_p \rightarrow \infty} \Phi \quad (4.15)$$

Puesto que el número de partículas es necesariamente finito, el método de Monte Carlo comete un cierto error estadístico, que depende del número de partículas y decrece con la raíz cuadrada de éste (error $\approx N^{-1/2}$) [121]. Para limitar este error, se requiere usar en la simulación un número de partículas tan grande como sea posible. El método Monte Carlo utilizado en esta Tesis consiste en la discretización en el espacio físico y temporal (no el espacio de composición) de la ecuación de transporte de la FDP mediante la técnica de volúmenes finitos. En cada celda la FDP se simula mediante un conjunto local de partículas. Los procesos de convección y difusión se simulan con el intercambio estocástico de valores de partículas entre celdas vecinas, y los procesos de mezcla molecular y reacción química se simulan con un cambio en el valor de la partícula local. Los procesos de difusión y convección, mezcla y reacción, se aplicarán de forma secuencial al conjunto de partículas utilizando una técnica de pasos fraccionados [121].

A continuación, se presenta el método de Monte Carlo.

4.3.1 Discretización de la ecuación de la FDP

La ecuación de transporte de la FDP (capítulo (2)) se puede escribir como:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} [\bar{\rho} \tilde{P}(\underline{\psi})] + \underbrace{\nabla \cdot [\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{P}(\underline{\psi})]}_{(a)} + \underbrace{\nabla \cdot [\bar{\rho} \Gamma_{T,\phi} \nabla \tilde{P}(\underline{\psi})]}_{(b)} = \\ \underbrace{-\frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} [S_\alpha \tilde{P}(\underline{\psi})]}_{(c)} - \underbrace{\frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} \left[\left\langle \frac{\partial J_{i,\alpha}}{\partial x_i} \right|_{\phi=\underline{\psi}} \right] \tilde{P}(\underline{\psi})}_{(d)} \end{aligned} \quad (4.16)$$

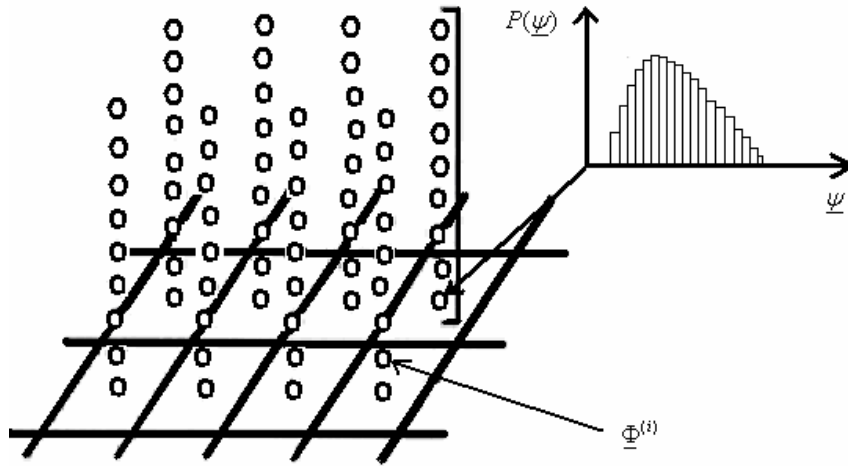


Figura 4.3 Representación esquemática de las partículas en la malla de volúmenes finitos.

donde (a), (b), (c) y (d) son los términos de convección, difusión, reacción química y mezcla molecular respectivamente.

La ecuación (4.16) muestra que $\tilde{P}(\underline{\psi})$ varía simultáneamente con los procesos de convección, difusión, reacción química y mezcla molecular. Con el uso de una técnica de pasos fraccionados, estos procesos se tratarán de forma secuencial.

Esta técnica de pasos fraccionados se introduce más adelante.

Al igual que la ecuación general (4.1), la ecuación de la FDP (4.16) se puede discretizar en el espacio físico y tiempo (no en el espacio de composición) con el método de volúmenes finitos. Con una discretización explícita en el tiempo, la ecuación discretizada de la FDP en tres dimensiones tiene la forma:

$$a_T(\tilde{P}_p - \tilde{P}_T) = a_e(\tilde{P}_E - \tilde{P}_T) + a_w(\tilde{P}_E - \tilde{P}_T) + a_n(\tilde{P}_N - \tilde{P}_T) + a_s(P_s - P_T) + a_h(\tilde{P}_H - \tilde{P}_T) + a_l(\tilde{P}_L - \tilde{P}_T) + V_p S_M + V_p S_Q \quad (4.17)$$

donde \tilde{P}_T y \tilde{P}_p son la celda P al inicio y al final de su paso temporal Δt , respectivamente, V_p es el volumen de la celda, y S_M y S_Q representan los términos fuente de mezcla y químico de la ecuación (4.16) respectivamente.

$$\tilde{P}_p = \sum_{i,l=E,W,N,S,H,L} \frac{a_i}{a_T} (\tilde{P}_l - \tilde{P}_T) + \tilde{P}_T + \frac{V_p}{a_T} (S_M + S_Q) \quad (4.18)$$

La función de densidad de probabilidad, $P(\underline{y})$, se representa en cada celda por el conjunto N_p partículas estocásticas Φ . El número total del conjunto de partículas N_p es el mismo en todas las celdas del dominio. Una representación esquemática del conjunto de partículas es una malla bidimensional y cartesiana de volúmenes finitos se ilustra la figura 4.3.

4.3.2 Técnica de pasos fraccionados

Para la simulación estocástica de la ecuación (4.18) se definen previamente los operadores identidad, transporte, reacción y mezcla como sigue:

- Identidad, \underline{I} :

$$\underline{I}P_T = P_T \quad (4.19)$$

- Transporte en cada dirección x, y, z , τ_i :

$$\tau_x \tilde{P}_T = \frac{a_e}{a_T} (\tilde{P}_E - \tilde{P}_T) + \frac{a_w}{a_T} (\tilde{P}_W - \tilde{P}_T) \quad (4.20)$$

$$\tau_y \tilde{P}_T = \frac{a_n}{a_T} (\tilde{P}_N - \tilde{P}_T) + \frac{a_s}{a_T} (\tilde{P}_S - \tilde{P}_T) \quad (4.21)$$

$$\tau_z \tilde{P}_T = \frac{a_h}{a_T} (\tilde{P}_H - \tilde{P}_T) + \frac{a_l}{a_T} (\tilde{P}_L - \tilde{P}_T) \quad (4.22)$$

- Reacción, S_Q :

$$S_Q \tilde{P} = \frac{V_P}{a_T} S_Q \quad (4.23)$$

- Mezcla, S_M , es:

$$S_M \tilde{P} = \frac{V_P}{a_T} S_M \quad (4.24)$$

En términos de estos operadores, la ecuación (4.18) se puede reescribir sin aproximación como:

$$\tilde{P}_P = (\mathcal{I} + \tau_x + \tau_y + \tau_z + S_Q + S_M) \tilde{P}_T \quad (4.25)$$

Dependiendo del esquema de discretización espacial que se usa en el cálculo de los coeficientes a_i , por ejemplo de aguas arriba o diferencias centradas, el orden del operador transporte, τ_i es (Δx_i) o (Δx_i^2) . Con respecto al tiempo, la discretización representada por los operadores τ_i, S_M y S_Q es del orden (Δt) . Por tanto, la suma de los operadores de la ecuación (4.25) se puede factorizar como un producto de operadores más un término de orden superior Δt^2 [119] como sigue:

$$\tilde{P}_P = (\mathcal{I} + \tau_x)(\mathcal{I} + \tau_y)(\mathcal{I} + S_M)(\mathcal{I} + S_Q) \tilde{P}_T + O(\Delta t^2) \quad (4.26)$$

La ecuación (4.26) expresa el principio de la técnica de pasos fraccionados: la FDP de la celda P evoluciona de un tiempo t a otro $t + \Delta t$ mediante la aplicación secuencial de cada uno de los operadores. En cada paso intermedio o fraccionado, el operador se aplica al resultado del paso anterior. Esta secuencia de operaciones se puede escribir como:

$$\tilde{P}_{T,\tau_i} = (\mathcal{L} + \tau_i)\tilde{P}_T \quad (4.27)$$

$$\tilde{P}_{T,S} = (\mathcal{L} + S_M)\tilde{P}_{T,\tau_i} \quad (4.28)$$

$$\tilde{P}_P = (\mathcal{L} + S_Q)\tilde{P}_{T,S} \quad (4.29)$$

donde \tilde{P}_{T,τ_i} y $\tilde{P}_{T,S}$ son las funciones de densidad de probabilidad (en la celda P) después de aplicar los operadores de transporte y mezcla respectivamente.

4.3.3 Pasos de evolución

Los pasos fraccionados descritos al final del epígrafe anterior simulan, mediante el método Monte Carlo, operando de forma estocástica con las partículas que representan la FDP en cada punto, de forma que el efecto de la simulación, cuando el número de partículas tiende a infinito, sea el mismo que el efecto sobre la FDP del término correspondiente de la ecuación de transporte.

A continuación se presentan las reglas que se deben observar para que esto suceda en la simulación de cada uno de los pasos. Los argumentos que se presentan son de carácter cualitativo; una justificación rigurosa de que las reglas enunciadas simulan en verdad el comportamiento de la FDP puede encontrarse en [119].

4.3.4 Paso fraccionado de transporte

El paso fraccionado de transporte simula el efecto de los términos de convección y difusión de la ecuación (4.16) en la FDP. En la dirección x , por ejemplo, el paso fraccionado de transporte es:

$$P_{T,\tau_x} = (\tau + \tau_x)\tilde{P}_T \quad (4.30)$$

donde P_{T,τ_x} es la FDP en la celda P en un tiempo $t + \Delta t'$ después del paso fraccionado de transporten la dirección x . El tiempo $t + \Delta t'$ es un tiempo (nocional) intermedio entre t y $t + \Delta t$.

Si en la ecuación (4.30) se sustituye la definición del operador transporte en la dirección x (4.20) se tiene:

$$\tilde{P}_{T,T_z} = \tilde{P}_T + \frac{a_e}{a_T}(\tilde{P}_E - \tilde{P}_T) + \frac{a_w}{a_T}(\tilde{P}_W - \tilde{P}_T) = \frac{a_e}{a_T}\tilde{P}_E + \frac{a_w}{a_T}\tilde{P}_W + \left(1 - \frac{a_e}{a_T} - \frac{a_w}{a_T}\right)\tilde{P}_T \quad (4.31)$$

Como la FDP en cada celda se representa por un conjunto de partículas (Φ), este proceso se simula con la formación en la celda P de un nuevo conjunto de partículas a partir de partículas seleccionadas aleatoriamente de los nodos adyacentes (E y W) y del mismo nodo P en las proporciones indicadas por los coeficientes de la ecuación anterior, esto es:

- $N_P(a_w/a_T)$ partículas del nodo W
- $N_P(a_e/a_T)$ partículas del nodo E
- $N_P(1 - a_w/a_T - a_e/a_T)$ partículas de las que estaban en el nodo P antes de aplicar este paso fraccionado.

La selección de las partículas reemplazadas es aleatoria, y el reemplazamiento es sin reposición. Las partículas de los nodos adyacentes, de los cuales se obtienen los valores de reemplazo, se seleccionan también de forma aleatoria. El efecto en la FDP en la celda P del proceso de transporte en la dirección x se ilustra en la figura 4.4.

El número de partículas que se toma de cada conjunto no debe ser mayor que el número total de partículas del conjunto (N_P):

$$N_P \geq N_P \frac{a_w}{a_T} + N_P \frac{a_e}{a_T} \quad (4.32)$$

Con el uso de la definición de a_T (4.7), la ecuación (4.32) resulta en una restricción al paso temporal, Δt , (en este caso, por la aplicación del paso fraccionado de transporte en x), ya que se tiene que cumplir que:

$$\Delta t_{T_x} \leq \frac{\bar{\rho}_T V_P}{a_w + a_e} \quad (4.33)$$

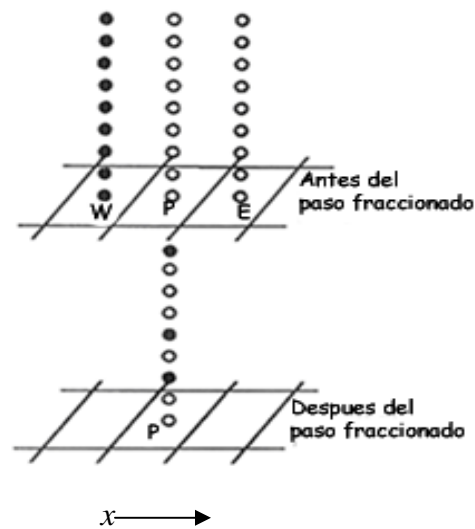


Figura 4.4 Representación del paso fraccionado de transporte en la dirección x para la celda

Esta restricción para el paso temporal es también la restricción para cálculo temporal explícito con el método de volúmenes finitos.

El método anterior se repite para cada una de las celdas del dominio, y luego para cada una de las direcciones.

Un detalle menor, pero importante, de la implementación, es el marcado de las partículas intercambiadas para evitar que en un mismo paso fraccionado la partícula viaje más de una celda en una dirección. Puesto que la selección de aleatoria de partículas puede ser computacionalmente cara cuando en una celda quedan pocas partículas sin marcar, el procedimiento utilizado en la presente Tesis es inicialmente determinista, introduciendo la aleatoriedad mediante la remoción de la FDP al final de cada paso fraccionado. El procedimiento es en síntesis el siguiente:

- En el nodo P , donde se está aplicando el paso fraccionado de transporte, las partículas reemplazadas se escogen secuencialmente a partir de la primera.
- En los nodos adyacentes, las partículas reemplazantes se toman secuencialmente a partir de un número de partícula seleccionado aleatoriamente para cada nodo.

- Para garantizar la aleatoriedad del proceso, las partículas que componen la FDP en el nodo considerado son "barajadas" aleatoriamente en un proceso que se denominará "remoción", y que se describe brevemente a continuación.

4.3.5 Proceso de remoción

El proceso de "remoción" de partículas se hace después de aplicar el paso fraccionado de transporte en cada dirección. Este proceso se realiza en cada nodo de la malla, y consiste en un intercambio de valores entre dos partículas seleccionadas aleatoriamente. El número de veces que se hace este intercambio de valores entre partículas es suficiente para asegurar, que, toda partícula tiene la oportunidad de ser seleccionada para la remoción.

El proceso de remoción en el nodo P se ilustra en la figura 4.5.

4.3.6 Paso fraccionado de mezcla

El paso fraccionado de mezcla simula el efecto del término de mezcla molecular de la ecuación (4.16) en la FDP. El paso fraccionado de mezcla es:

$$\tilde{P}_{T,S} = (\mathcal{I} + S_M) \tilde{P}_{T,\tau_i} \quad (4.34)$$

donde $\tilde{P}_{T,S}$ y \tilde{P}_{T,τ_i} funciones de densidad de probabilidad después de los pasos fraccionados de mezcla y transporte respectivamente.

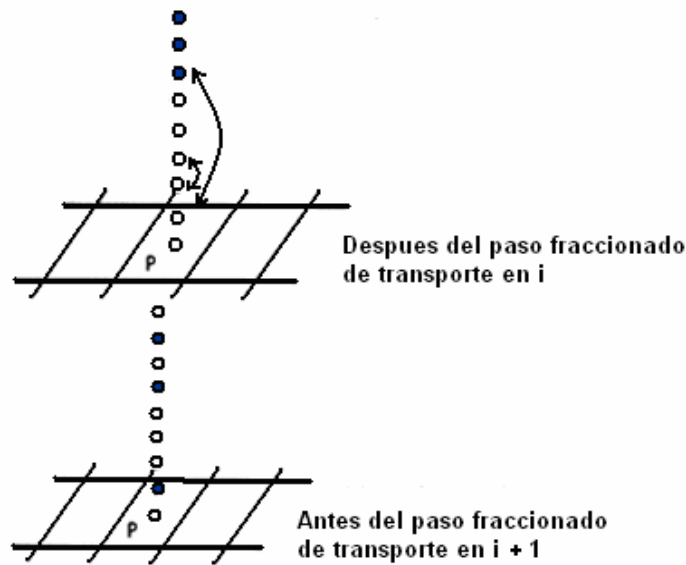


Figura 4.5 Representación del proceso de agitación en la celda P .

A diferencia del paso fraccionado de transporte, que involucra la interacción de la FDP local con las de las celdas vecinas, el paso fraccionado de mezcla es local, es decir involucra partículas de la misma celda. En cada celda del dominio, el paso fraccionado de mezcla (ecuación 4.34) se simula con un cambio en el valor de la partícula de acuerdo al modelo de mezcla usado, por ejemplo LMSE o Curl modificado (capítulo 2). Con el modelo de mezcla LMSE, cada partícula estocástica cambia su valor de acuerdo a:

$$\phi_S^{(i)} = \phi_{\tau_i}^{(i)} - \frac{1}{2} \Delta t \frac{1}{\tau_{mez}} \left(\phi_{\tau_i}^{(i)} - \tilde{\phi}_{\tau_i} \right), \quad \tau_{mez} = \frac{\tilde{k}}{4 \epsilon} \quad (4.35)$$

donde $\phi_S^{(i)}$ es el valor de $\phi_{\tau_i}^{(i)}$ en un tiempo entre t y $t + \Delta t$, después del paso fraccionado de mezcla, τ_{mez} es el tiempo de mezcla, \tilde{k} la energía cinética turbulenta y ϵ es la tasa de disipación de la energía cinética turbulenta.

El modelo de Curl modificado se simula mediante una selección aleatoria de un par de partículas $\phi_{\tau_i}^{(i)}$, y $\phi_{\tau_i}^{(j)}$ las cuales se mezclan y dan lugar a los nuevos valores:

$$\phi_S^{(i)} = \phi_{\tau_i}^{(j)} + \frac{1}{2} x (\phi_{\tau_i}^{(j)} + \phi_{\tau_i}^{(i)}) \quad (4.36)$$

$$\phi_S^{(j)} = \phi_{\tau_i}^{(i)} + \frac{1}{2} x (\phi_{\tau_i}^{(j)} - \phi_{\tau_i}^{(i)}) \quad (4.37)$$

donde x es un número aleatorio entre cero y uno de una distribución uniforme. El número de pares de partículas que se seleccionan para mezclarse es:

$$N_{p,mez} = 6\Delta t \frac{\xi}{\bar{k}} N_p \quad (4.38)$$

Nótese que esta ecuación puede imponer otra restricción sobre el paso temporal Δt para evitar que se mezclen más partículas que el número total disponible N_p .

Las partículas que no se mezclan permanecen sin cambio.

4.3.7 Paso fraccionado de reacción química

El paso fraccionado de reacción química es:

$$\tilde{P}_p = (\mathcal{I} + S_Q) \tilde{P}_{T,s} \quad (4.39)$$

donde \tilde{P}_p es la función de densidad de probabilidad en el tiempo $t + \Delta t$, después del paso de transporte de reacción química.

Al igual que el paso fraccionado de mezcla, el paso de reacción química también es local. Este proceso se simula con la modificación en el valor de la partícula según la ecuación de evolución del sistema termoquímico:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\phi^{(i)}) = S_{\phi}^{(i)} \quad (4.40)$$

donde S_ϕ es la tasa de reacción química. La integración del sistema de ecuaciones diferenciales (4.40) es para el intervalo de tiempo Δt .

4.4 Acoplamiento de los métodos de volúmenes finitos y Monte Carlo

En esta sección se trata el acoplamiento entre los métodos de Monte Carlo y de volúmenes finitos. Puesto que el método de Monte Carlo para resolver la ecuación de transporte de la FDP es explícito y transitorio, el método de volúmenes finitos también ha de ser transitorio.

En los cálculos realizados por cada uno de estos módulos se requiere información externa, que es proporcionada respectivamente por la otra parte.

Para un paso temporal (Δt) dado, en los cálculos del método de Monte Carlo se requieren los siguientes parámetros proporcionados por el método de volúmenes finitos:

- Los coeficientes a_i y a_T de la ecuación en volúmenes finitos, que se usan para calcular el paso fraccionado de transporte en las direcciones x , y y z (ecuaciones (4.20), (4.21) y (4.22)).
- Los valores de \tilde{k} y ϵ que se usan en los modelos de mezcla LMSE (ecuación (4.35)) y Curl modificado (ecuaciones (4.36)) y (4.37)).

En los cálculos del método de volúmenes finitos se requieren los siguientes parámetros, proporcionados por el método de Monte Carlo:

- El paso temporal, Δt , que se limita con la relación (4.33).
- La densidad promediada, $\bar{\rho}$, que se calcula del estado termoquímico de la partícula con la ecuación de gas ideal. El valor medio de la densidad obtiene a partir del conjunto de partículas como:

$$\bar{\rho} = \left(\frac{1}{N_p} \sum_{i=1}^{N_p} \frac{1}{\rho(\phi^{(i)})} \right)^{-1} \quad (4.41)$$

En la figura 4.6 se presenta esquemáticamente la interacción entre los métodos de volúmenes finitos y de Monte Carlo.

En términos generales, la solución combinada de ambos métodos consta por tanto de los siguientes pasos:

- En el inicio de un paso temporal, Δt se calcula teniendo en cuenta las restricciones del método de Monte Carlo, que se expresan por la relación (4.33). Estas limitaciones se evalúan con las variables aerodinámicas de paso temporal anterior.
- Con el paso temporal, Δt , calculado en (4.1), la FDP se evoluciona en el tiempo mediante el uso de la técnica de pasos fraccionados. Al final del paso temporal, el método de Monte Carlo calcula el valor de la densidad media.
- Con este valor nuevo de la densidad media, las variables aerodinámicas se recalculan en el método de volúmenes finitos.

Este proceso se repite hasta alcanzar el estado estacionario.

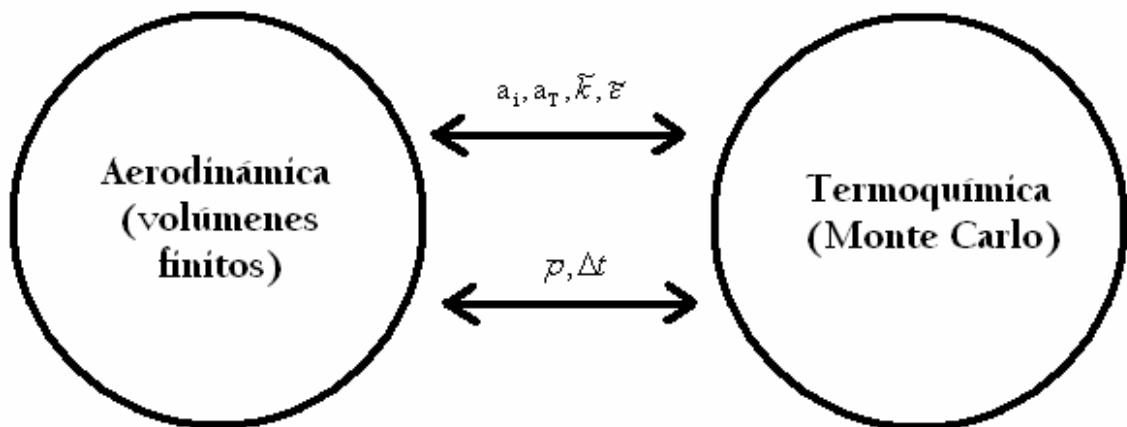


Figura 4.6 Representación esquemática del acoplamiento entre los métodos de volúmenes finitos y de Monte Carlo.

Capítulo 5

PREDICCIÓN DE UNA LLAMA PREMEZCLADA METANO Y AIRE

5.1 Introducción

En este capítulo se presentan las predicciones de la simulación de una llama de metano y aire [100] con el modelo estocástico descrito en el capítulo 4. Esta llama es premezclada y la mezcla metano y aire es pobre, siendo la tasa de equivalencia de 0.586. La llama está confinada y se estabiliza mediante un cuerpo romo. El número de Reynolds del flujo, Re , es 66000 (basado en el diámetro del obstáculo estabilizador y en la velocidad de inyección del fluido) y por lo tanto el flujo es turbulento.

El capítulo comienza con la presentación de la configuración experimental y de los detalles numéricos que se utilizan para simular esta llama. A continuación se muestran algunos resultados calculados que muestran la configuración general de la llama, y las comparaciones con datos experimentales de velocidad, temperatura y especies químicas. Para estudiar su efecto en las predicciones, se cambian algunos de los cierres y parámetros que constituyen el modelo. En general, los resultados obtenidos muestran una buena precisión para la velocidad, temperatura y especies de concentración mayoritaria. La evolución de las especies de concentración minoritaria se reproduce aceptablemente.

5.2 Configuración Experimental

La representación esquemática de la configuración experimental se muestra en la figura 5.1. La llama se estabiliza con un cono colocado coaxialmente en el centro de la sección de prueba, que esta limitada por las paredes de confinamiento.

La mezcla de metano y aire entra a la zona de combustión a través del espacio anular entre el cono y la pared. Detrás del cuerpo de estabilización se produce una zona de recirculación, cuyo propósito, como su nombre lo dice, es estabilizar la llama. El cono tiene un diámetro de base de 44.45 mm y un ángulo de 45°. La sección de prueba es de 79 mm de diámetro y 284 mm de longitud. La tasa de obstrucción, que se define como la relación entre el área del cuerpo estabilizador y el área transversal de la sección de prueba, es del 25%. Los flujos volumétricos de aire y de combustible son 3960 litros estándar por minuto (lspm) y 244 lspm respectivamente. La relación de equivalencia de la mezcla metano y aire resultante es 0.586, por lo que la mezcla es pobre en combustible. En una llama con una mezcla de metano y aire, la relación de equivalencia en el límite de flamabilidad pobre es 0.51, por lo que esta llama se encuentra cerca de este límite de flamabilidad. La presión y la temperatura de la mezcla metano y aire son 100 kPa y 300 K respectivamente.

En la entrada de la sección de prueba, la velocidad media, W_o , es 15 m/s y la intensidad turbulenta media. $I_T = w'/W_o$, es aproximadamente 24%. En la tabla 5.1 se resumen los parámetros experimentales de esta llama de metano y aire.

La velocidad de propagación y el espesor de llama laminar para una mezcla metano y aire con una relación de equivalencia de 0.586 son respectivamente 11 cm/s [80] y 0.11 mm. Otras magnitudes características de esta llama se muestran en la tabla 5.2. Los números de Reynolds turbulentos. Damköhler y Karlovitz, que se introdujeron en el capítulo 3 son:

$$R_{eT} = \frac{\sqrt{kl_I}}{\nu} \quad (5.1)$$

$$D_{al} = \frac{u_F l_I}{\sqrt{kl_F}} \quad (5.2)$$

$$Ka = \frac{t_Q}{t_{Ko}} = \frac{l_F}{l_{Ko}} = \frac{l_F}{u_F} \left(\frac{\varepsilon}{\nu} \right) \quad (5.3)$$

donde l_I es la longitud característica de la escala integral, u_F es la velocidad de propagación de llama laminar, l_F es el espesor de la llama laminar, t_Q es el tiempo característico asociado a la cinética química, t_{Ko} es el tiempo característico asociado a la escala Kolmogorov, k es la energía cinética turbulenta y ε es la tasa de disipación de la energía cinética turbulenta.

Los parámetros anteriores permiten la localización de la llama de metano y aire en el diagrama Borghi ([11], [113], [145]), localización que se muestra en la figura 5.2. Esta llama se localiza por tanto en la zona de la reacción distribuida, que se caracteriza por una fuerte interacción de la reacción química y la turbulencia.

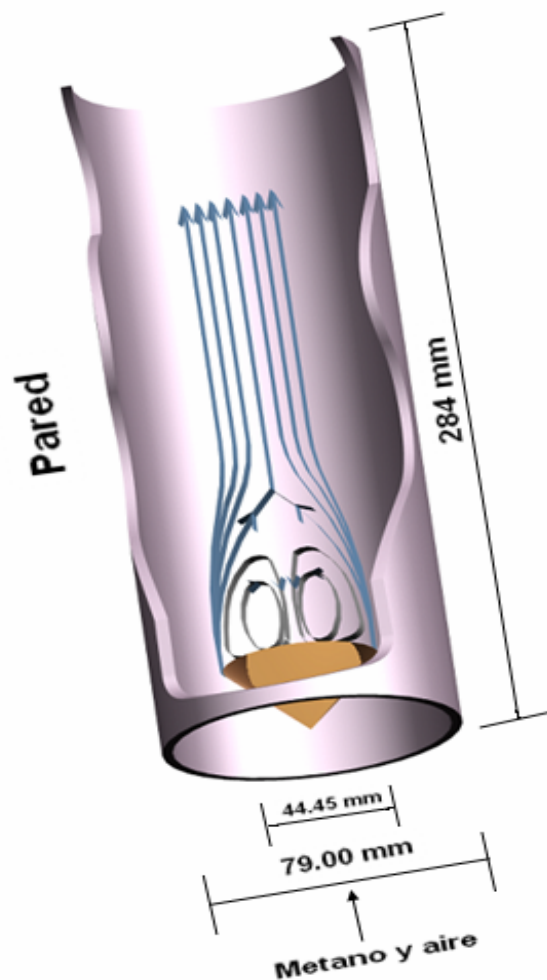


Figura 5.1: Representación esquemática del quemador (cotas en mm).

Los datos experimentales disponibles, y que se utilizaran en esta Tesis, consisten en medidas de velocidad [109], de temperatura y de concentraciones de especies mayoritarias y minoritarias [100]. Las especies de concentración mayoritarias son: CH_4 , O_2 , N_2 , H_2 , H_2O y CO_2 ; y las de concentración minoritaria son: OH , NO y CO . En la obtención de estas medidas se usaron técnicas ópticas (no intrusivas): Raman scattering para las especies mayoritarias y CO . Laser Induced Fluorescence para el OH y el NO , y el Rayleigh scattering para la temperatura. Para confirmar las medidas ópticas de NO y CO , se compararon estas medidas con las obtenidas de sondas de muestreo y analizadores a la salida del quemador.

Los datos experimentales se tomaron en las estaciones axiales $z/D_o = 0.1, 0.3, 0.6$ y 1.0 , las estaciones que se ilustran en la figura 5.3. La distancia axial, z , se adimensionaliza con el diámetro del cono, D_o . La base del cono se localiza en $z = 0$. Las incertidumbres típicas de las medidas de temperatura y especies químicas son reportadas por Nandula et al [100] y se muestran en la tabla 5.3.

Los valores de equilibrio de las especies mayoritarias y minoritarias para una mezcla metano y aire con una tasa de equivalencia de 0.586 se presentan en la tabla 5.4.

Tabla 5.1 Parámetros experimentales de la llama de metano y aire [100]

Diámetro de la base del cono	D_o	44.44 mm
Selección de prueba	SP	479 mm x 79 mm x 84 mm
Relación de obstrucción	RO	25 %
Flujo volumétrico de aire	\dot{Q}	3960 lspm
Flujo volumétrico de metano	\dot{Q}_{CH_4}	244 lspm

Temperatura de la mezcla (entrada del quemador)	T_0	300 K
Presión	P	100 kPa
Velocidad media (entrada del quemador)	W_0	15 m/s
Intensidad turbulenta (entrada del quemador)	I_T	24 %
Relación de equivalencia	s	0.586
Número de Reynolds	Re	66000
Temperatura de combustión adiabática	T_{adia}	1644 K

Tabla 5.2 Características y parámetros turbulentos de la llama de metano y aire

Velocidad de propagación de llama laminar	u_F	11 cm/s
Fluctuación de la velocidad (entrada del quemador)	$\sqrt{k} = w'$	3.6 m/s
Espesor de llama laminar	l_F	0.1 mm
Longitud característica del experimento	l_I	44.45 mm
\sqrt{k}/u_F		33
l_I/l_F		445

Número de Reynolds turbulento	Re_T	14400
Número de Damköhler	Da	13.4
Número de Karlovitz	Ka	8.9

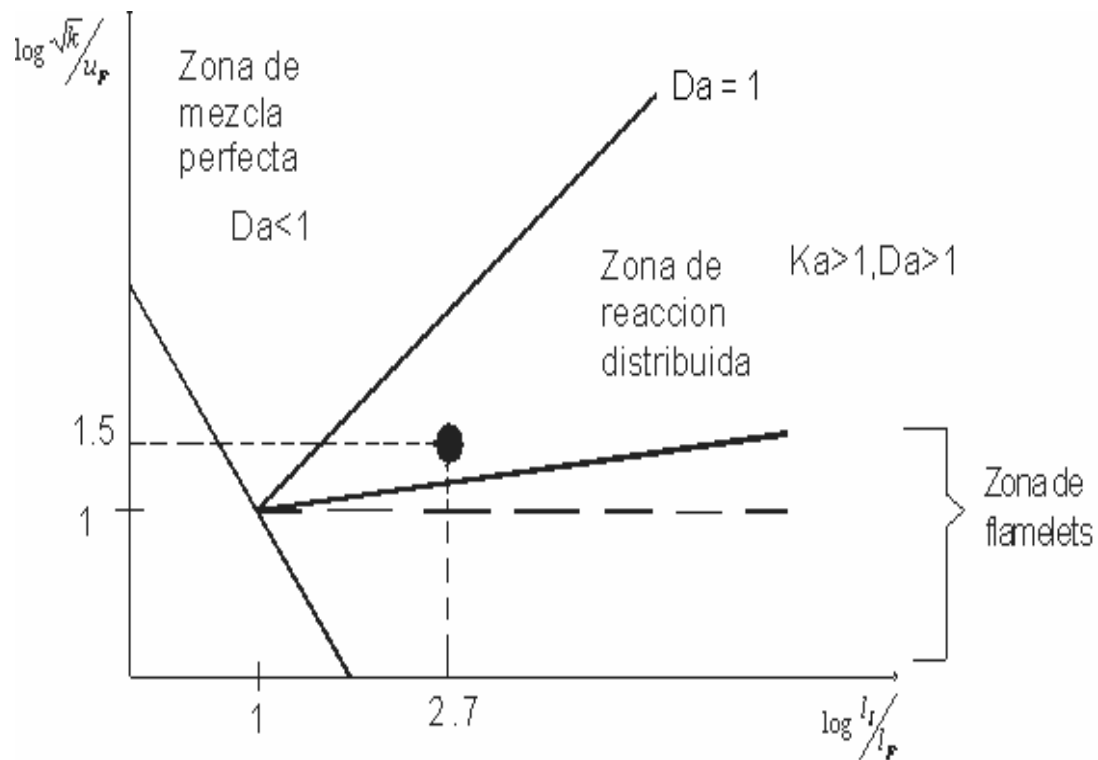


Figura 5.2 Localización de la llama de metano y aire en el diagrama de Borghi

Tabla 5.3 Incertidumbre típica de las medidas experimentales reportadas por Nandula et al [100].

Escalar	CH_4	H_2O	CO_2	CO	OH	NO	T
Error RMS	3.3	5.1	5.1	17.6	10.5	7.6	1
[%]							

Tabla 5.4 Valores de equilibrio para una mezcla metano y aire con una relación de equivalencia de 0.586. Los valores de las especies están expresados en fracción molar, salvo indicación contraria.

CH_4	0
H_2O	0.116
CO_2	0.058
N_2	0.744
O_2	0.081
CO	7 ppm
OH	200 ppm
NO	1492 ppm

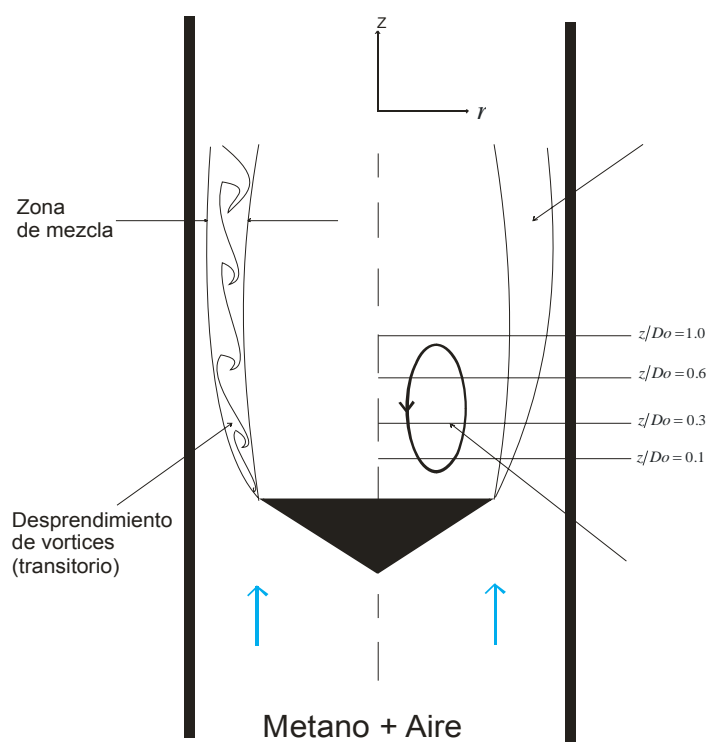


Figura 5.3 Representación esquemática de las posiciones axiales donde se tienen medidas experimentales.

5.3 Detalles numéricos

La presente llama de metano y aire se simula con el modelo estocástico descrito en el capítulo 4. La simulación de la llama se hace en dos dimensiones (coordenadas cilíndrico-polares). El dominio de cálculo se discretiza con una malla de 40 x 45 celdas de dirección radial (r) y axial (z) respectivamente. Con fines de ahorro en memoria y tiempo de cálculo, el dominio de la simulación empieza con base a la del cono estabilizador, y se extiende hasta 4.6 diámetros de cono en la dirección axial. En la dirección radial el dominio de cálculo se extiende hasta la pared de confinamiento situada a 0.9 diámetros de cono. En la figura 5.4 se presenta el dominio que se usa en la simulación. En la entrada de mezcla del dominio, las condiciones de velocidad, energía cinética turbulenta y tasa de disipación de la energía cinética turbulenta de la mezcla se asignan a partir de una simulación del flujo en frío aguas arriba del cono.

En el módulo de volúmenes finitos del modelo estocástico, la turbulencia se simula con el modelo $k-\varepsilon-RNG$. La discretización del término convectivo de las ecuaciones de cantidad de movimiento y del modelo de turbulencia se hace con el esquema de discretización de híbrido.

Tabla 5.5 Porcentaje del tiempo de cálculo por los módulos del modelo numérico: Volúmenes finitos (VF) y Monte Carlo (MC).

Módulo	Proceso	Por módulo	Por proceso (MC)
VF		9.0%	
MC		91.0%	
	Transporte (convección-difusión)		3.0%
	Termoquímico (reacción y densidad)		95.0%
	Mezcla		2.0%

En el módulo de Monte Carlo, la reacción química se modela con el mecanismo de 5 pasos de Mallampalli et al [94], sistemáticamente reducido a partir del mecanismo detallado GRI 2.11 [13]. Suponiendo que no hay pérdidas de calor y que las especies tienen igual difusividad, la FDP del estado termoquímico de la mezcla se puede determinar unívocamente por 5 escalares (9 especies químicas menos 4 relaciones de conservación de átomos: C, H, O y N). En el cálculo anterior, la fricción de mezcla no se incluye porque es constante en el dominio (capítulo 3), como es la entalpía en ausencia de pérdidas de calor y en la hipótesis de igual difusividad.

La FDP es por tanto:

$$\tilde{P}(n_{CH_4}, n_{CO}, n_{OH}, n_{H_2O}, n_{NO}) \quad (5.4)$$

donde los escalares independientes de la FDP, n_α , toman la modalidad de la especie α . La representación de la química se hace con la técnica de las tablas de tabulación adaptativa in-situ.

Para modelar el término de mezcla molecular de la ecuación de transporte de la FDP se usa el modelo LMSE. El tiempo de mezcla del modelo LMSE, τ_{mez} , se toma como $\tilde{k}/4\varepsilon$, donde \tilde{k} es la energía cinética turbulenta y ε es la tasa de disipación de la energía cinética turbulenta.

En cada celda del dominio, la FDP se simula con 100 partículas de Monte Carlo.

Con estas condiciones, se genera el llamado caso base de simulación, que tiene un tiempo de cálculo de aproximadamente 48 h en una PC Sun Ultra 60. El porcentaje del tiempo de cálculo que utilizan los dos módulos del modelo se indican en la tabla 5.5. El proceso termoquímico del módulo de Monte Carlo es el proceso en el que se utiliza el mayor porcentaje de tiempo de cálculo.

Los resultados obtenidos para este caso base se presentarán a continuación.

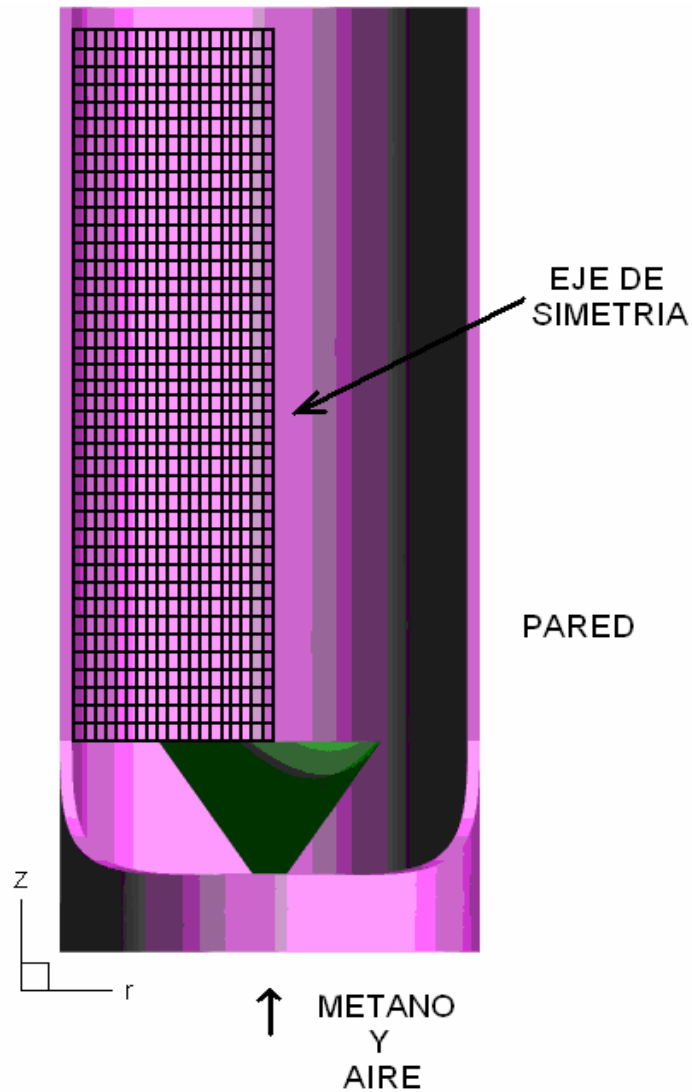


Figura 5.4 Representación del dominio de simulación. El número de celdas en la dirección axial, z , es 45 y en la dirección radial, r , es 40.

5.4 Resultados del caso base. Análisis.

En esta sección se presentan los resultados que se obtuvieron para esta configuración de la llama de metano. Primero se muestran algunos resultados de los cálculos y posteriormente se comparan las predicciones con datos experimentales de velocidad axial, temperatura y especies químicas de concentración mayoritaria y minoritaria. Las longitudes axial y radial se muestran siempre adimensionalizadas con el diámetro de base del cono D_0 .

Para la configuración del modelo hay que tomar en cuenta ciertos detalles. Cuando la velocidad de la mezcla fresca es mayor que la velocidad de quemado se genera un flujo turbulento, es por eso que la llama debe ser estabilizada, y para este fin se coloca el cuerpo romo. Éste tiene como funciones principales, la de estabilizar al flujo y generar una zona de recirculación posterior a éste.

5.4.1 Campo de velocidades, temperaturas y fracciones molares

La figura 5.5 muestra los vectores de velocidad media en el quemador. Se puede apreciar cómo, después del cuerpo romo se forma una zona de recirculación, la cual estabiliza la llama; esta zona de recirculación es generada por la disposición de la geometría y también por los cambios de presión. La zona de recirculación aumenta la residencia de las partículas de la mezcla de combustible dentro de la misma y así se logra una combustión completa, ya que en esa zona se localizan las temperaturas más altas (ver Figura 5.8).

La longitud de la zona de recirculación es aproximadamente el “diámetro” del quemador. Después de la zona de recirculación, el flujo comienza a estabilizarse a lo largo del quemador.

En la figura 5.6 se muestran las líneas de corriente del flujo promedio. Las paredes de confinamiento evitan grandes curvaturas en la línea de corriente y varían el comportamiento de algunos parámetros aerodinámicos, como la presión, que se modifica de tal forma que la longitud de la zona de recirculación es menor que una llama no confinada [108].

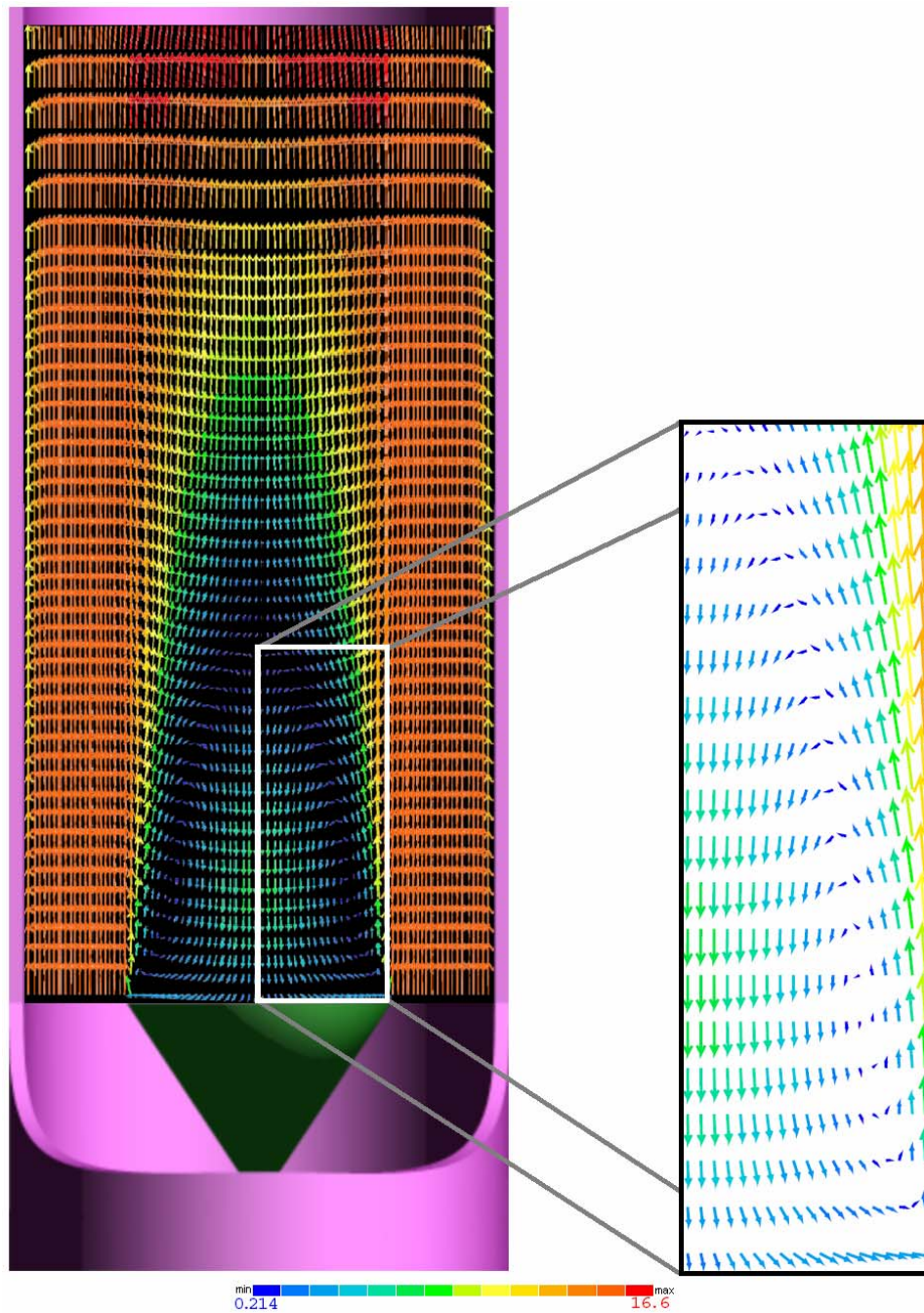


Figura 5.5 Representación del campo de velocidad media en la llama.

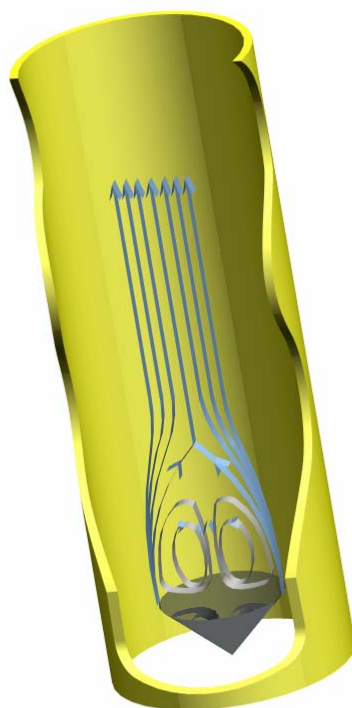


Figura 5.6 Contornos de líneas de corriente.

Los contornos de temperatura, y de fracción molar de CH_4 y de las especies de concentración minoritaria (OH , CO , y NO) se presentan en las figuras 5.8, 5.9, 5.10, 5.11 y 5.12. En la zona de recirculación, las predicciones de las especies mayoritarias son uniformes y próximas a su valor de equilibrio (tabla 5.4); por ejemplo las concentraciones de CH_4 tienen un valor casi nulo. Así, esta región de recirculación es una zona de productos de la combustión con una temperatura media de aproximadamente 1644 K, que está cercana al valor de la temperatura adiabática. La alta temperatura de los gases de esta zona de recirculación va a producir la ignición de la mezcla de reactantes que entra al sistema.

En la frontera entre los productos calientes y los reactantes frescos se produce principalmente la reacción. En esta zona de reacción, las concentraciones de CO y OH son considerablemente más altas que en la zona de recirculación.

Los valores medios máximos de las predicciones de CO y OH son aproximadamente 5000 partes por millón (ppm) y 995 ppm respectivamente. Este

valor del OH , es aproximadamente unas cinco veces el valor de equilibrio (200 ppm).

En la zona de recirculación, el CO tiene concentraciones próximas al valor de equilibrio (7 ppm) y el NO tiene un valor medio uniforme de aproximadamente 5 ppm.

La figura 5.13 muestra los contornos de fracción molar de H_2O , que es similar al de la temperatura. En esta figura se puede apreciar que, en la zona de recirculación es donde se encuentra la mayor cantidad de H_2O en el sistema; en dicha zona la fracción molar del H_2O es de aproximadamente 0.1169, el cual es un valor muy cercano al valor de equilibrio. Mientras que en la zona de gases frescos la concentración de H_2O es casi nulo.

5.4.2 Velocidad axial. Comparaciones con datos experimentales.

En la figuras 5.14, 5.15, 5.16 y 5.17 se comparan las predicciones y las mediciones experimentales de la velocidad axial $z/D_0 = 0.1, 0.3, 0.6$ y 1.0 . Las predicciones de la velocidad presentan una buena aproximación tanto en la zona de recirculación, $r/D_0 < 0.6$, como en la zona de reacción. La zona de recirculación se identifica por las velocidades negativas en la región próxima al eje. El perfil de la velocidad axial presenta un alto gradiente en la zona de reacción. En la estación axial $z/D_0 = 1.0$, al final de la zona de recirculación, el modelo subestima ligeramente la velocidad en la zona próxima al eje central de la llama. Estas diferencias se pueden deber a que en las proximidades de esta zona, el flujo presenta características de anisotropía ([14] y [27]), que el modelo $k-\varepsilon-RNG$ no puede reproducir adecuadamente. De acuerdo con las figuras 5.14, 5.15, 5.16 y 5.17 el modelo químico no afecta el comportamiento de la velocidad en la llama; se muestra solo una curva (datos numéricos) y puntos experimentales; solo se observa una curva debido a que, al ser muy semejantes los datos obtenidos por cada modelo se obtenían tres curvas traslapadas, con lo cual no se tenía una diferencia apreciable entre los datos de cada modelo.

5.4.3 Temperatura. Comparaciones con datos experimentales

Los perfiles de temperatura en las estaciones axiales $z/D=0.1$, 0.3 , 0.6 y 1.0 se muestran en las figuras 5.18, 5.19, 5.20 y 5.21. En la zona de recirculación, las predicciones de temperatura tienen un valor próximo al de la temperatura adiabática (1644 K) y son aproximadamente 100 K superiores a los valores experimentales. Los diferentes modelos afectan directamente a la temperatura en la zona de reacción principalmente, donde la alta temperatura que existe en la zona de recirculación, inicia las reacciones químicas de la mezcla de aire-combustible cuando ésta se introduce en el quemador. El modelo químico reducido de nueve pasos de reacción predice valores menores que los otros modelos en estaciones axiales $z/D>0.3$ en la zona de reacción.

El tiempo de mezcla local, proporcionado como dato de entrada para el modelo de mezcla (i.e. LMSE), estimado por medio de la expresión

$$\omega_{mix} = C_D \tilde{\epsilon} / \tilde{k} \quad 5.5$$

(donde \tilde{k} es la energía cinética turbulenta y $\tilde{\epsilon}$ es la tasa de disipación) es un parámetro de mucha influencia durante la evolución de las especies químicas, así como en la temperatura. El tiempo de mezcla puede inducir la probabilidad hacia su valor medio a una tasa más alta. Como consecuencia, las tasas de reacción química de las especies de producción/reducción pueden volverse bastante rápidas para relajar la concentración de especies que están en condiciones de equilibrio, cuando éstas se encuentran compitiendo por mezclarse. Sin embargo, la frecuencia de mezcla evoluciona independientemente de cada modelo químico. Por tal razón las inconsistencias encontradas en la predicción de los resultados son a causa de las diferentes tasas de reacción química, estimadas por cada modelo químico usado en esta tesis.

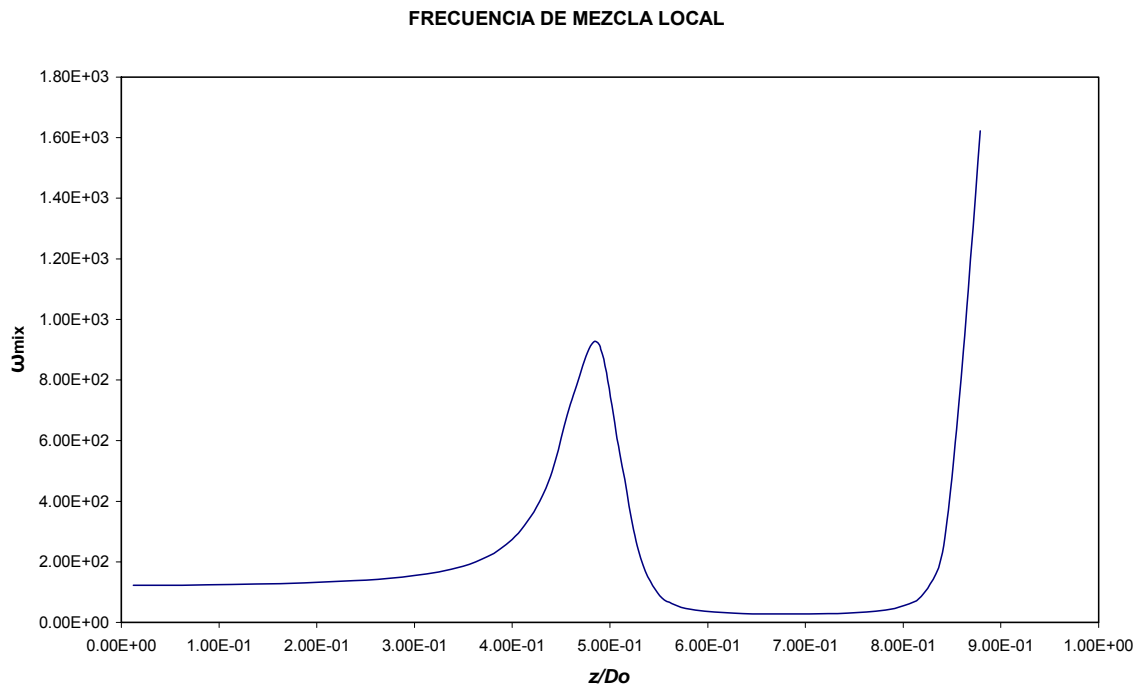


Figura 5.7 Frecuencia de mezcla local.

En la figura 5.7 se puede observar la variación de la frecuencia de mezcla local, la cual es el inverso del tiempo de mezcla local, tanto en la zona de recirculación, zona de reacción y la zona de gases frescos. Esta frecuencia de mezcla es la misma para los tres modelos químicos. En la zona de recirculación se tiene una frecuencia de mezcla aproximada de 170, la cual se mantiene estable, sin embargo comienza a aumentar conforme se acerca a la zona de reacción, que es donde se registra el mayor tiempo de mezcla local, de aproximadamente 1000, para posteriormente disminuir, hasta un valor casi nulo en la zona de flujo; sin embargo al ser la frecuencia el inverso del tiempo se tiene que el tiempo de mezcla es mayor en la zona de recirculación como en la zona de gases frescos, mientras que en la zona de reacción se tienen tiempos muy pequeños debido a que en esta zona reaccionan muy rápido las especies.

El modelo estándar κ - ϵ -RNG usado para representar los efectos de turbulencia en el flujo, no es lo suficientemente sensible con la temperatura de cada modelo químico usado, es por eso que estos no tienen un efecto notable en la aerodinámica del flujo.

Se encuentra que existe sobreestimación de la temperatura la cual se observa en las figuras 5.18, 5.19, 5.20 y 5.21. Esta diferencia puede ser debida a que el modelo ignora pérdidas de energía por radiación.

5.4.4 Especies de concentración mayoritaria. Comparaciones con datos experimentales

La evolución radial de la fracción molar media de CH_4 , CO_2 , H_2O y O_2 se presentan de la figura 5.22 a la 5.33. Las predicciones de las especies químicas de concentración mayoritaria en la zona de recirculación tienen valores medios próximos correspondientes del equilibrio y presentan una buena aproximación a los datos experimentales. En las figuras 5.22, 5.23, 5.24 y 5.25 correspondientes al CH_4 se tienen valores satisfactorios en la zona de recirculación, con niveles de casi cero ppm, que es el valor de equilibrio químico, de igual forma se tienen valores satisfactorios en la zona de reacción; los modelos de 5 y 7 pasos de reacción presentan resultados muy aproximados a los valores experimentales, mientras que el modelo de 9 pasos tiene un gradiente menor en la zona de reacción. Esto se debe a que el modelo de 9 pasos predice menores temperaturas que hacen que la tasa de consumo del CH_4 sea menos rápida que lo de los otros modelos. Y se da justamente en la zona de reacción por que es ahí donde se lleva a cabo principalmente la reacción.

En la predicción del CO_2 se obtienen buenas aproximaciones; en el modelo de 9 pasos encontramos una mayor variación subestimando la cantidad de CO_2 en la zona de recirculación como en la zona de reacción y se debe también al motivo expuesto anteriormente. En las figuras 5.26, 5.27, 5.28 y 5.29 se puede observar que los valores obtenidos son satisfactorios aproximándose al valor de equilibrio (0.058 ppm).

Los resultados obtenidos para el H_2O son muy aproximados a los experimentales, solo habiendo una pequeña diferencia en la estación $z/D_0 = 1.0$, en la cual los modelos sobreestiman a los valores experimentales, pero al acercarse a la zona de reacción el modelo de 9 pasos disminuye sus valores antes que los modelos de 5 y 7 pasos.

Los tres modelos químicos reducidos predicen valores próximos a los del equilibrio en la zona de recirculación. En la zona de reacción, los gradientes de CH_4 , CO_2 , H_2O y O_2 se predicen adecuadamente en los tres modelos químicos reducidos. El modelo de nueve pasos sobreestima los valores, principalmente en la zona de reacción y en las estaciones $z/D_0=0.6$ y $z/D_0=1.0$.

5.4.5 Especies de concentración minoritaria. Comparaciones con datos experimentales

De la figura 5.34 a la 5.45 se presentan los perfiles radiales de la fracción molar media de CO , OH y NO . Las predicciones de CO de los tres modelos químicos para la zona de recirculación en estaciones axiales $z/D<0.4$ presentan valores cercanos a los de equilibrio (7ppm), sin embargo esto no es consistente con los datos experimentales. Para estaciones axiales $z/D>0.4$, el modelo de 9 pasos de reacción predice valores mayores a los del equilibrio y próximos a los experimentales.

En la zona de cortadura, los tres modelos químicos sobre estiman los niveles de CO . Se puede observar que en la zona de reacción existe la mayor cantidad de CO , el cual posteriormente se va transformando en CO_2 en la zona de recirculación, debido a las altas temperaturas y a las reacciones con los radicales de CH_x .

En la región de recirculación, las predicciones de OH están sobreestimadas con respecto a los datos experimentales; sin embargo el modelo de cinco pasos predice valores próximos a 200 ppm (valor de equilibrio), mientras que los modelos de siete y nueve pasos de reacción presentan valores entre 600 y 800 ppm. La tendencia del OH hacia valores de superequilibrio se predicen correctamente en la zona de reacción: sin embargo, los valores calculados en los picos se sobreestiman. Dada la dificultad que presenta la predicción de OH , en parte debido a sus pequeñas escalas temporales, los resultados se consideran aceptables.

La forma de los perfiles de NO se predice correctamente, y en las primeras estaciones de la zona de recirculación el NO se subestima en 5 ppm en los tres modelos, los cuales son muy similares en sus resultados, solo el modelo de 9 pasos sobreestima más los valores en las estaciones $z/D_0 = 0.6$ y 1.0 . Aún con esta

diferencia con los datos experimentales, las predicciones de NO se pueden considerar como aceptables dados bajos niveles que presentan en el flujo (del orden de unas cuantas ppm), y la simplicidad del modelo químico que representa todas las rutas de formación de NO .

Además, las medidas experimentales pueden estar afectadas, según reportan los autores [100], por un error de 2 ó 3 ppm en exceso.

Existen solo unas ligeras diferencias entre los modelos de cinco y nueve pasos, principalmente en las estaciones $z/D_0 = 0.6$ y $z/D_0 = 1.0$ debido a la diferencia de temperaturas predichas para cada modelo en particular.

5.4.6 Modificaciones en la simulación y conclusiones.

Para estudiar el efecto en las predicciones se hace notar que en esta tesis los cambios que se introducen son en el número de paso de la reacción en los modelos, tomando en cuenta que fueron modelos de cinco, siete y nueve pasos, de los que anteriormente solo eran de uno, dos y cuatro pasos.

Las comparaciones detalladas entre predicciones y datos experimentales para estas especies permiten establecer las siguientes conclusiones:

- CO . Las concentraciones de la zona de recirculación se subestiman por los modelos de 5 y 7 pasos. El modelo de 9 pasos de reacción predice valores próximos a los experimentales en esta zona de recirculación. En la zona de reacción se predicen bien los niveles máximos que alcanza el CO .
- OH . Las predicciones presentan una buena aproximación a los datos experimentales en la zona de recirculación. Los modelos de 7 y 9 pasos de reacción predicen valores mayores que el de 5 pasos y los experimentales. En la zona de reacción los valores calculados en los picos se sobreestiman.
- NO . En las primeras estaciones de la zona de recirculación, los niveles se subestiman aproximadamente en 5 ppm, sin embargo son aceptables los resultados debido a sus bajos niveles de éste en el flujo.

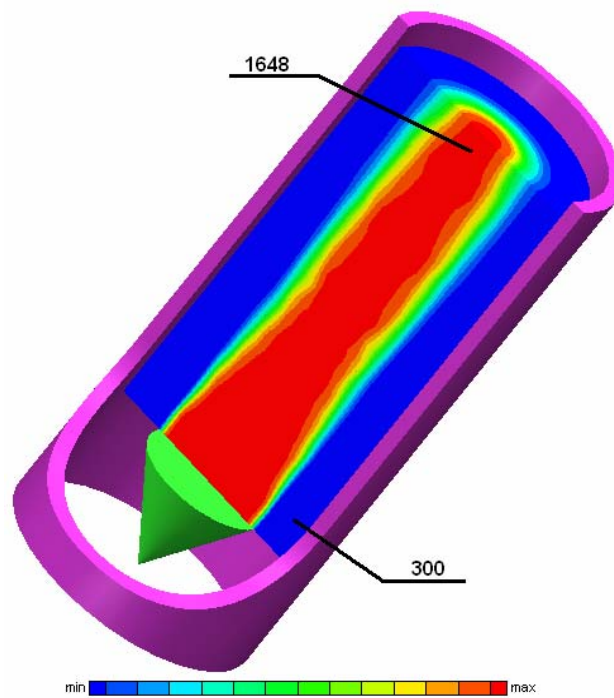


Figura 5.8 Contornos de Temperatura [K]

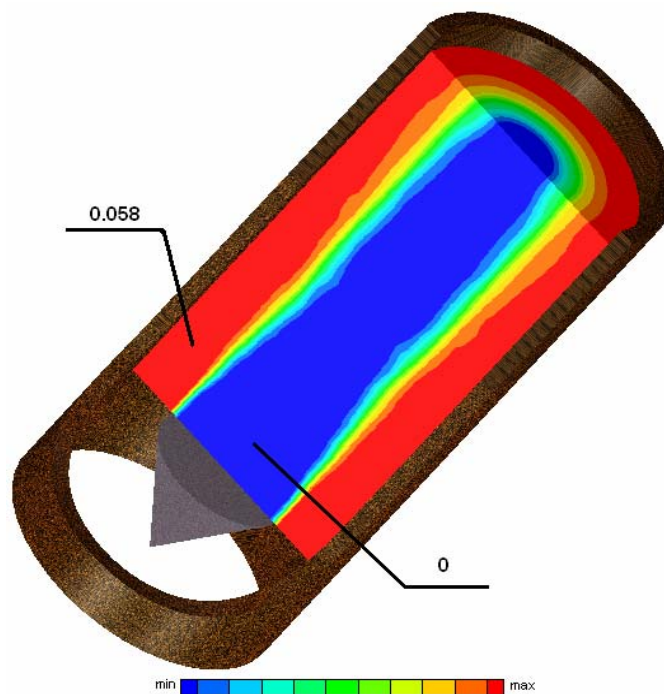


Figura 5.9 Contornos de fracción molar media de CH₄ (ppm)

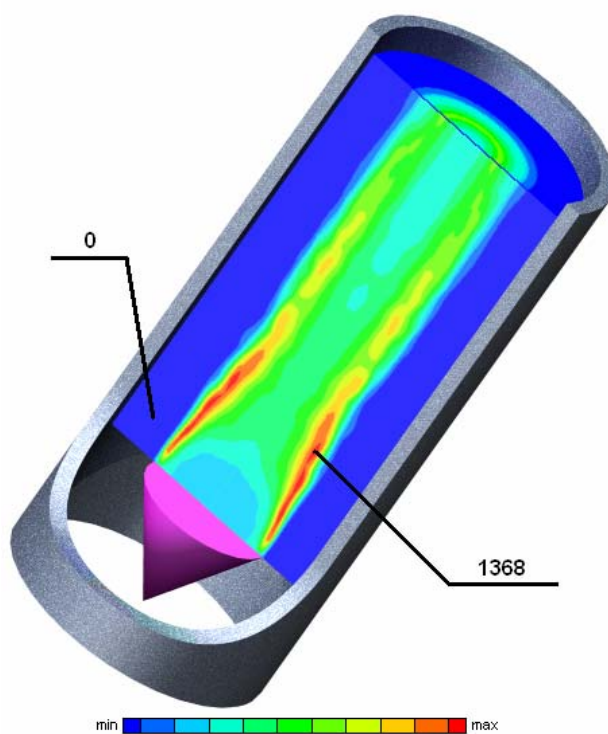


Figura 5.10 Contornos de fracción molar media de OH (ppm)

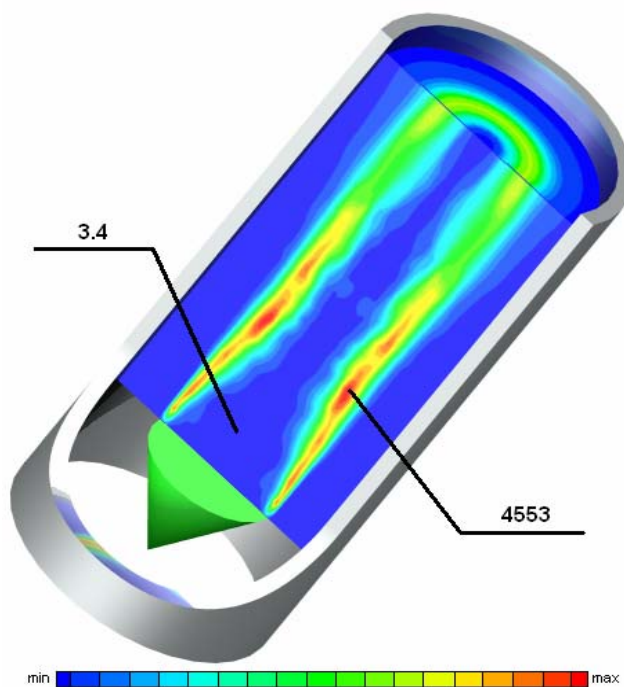


Figura 5.11 Contornos de fracción molar media de CO (ppm)

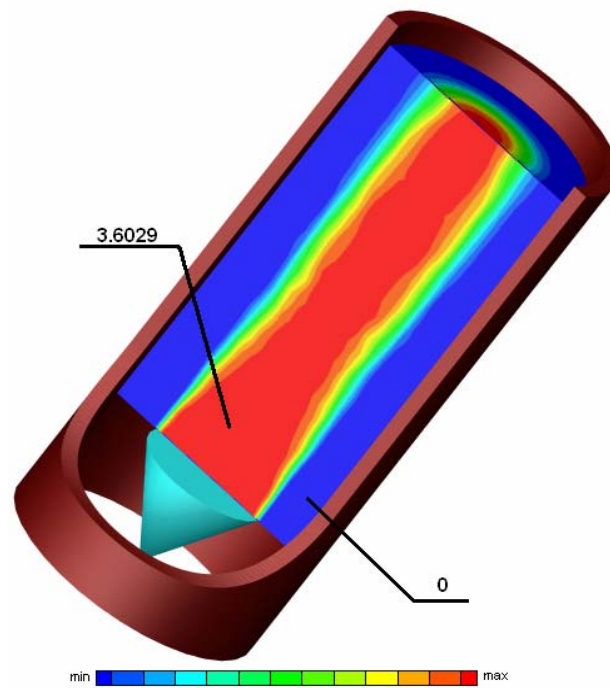


Figura 5.12 Contornos de fracción molar media NO (ppm)

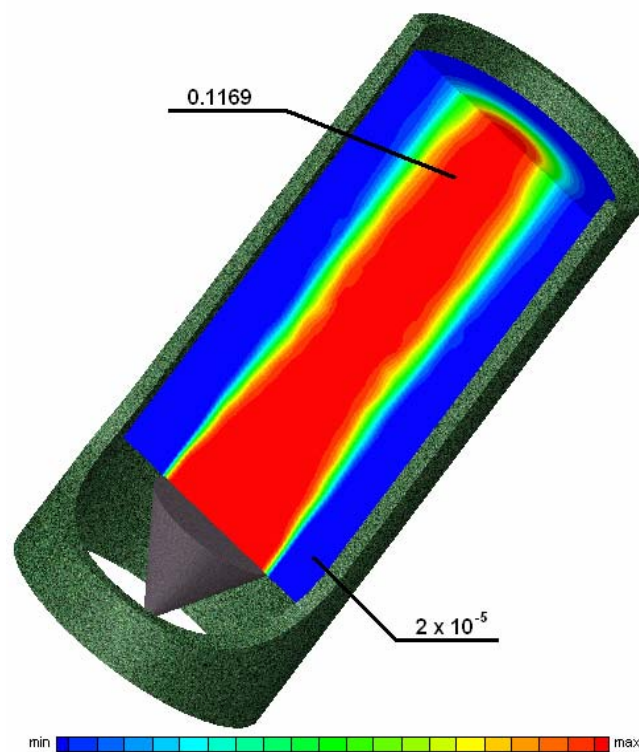


Figura 5.13 Contornos de fracción molar media de H₂O

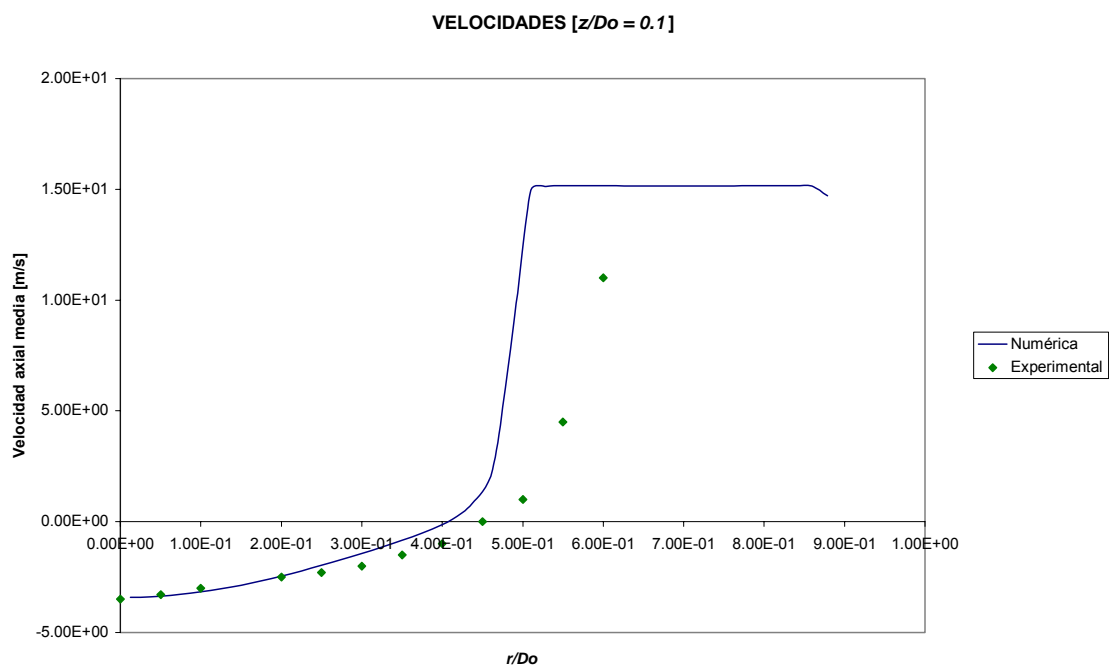


Figura 5.14 Perfiles radiales de velocidad en $z/D_o = 0.1$, para los tres modelos de reacción.

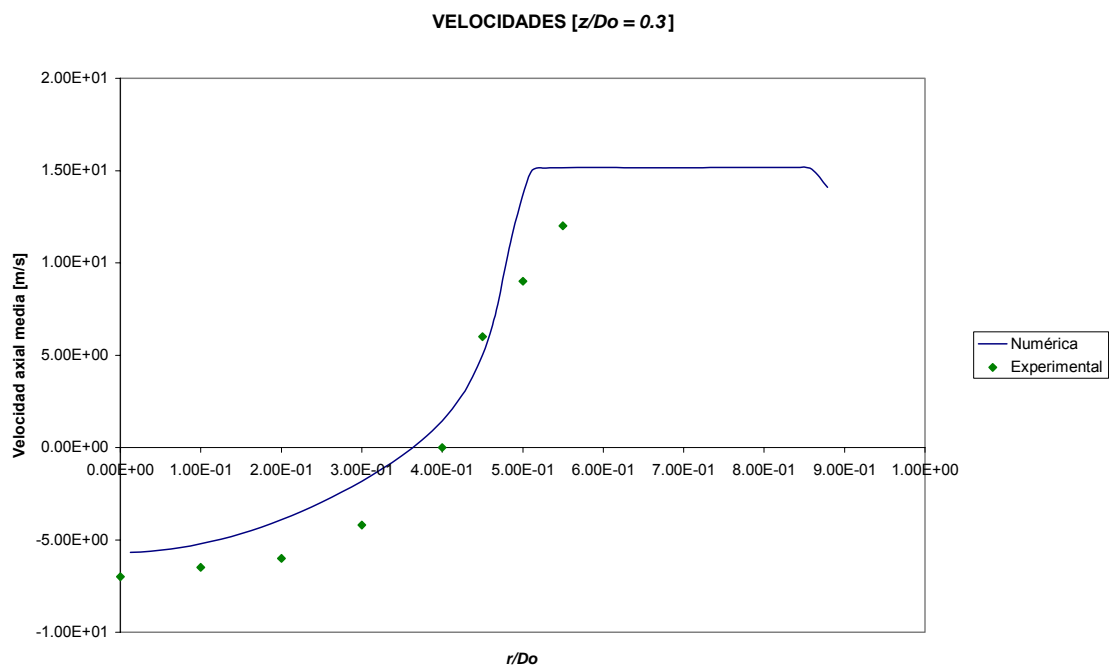


Figura 5.15 Perfiles radiales de velocidad en $z/D_o = 0.3$, para los tres modelos de reacción.

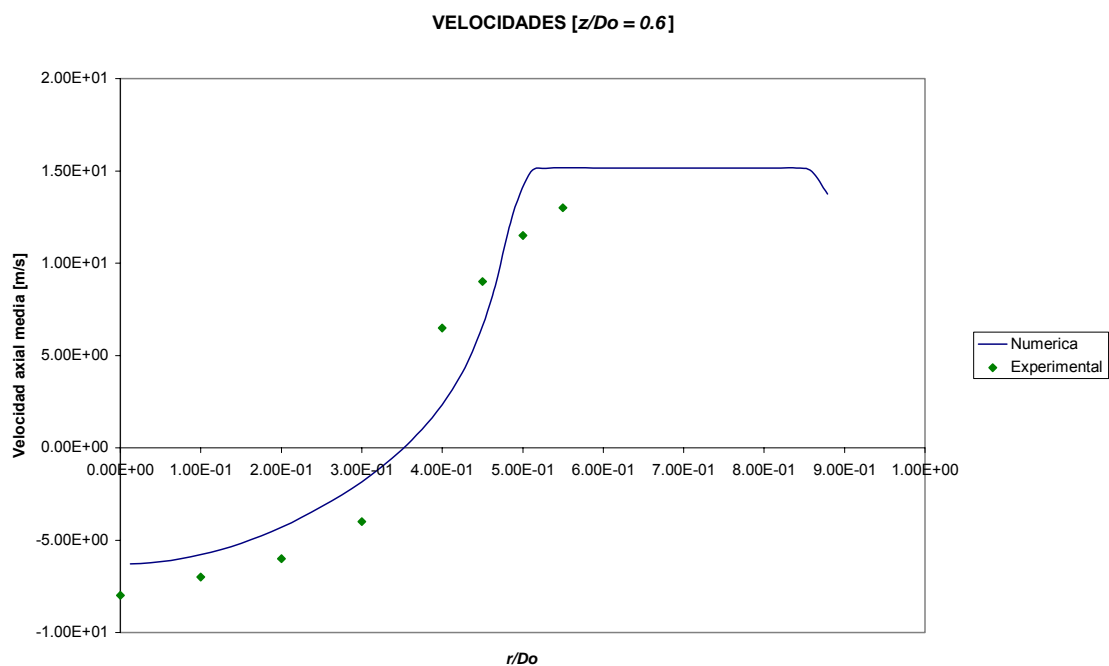


Figura 5.16 Perfiles radiales de velocidad en $z/D_o = 0.6$, para los tres modelos de reacción.

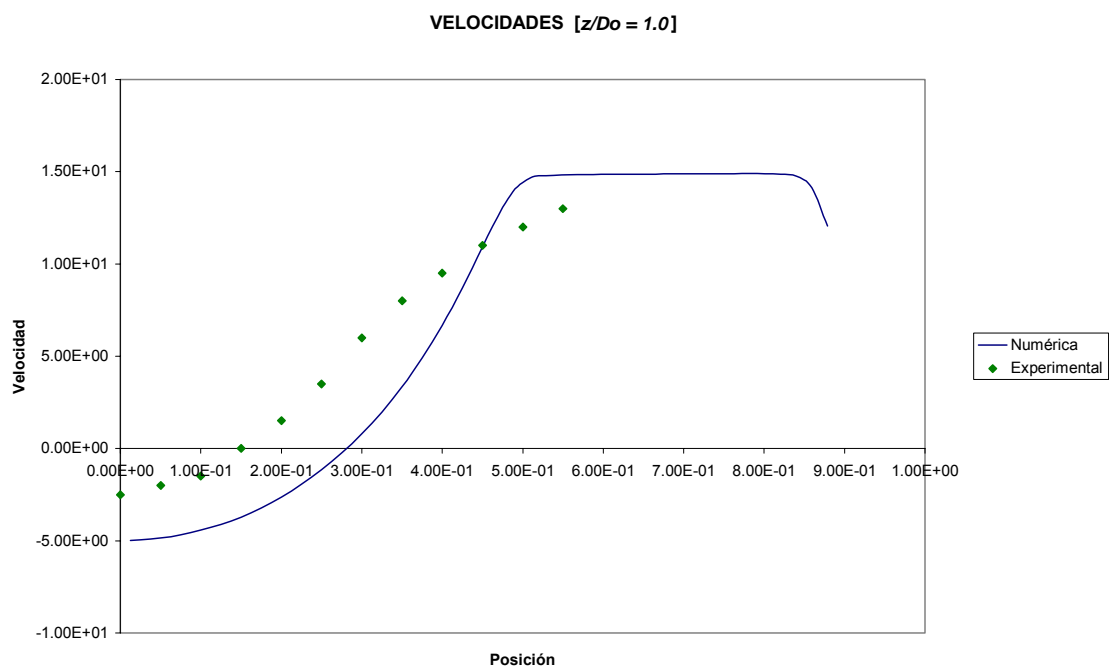


Figura 5.17 Perfiles radiales de velocidad en $z/D_o = 1.0$, para los tres modelos de reacción.

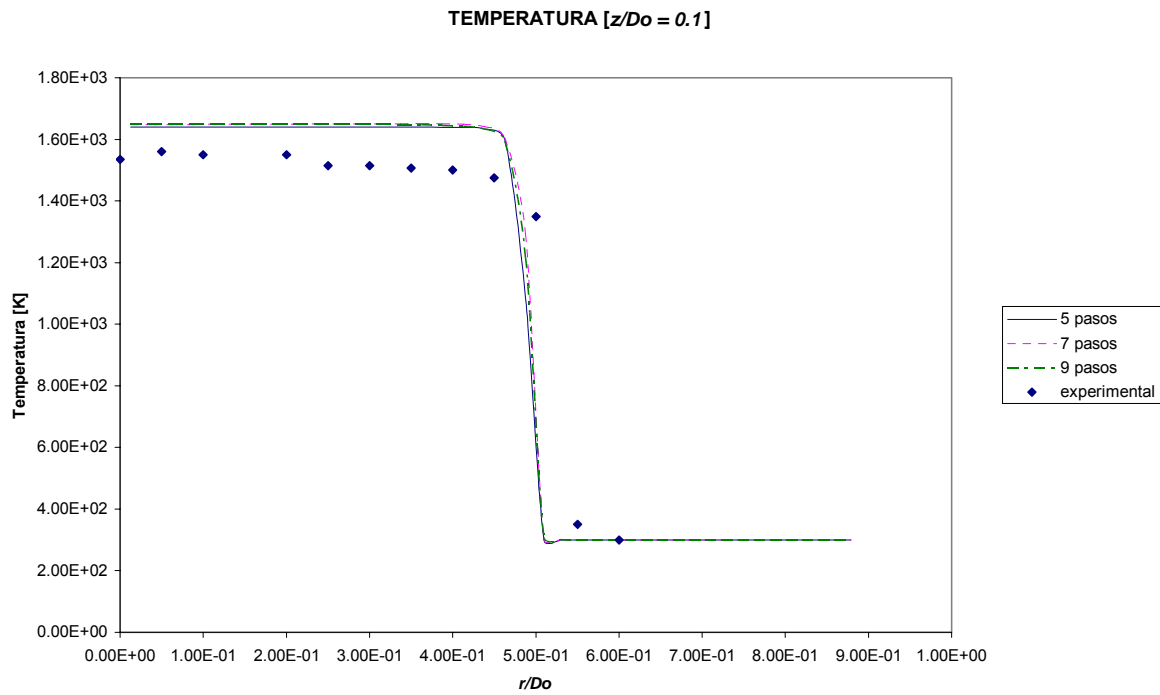


Figura 5.18 Perfiles radiales de temperatura en $z/D_o = 0.1$. Caso base.

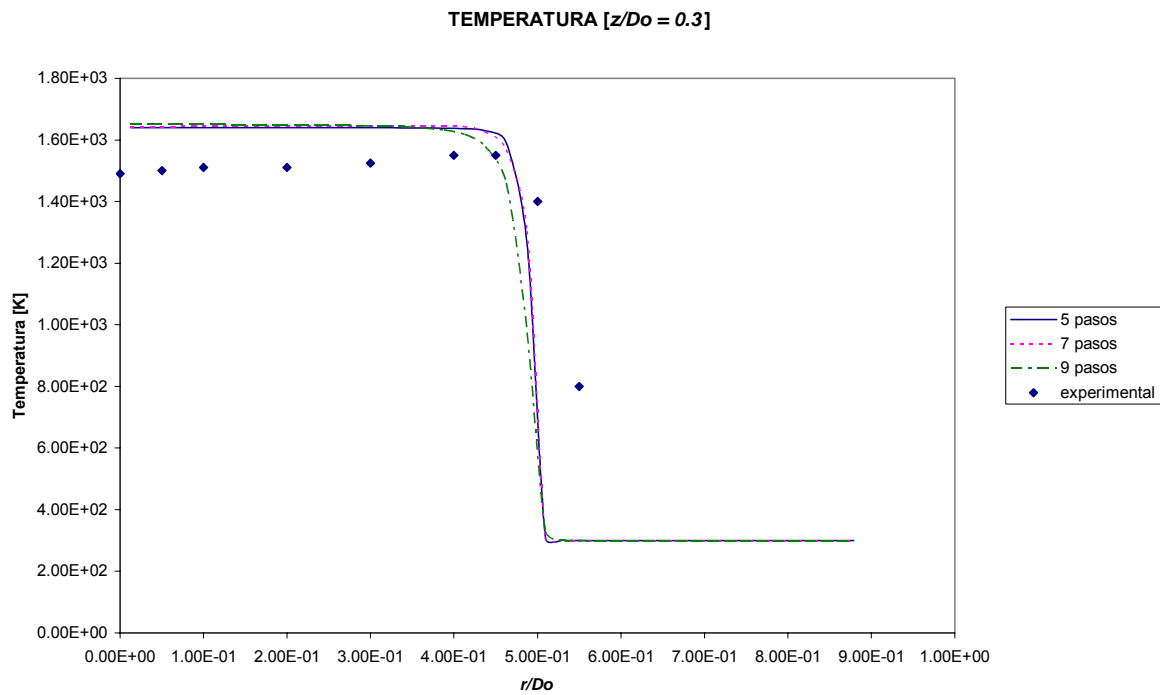


Figura 5.19 Perfiles radiales de temperatura en $z/D_o = 0.3$. Caso base.

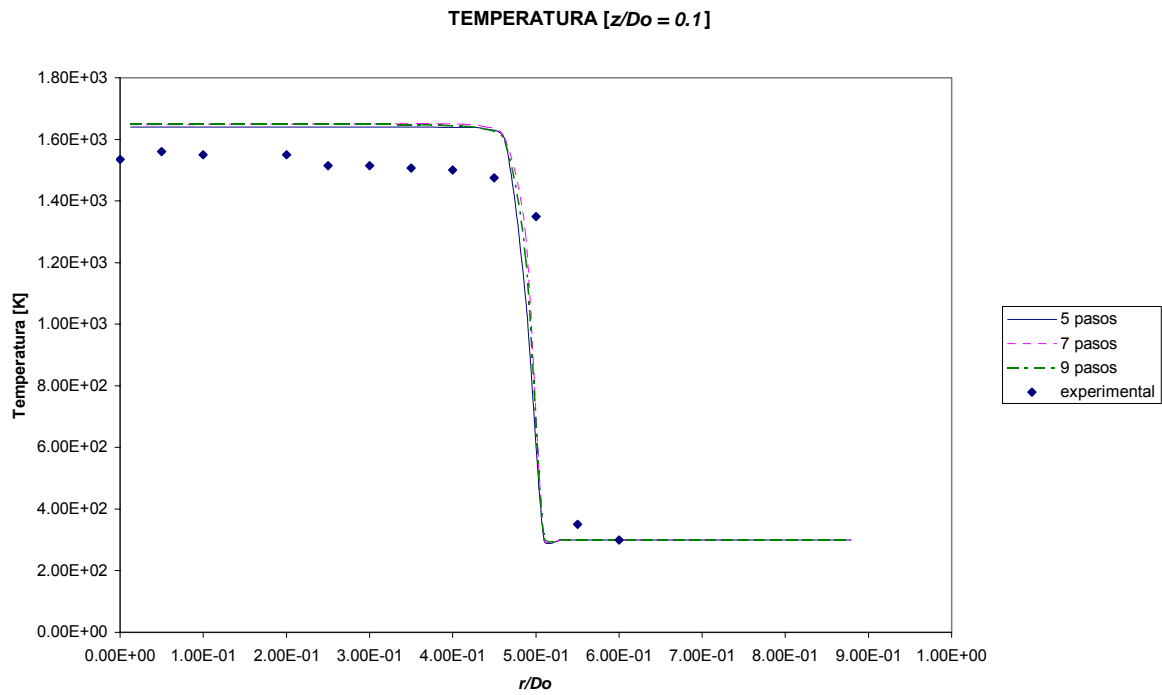


Figura 5.18 Perfiles radiales de temperatura en $z/D_o = 0.1$. Caso base.

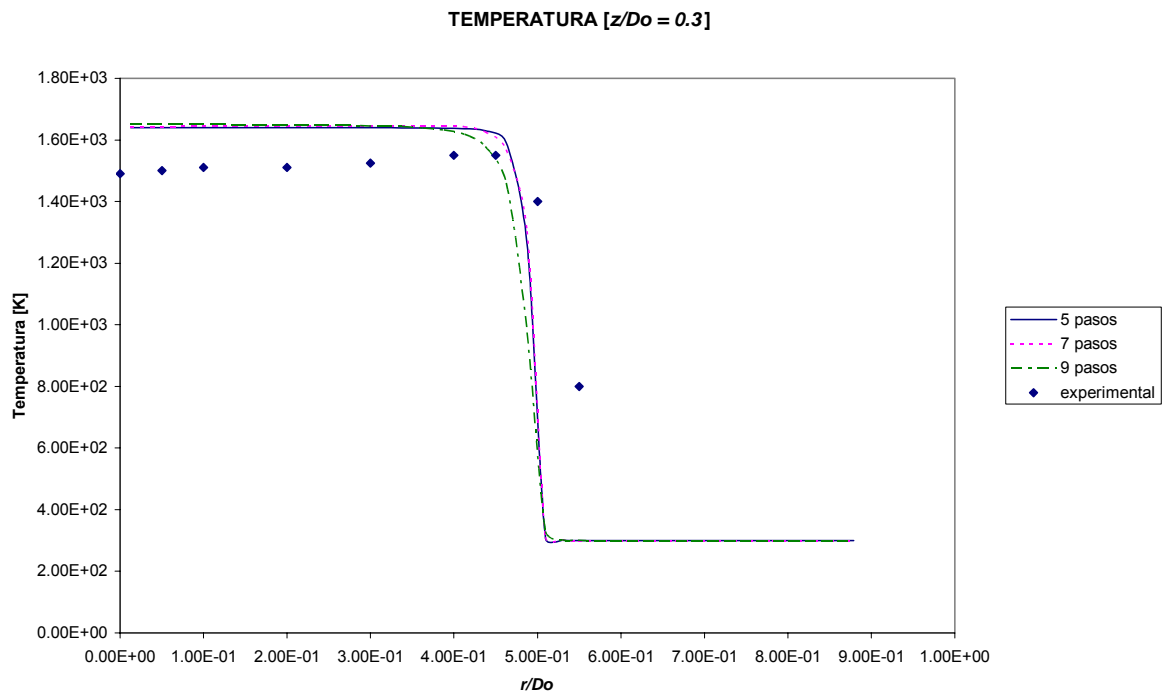


Figura 5.19 Perfiles radiales de temperatura en $z/D_o = 0.3$. Caso base.

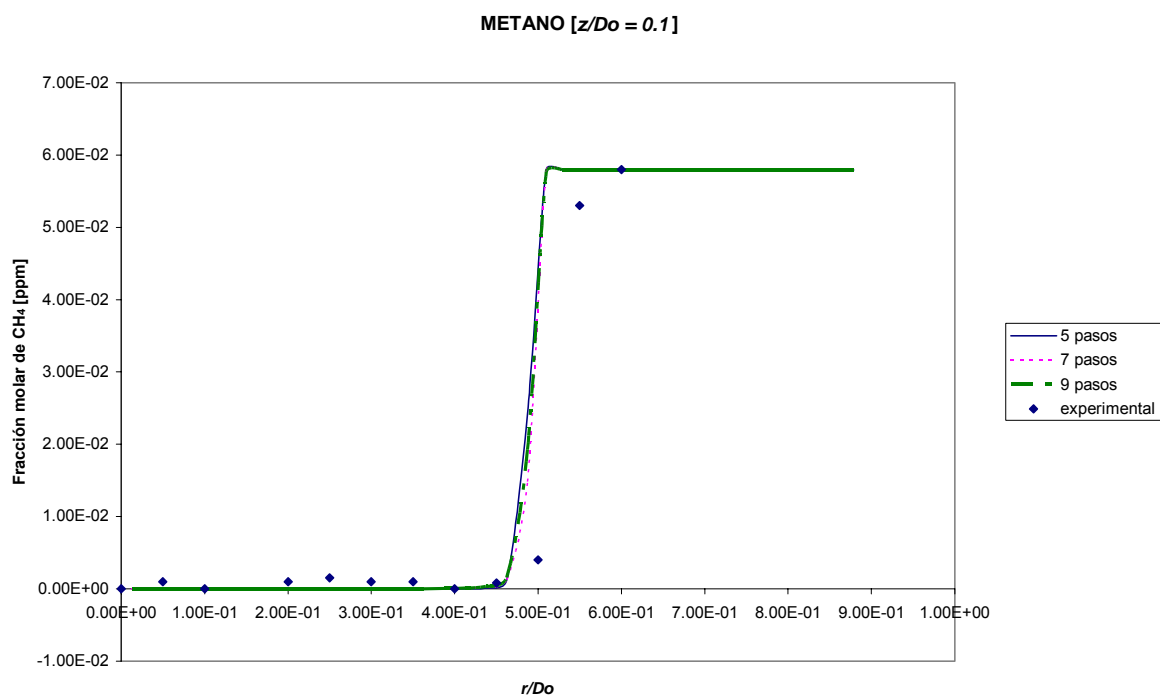


Figura 5.22 Perfiles radiales de fracción molar de CH₄ en $z/D_o = 0.1$. Caso base.

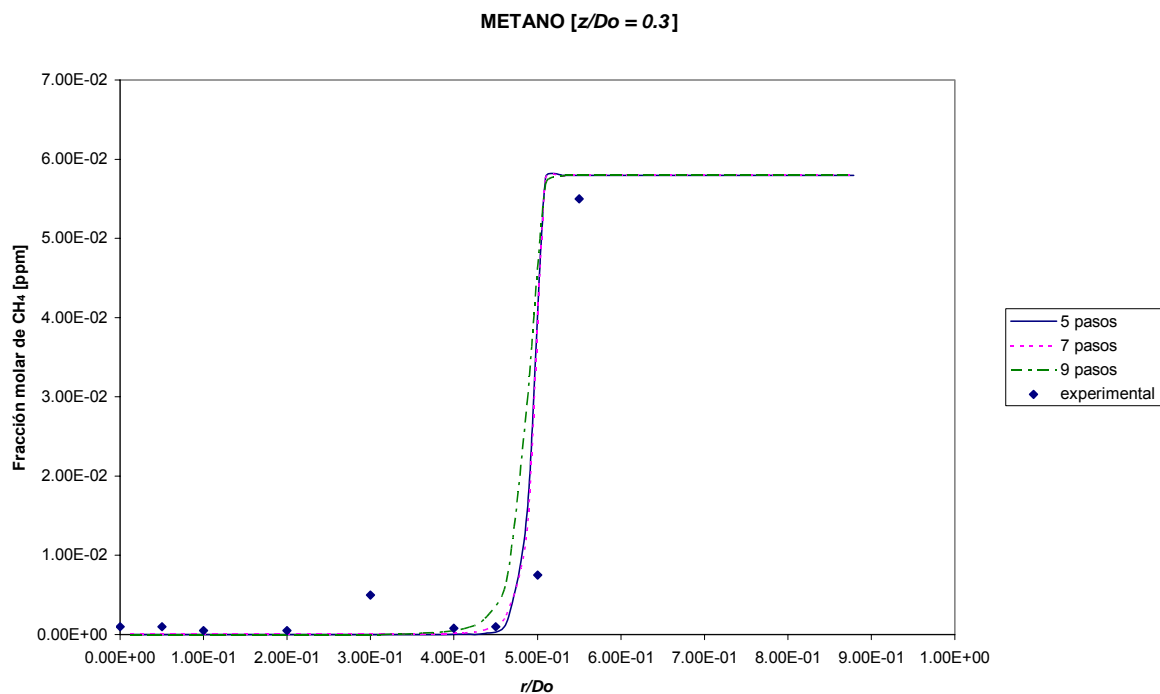


Figura 5.23 Perfiles radiales de fracción molar de CH₄ en $z/D_o = 0.3$. Caso base.

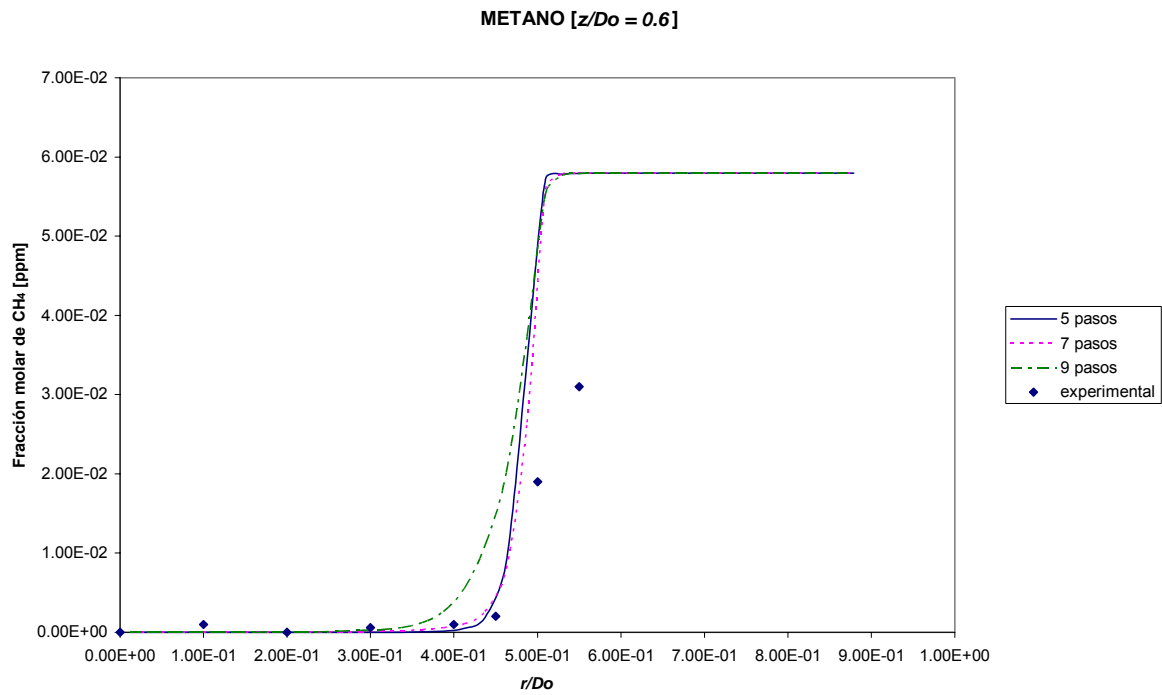


Figura 5.24 Perfiles radiales de fracción molar de CH₄ en $z/D_o = 0.6$. Caso base.

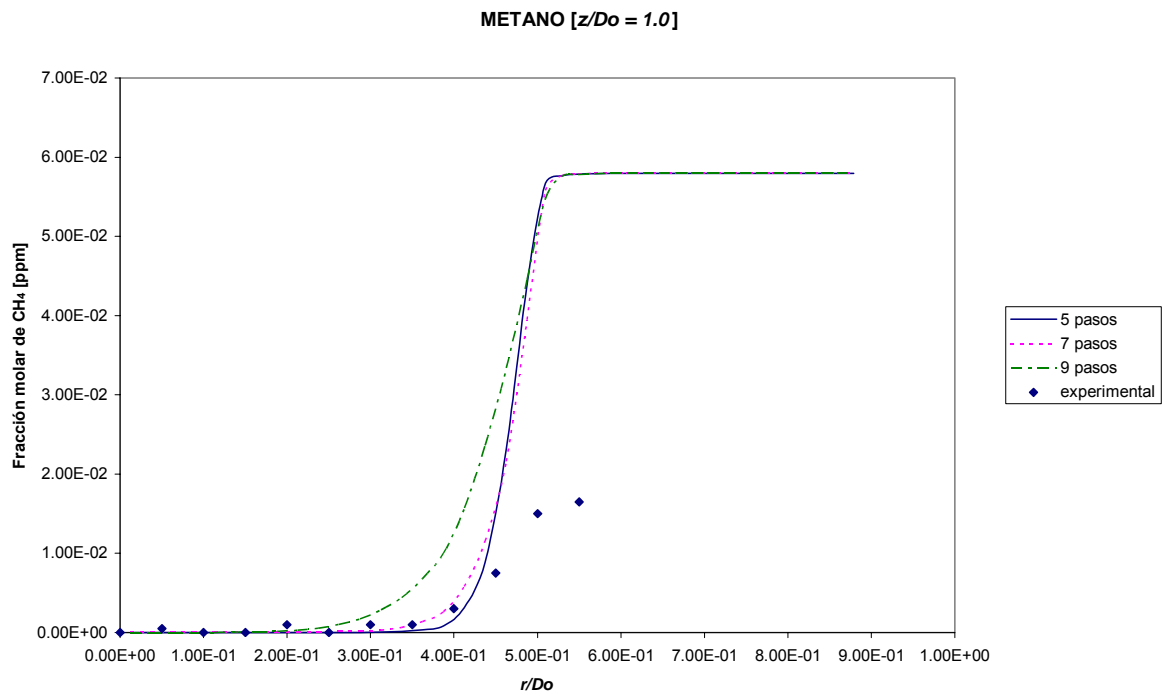


Figura 5.25 Perfiles radiales de fracción molar de CH₄ en $z/D_o = 1.0$. Caso base.

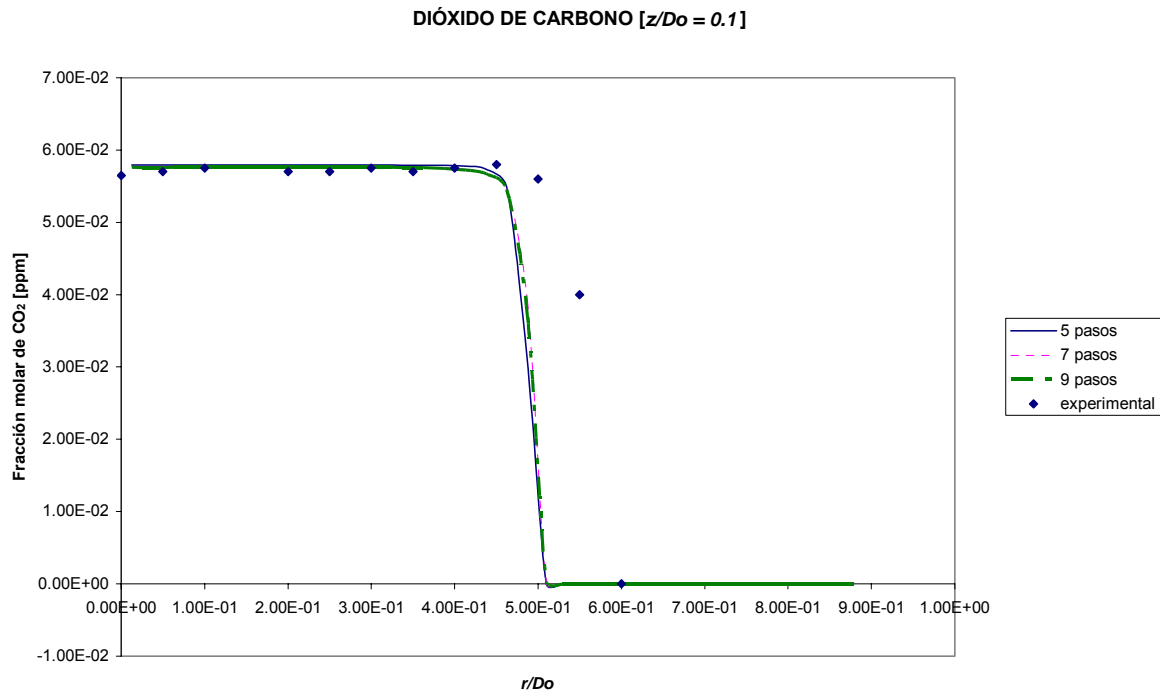


Figura 5.26 Perfiles radiales de fracción molar de CO₂ en $z/D_0 = 0.1$. Caso base.

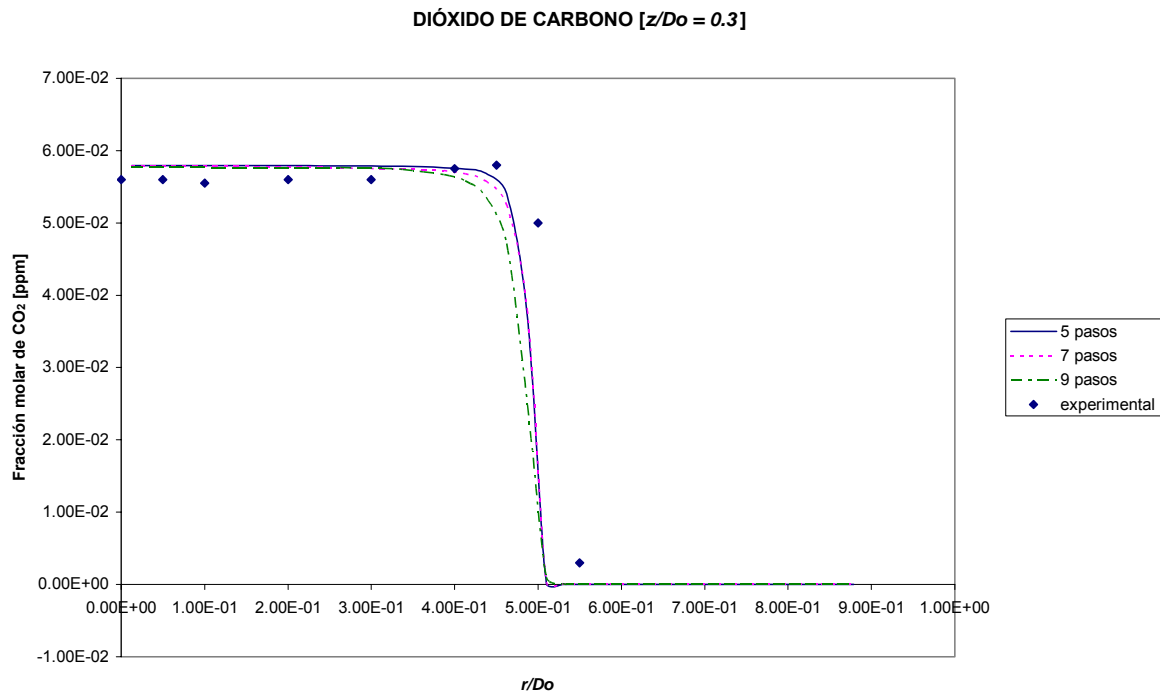


Figura 5.27 Perfiles radiales de fracción molar de CO₂ en $z/D_0 = 0.3$. Caso base.

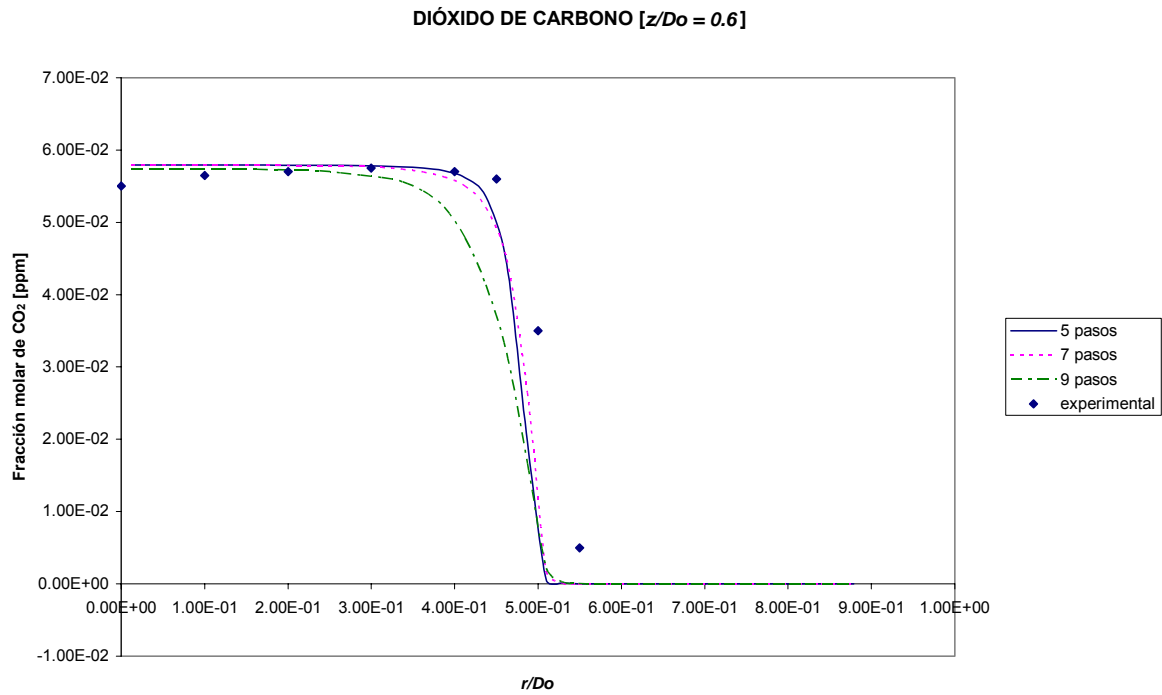


Figura 5.28 Perfiles radiales de fracción molar de CO₂ en $z/D_0 = 0.6$. Caso base.

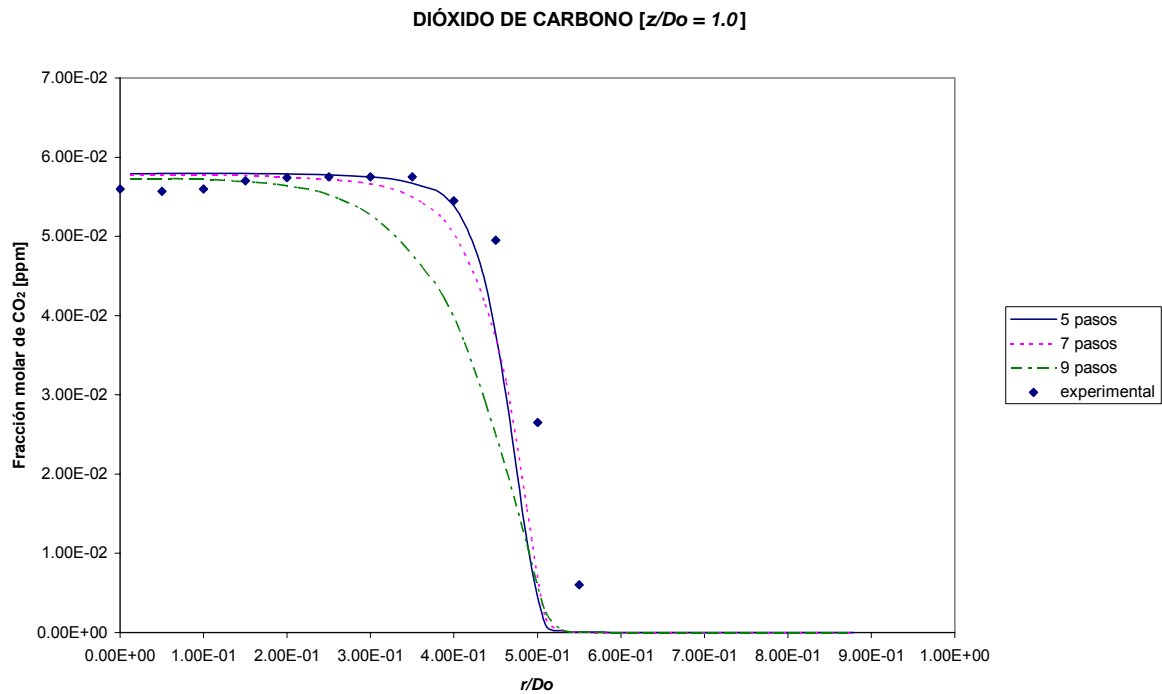


Figura 5.29 Perfiles radiales de fracción molar de CO₂ en $z/D_0 = 1.0$. Caso base.

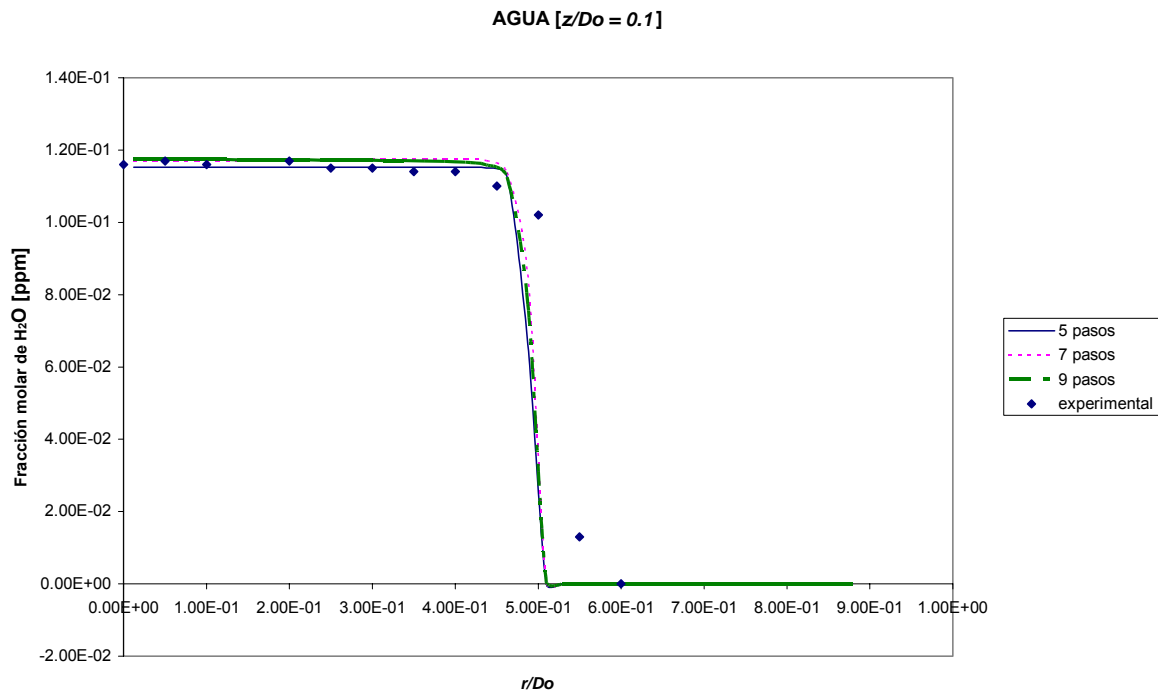


Figura 5.30 Perfiles radiales de fracción molar de H_2O en $z/D_o = 0.1$. Caso base.

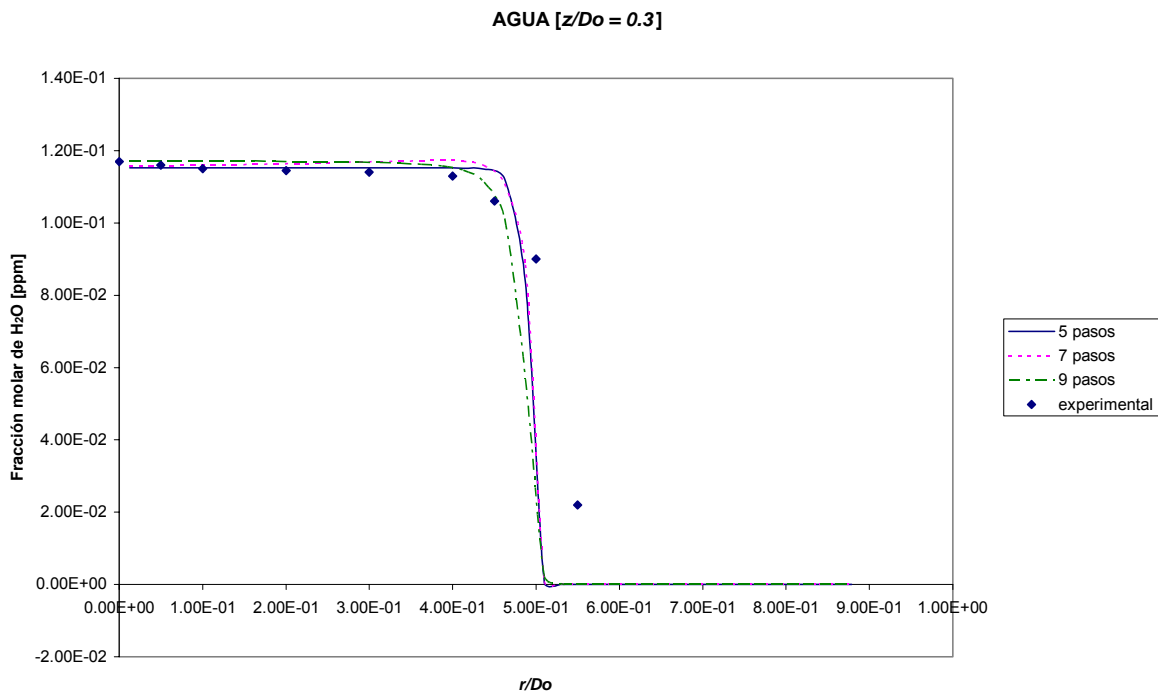


Figura 5.31 Perfiles radiales de fracción molar de H_2O en $z/D_o = 0.3$. Caso base.

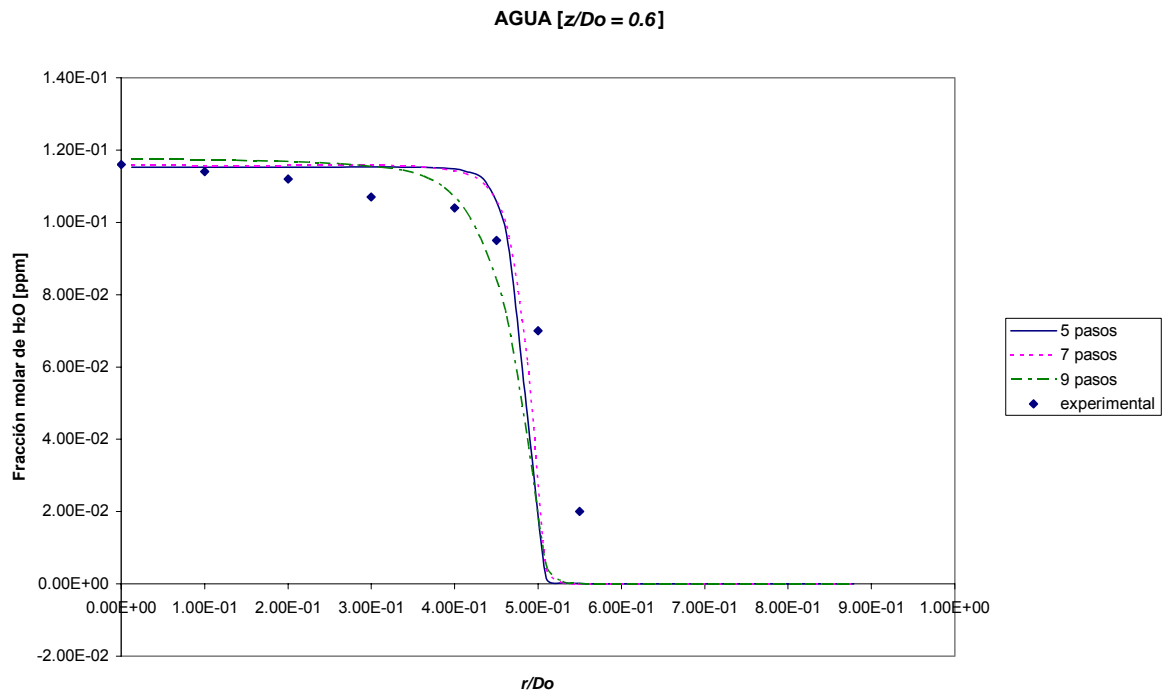


Figura 5.32 Perfiles radiales de fracción molar de H_2O en $z/D_0 = 0.6$. Caso base.

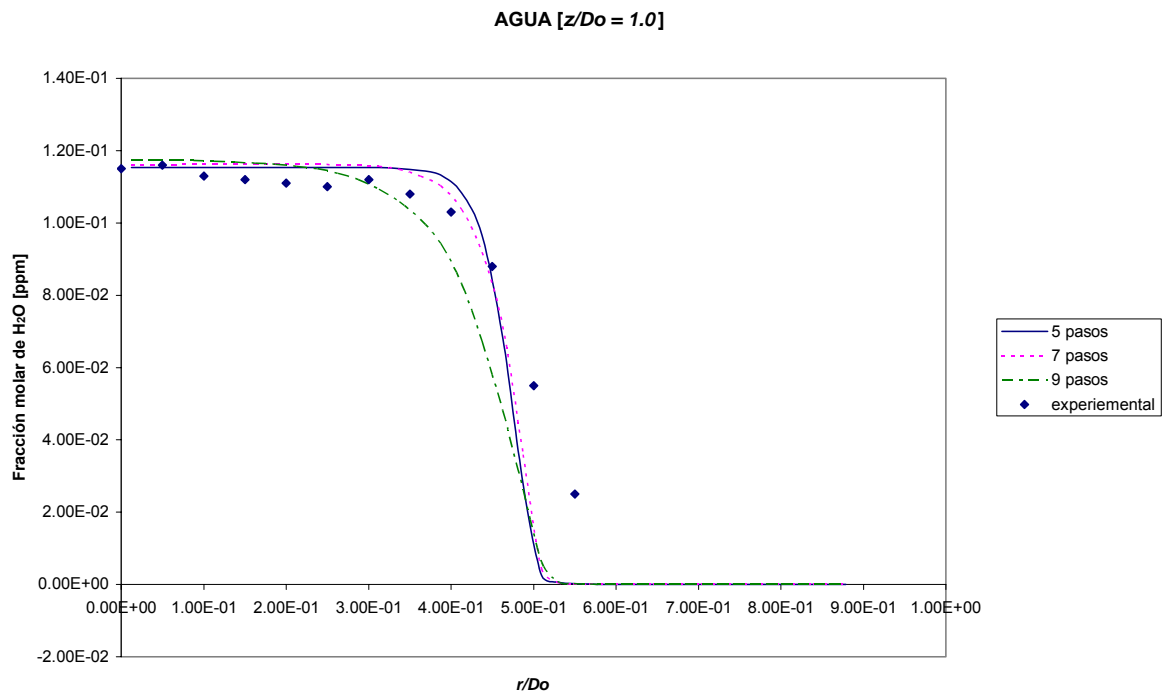


Figura 5.33 Perfiles radiales de fracción molar de H_2O en $z/D_0 = 1.0$. Caso base.

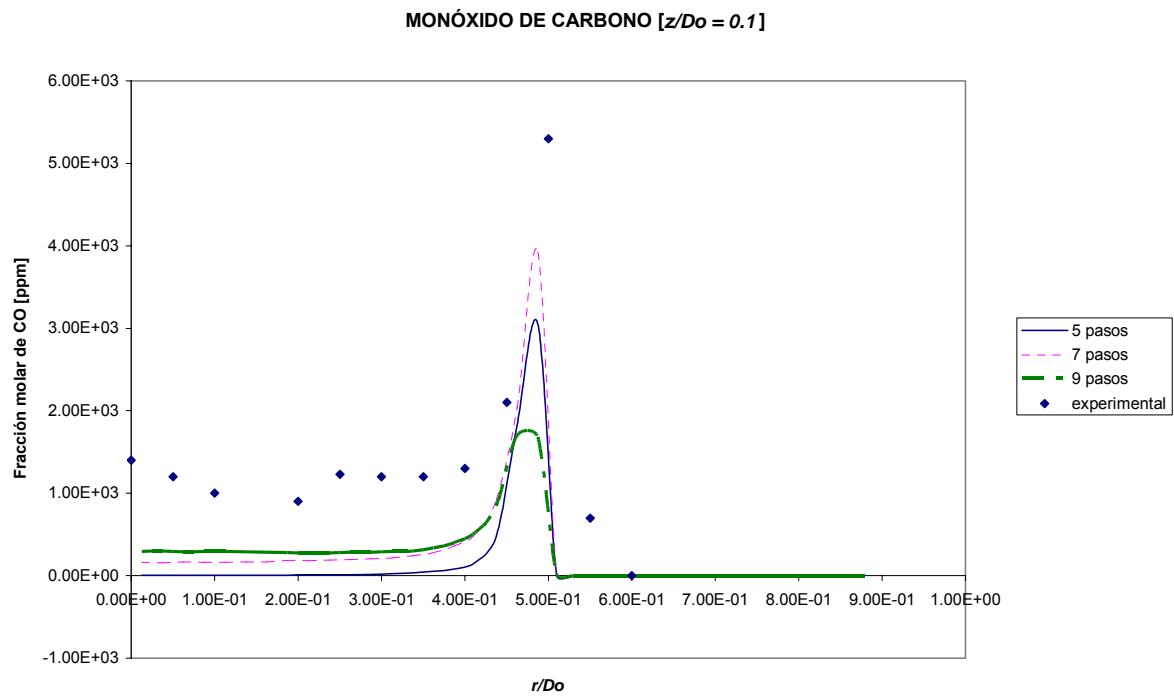


Figura 5.34 Perfiles radiales de fracción molar de CO en $z/D_0 = 0.1$. Caso base.

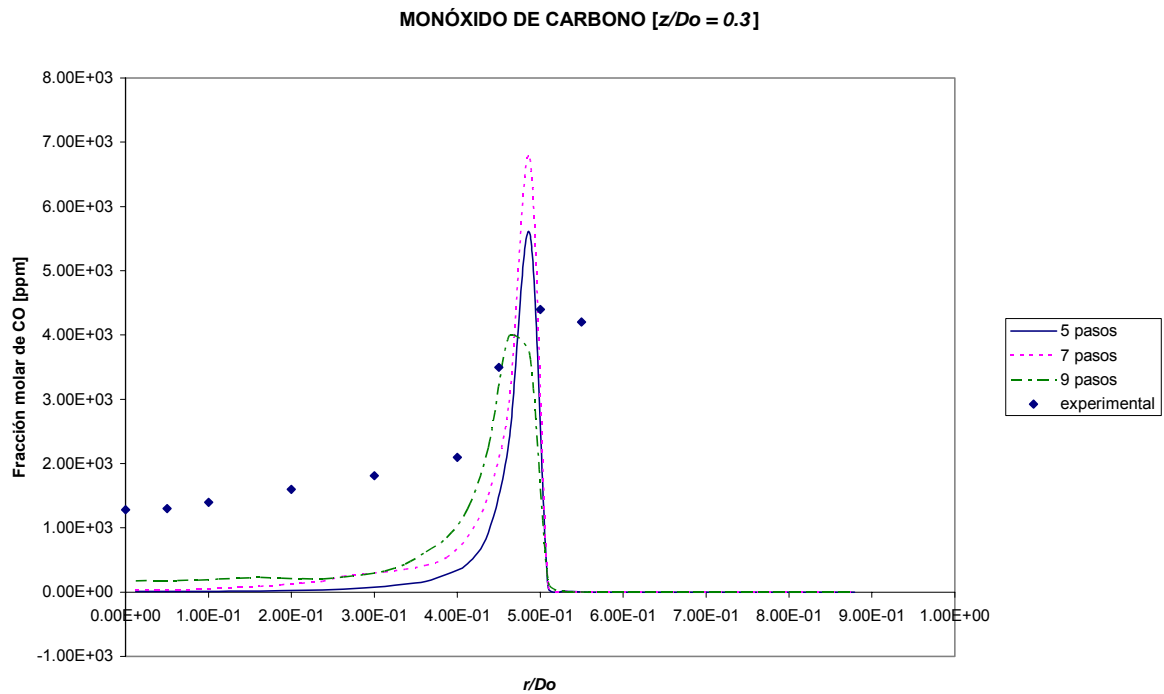


Figura 5.35 Perfiles radiales de fracción molar de CO en $z/D_0 = 0.3$. Caso base.

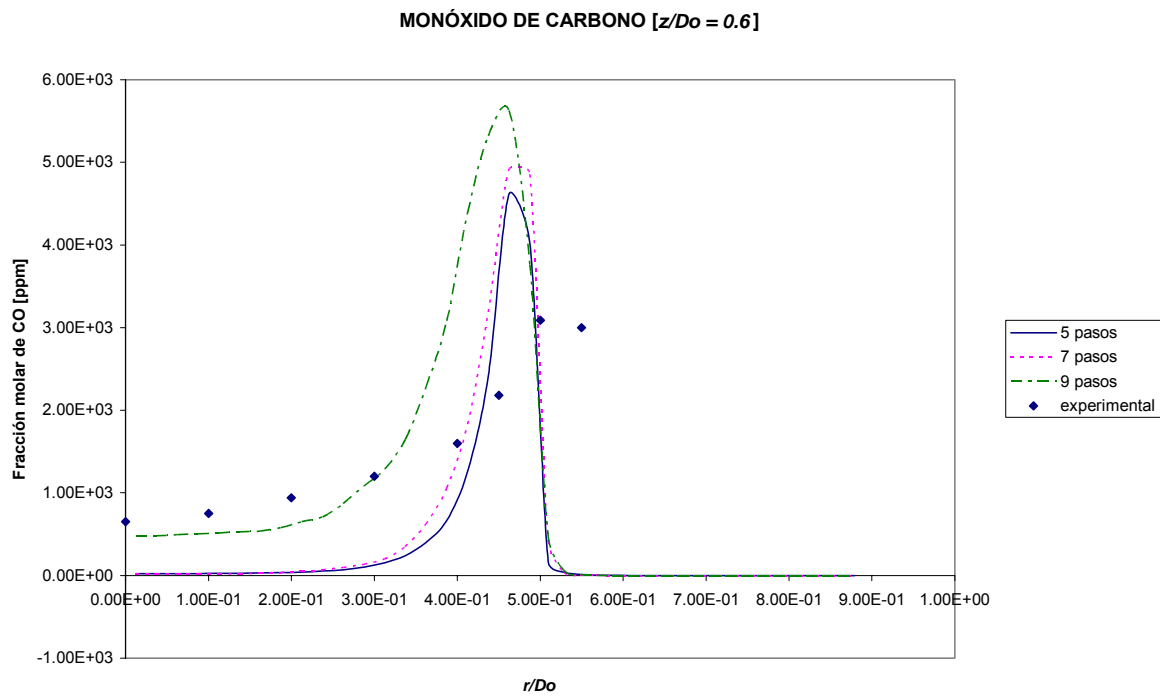


Figura 5.36 Perfiles radiales de fracción molar de CO en $z/D_0 = 0.6$. Caso base.

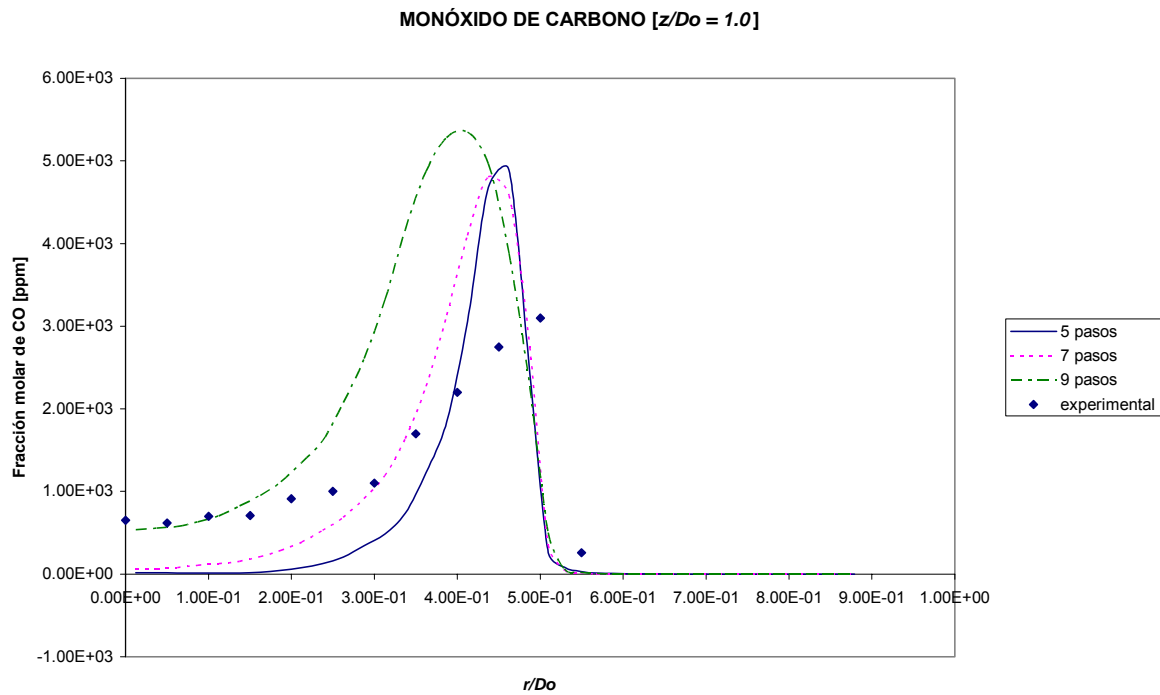


Figura 5.37 Perfiles radiales de fracción molar de CO en $z/D_0 = 1.0$. Caso base.

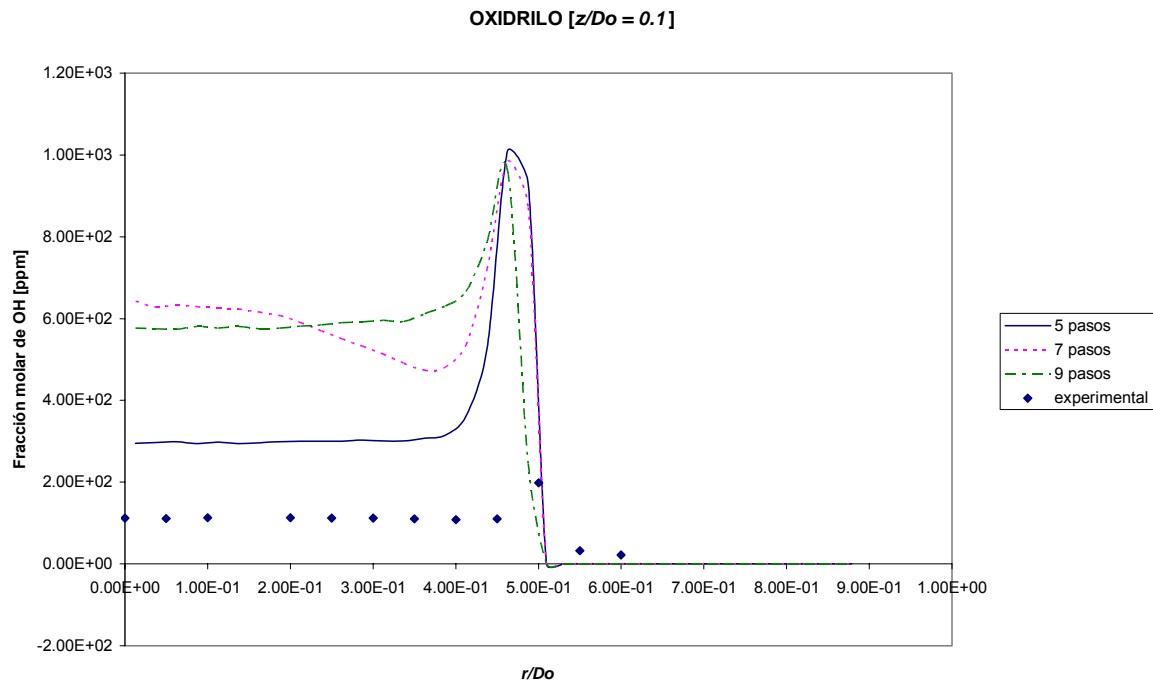


Figura 5.38 Perfiles radiales de fracción molar de OH en $z/D_o = 0.1$. Caso base.

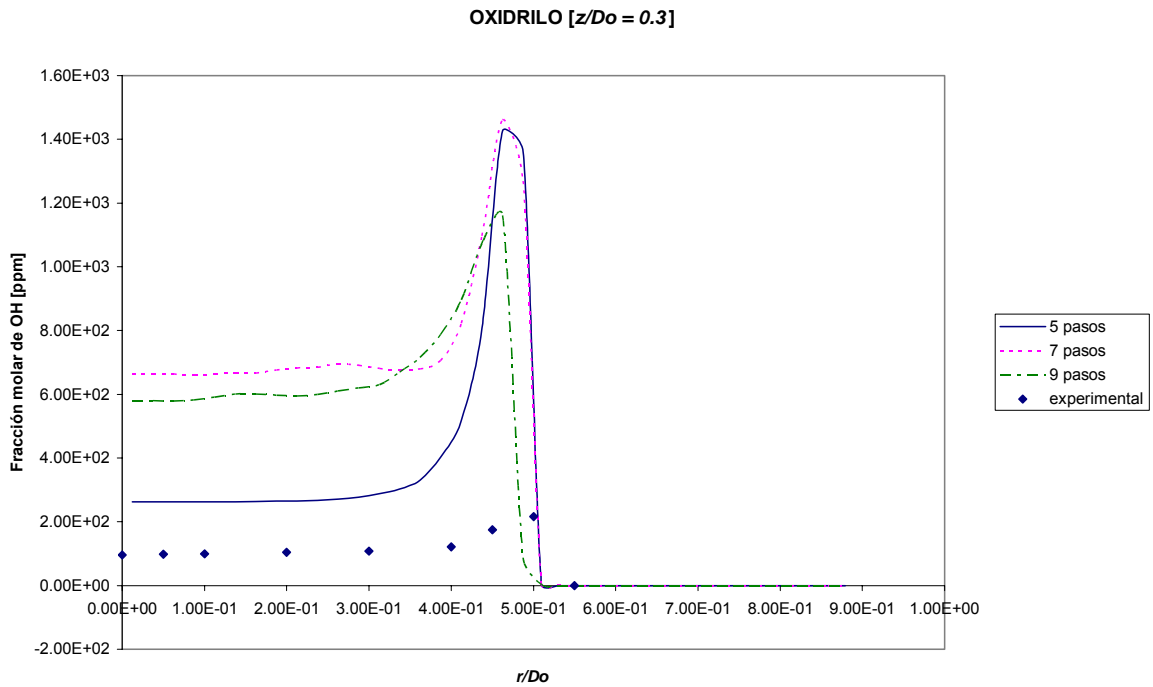


Figura 5.39 Perfiles radiales de fracción molar de OH en $z/D_o = 0.3$. Caso base.

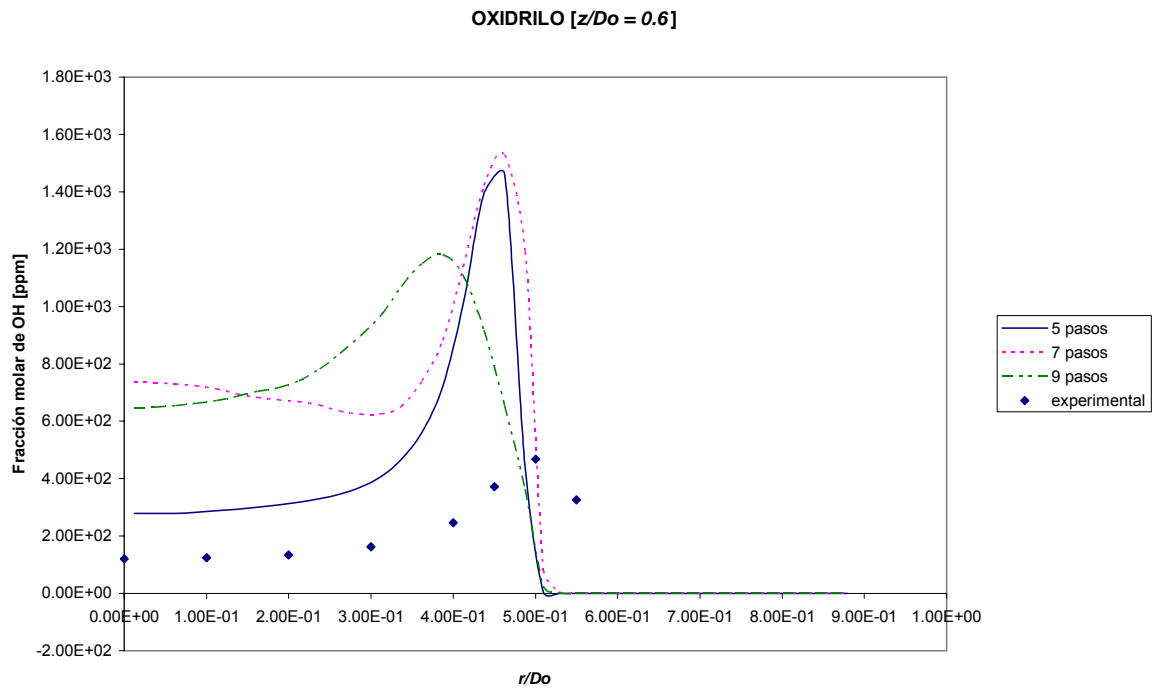


Figura 5.40 Perfiles radiales de fracción molar de OH en $z/D_o = 0.6$. Caso base.

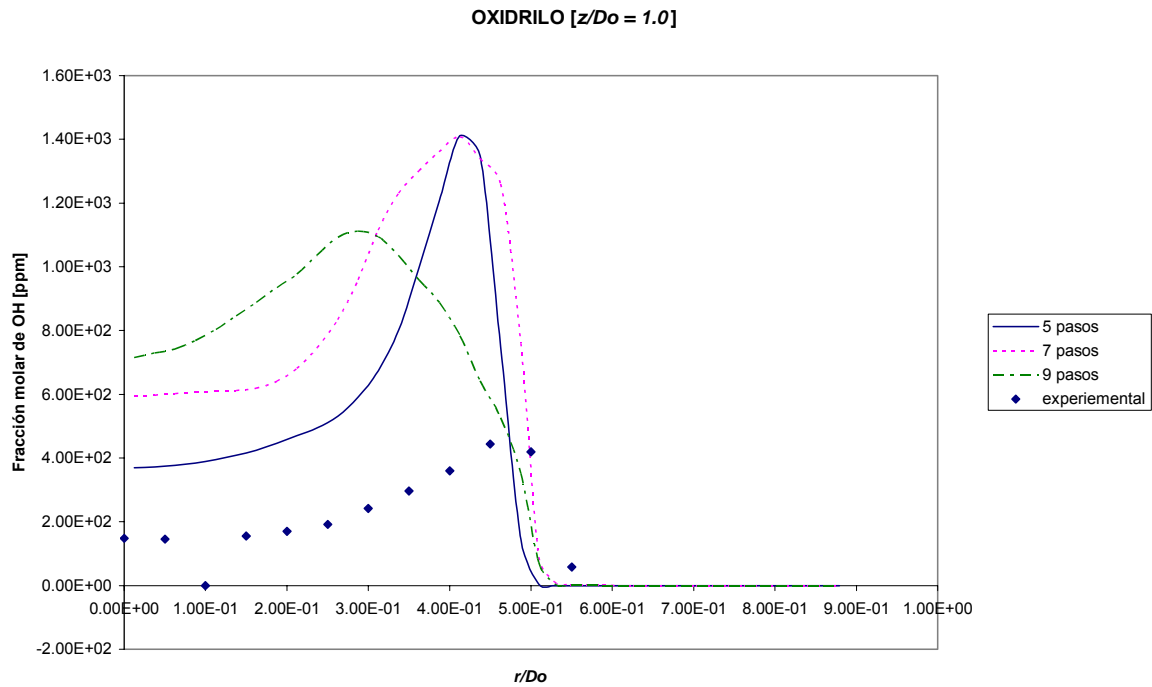


Figura 5.41 Perfiles radiales de fracción molar de OH en $z/D_o = 1.0$. Caso base.

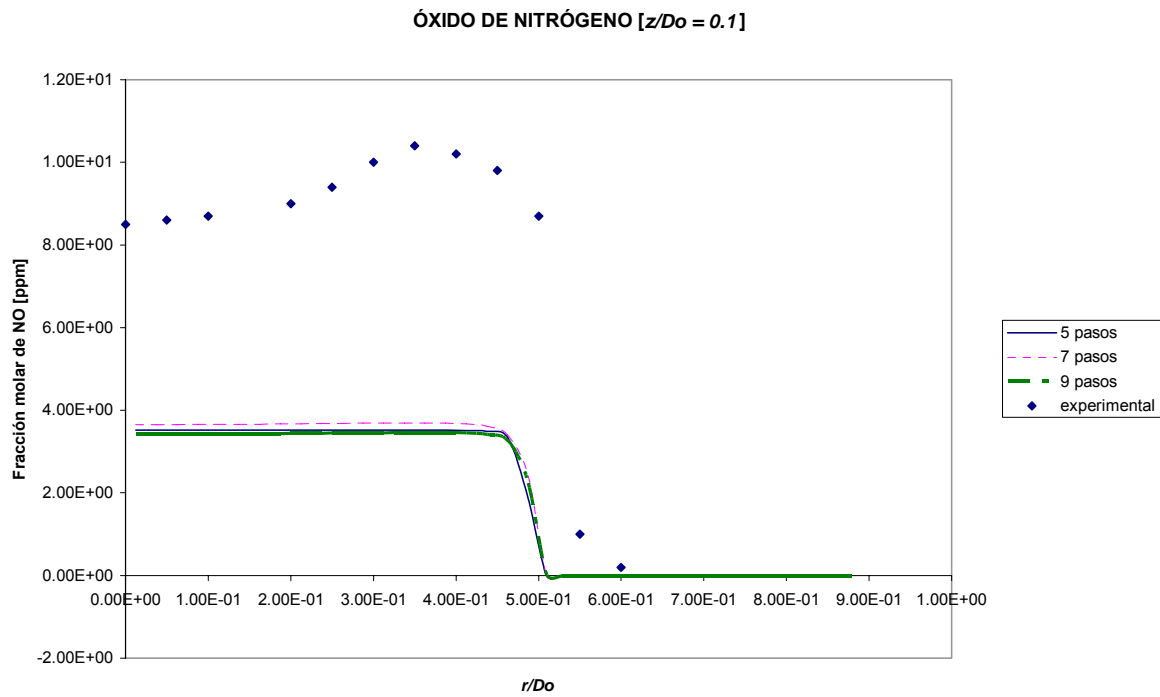


Figura 5.42 Perfiles radiales de fracción molar de NO en $z/D_o = 0.1$. Caso base.

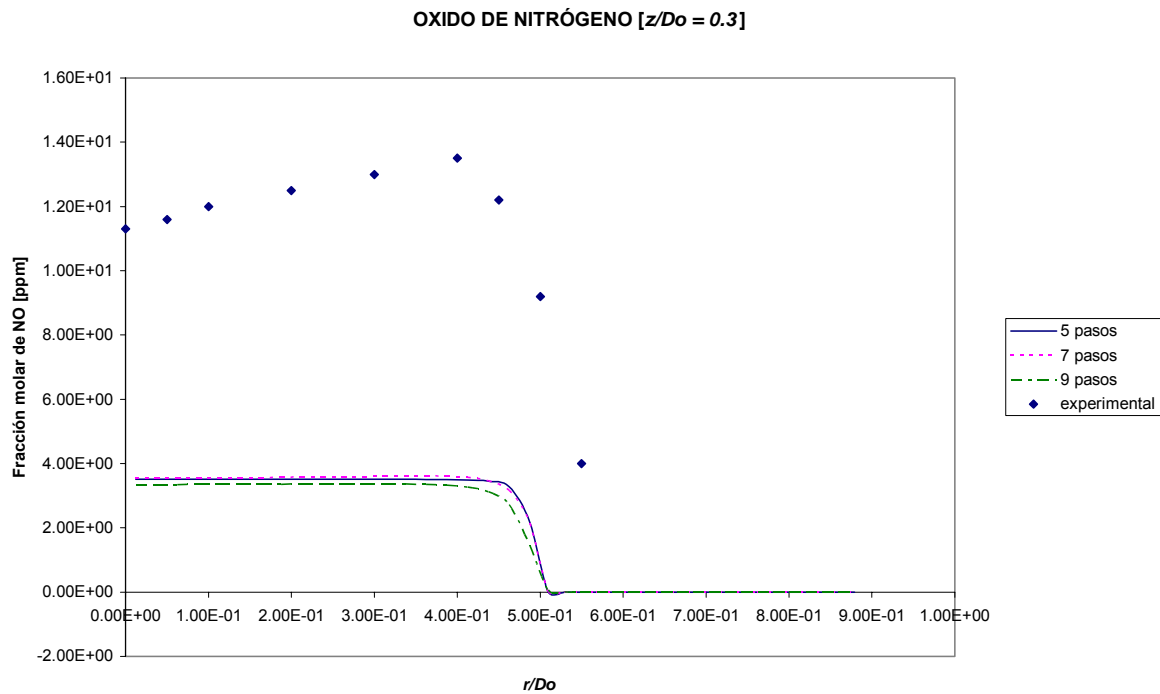


Figura 5.43 Perfiles radiales de fracción molar de NO en $z/D_o = 0.3$. Caso base.

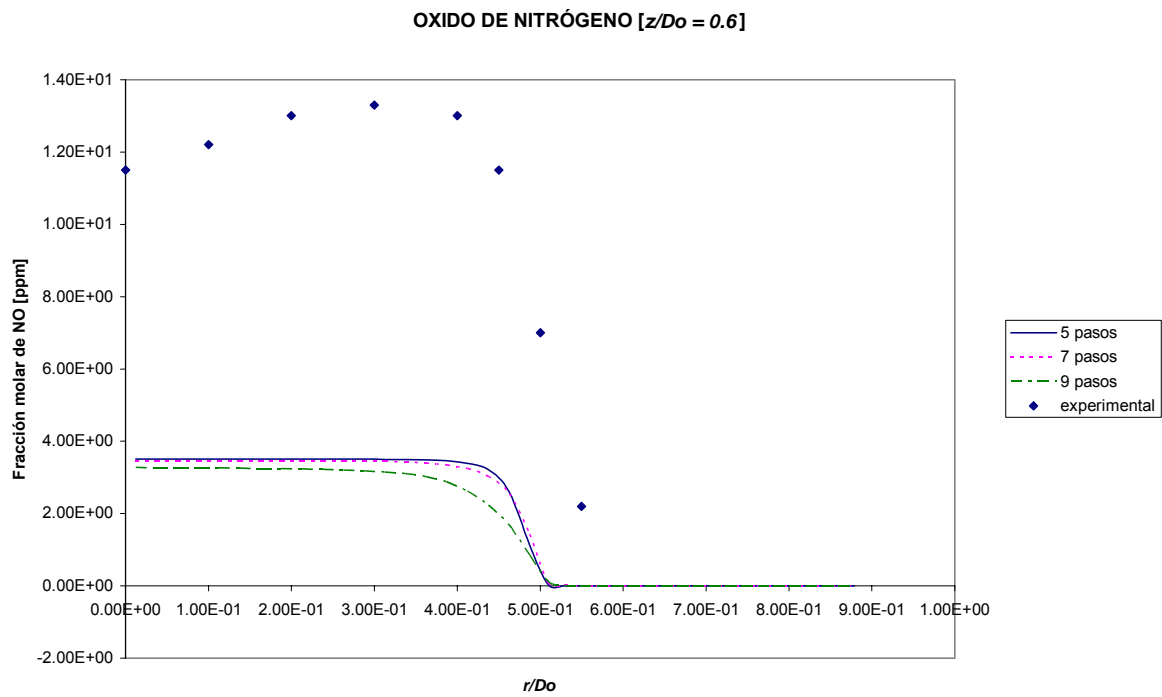


Figura 5.44 Perfiles radiales de fracción molar de NO en $z/D_0 = 0.6$. Caso base.

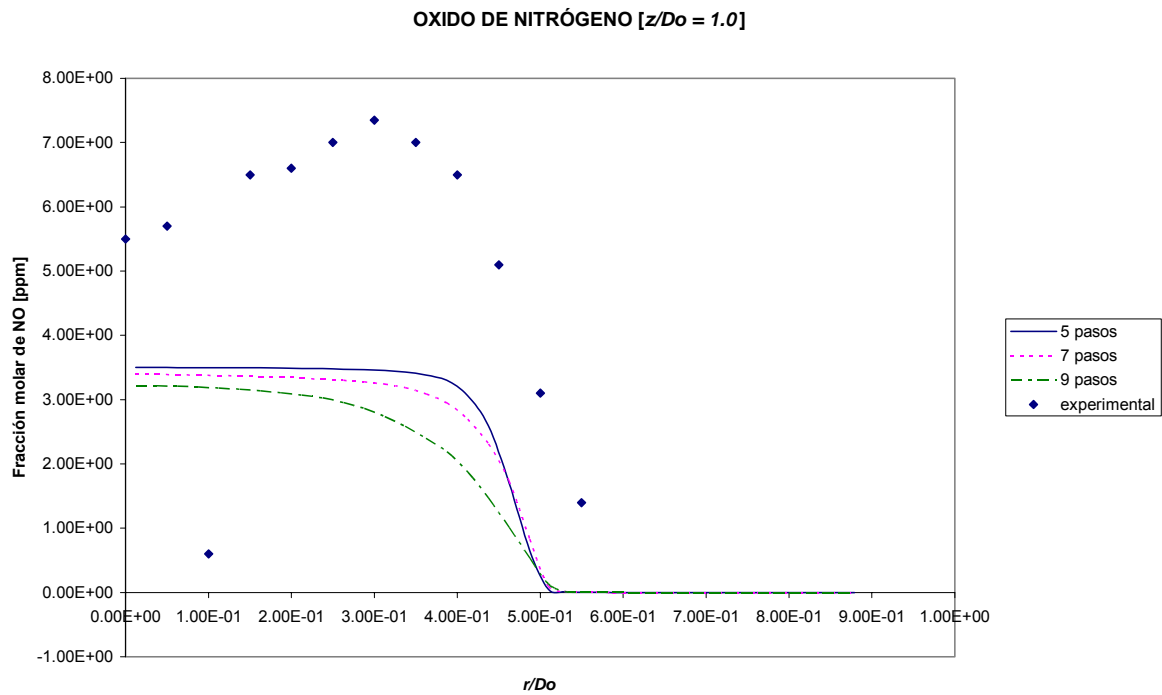


Figura 5.45 Perfiles radiales de fracción molar de NO en $z/D_0 = 1.0$. Caso base.

Capítulo 6

CONCLUSIONES

En este trabajo se realizó la simulación numérica de una llama turbulenta de premezcla pobre, la cual es estabilizada por medio de un cuerpo romo. Dicha mezcla es alimentada por una mezcla de metano y aire. La mezcla de metano-aire tiene una fracción de equivalencia de 0.586 (diagrama de Borghi), por esto es llamada pobre, ya que se encuentra casi en el límite de flamabilidad, debido a su bajo contenido de combustible con respecto al oxidante.

La aerodinámica del flujo es modelada por medio de las ecuaciones de continuidad y cantidad de movimiento (Navier Stokes), las cuales se resuelven por medio del método de elementos finitos.

Para la parte de la química del flujo se utiliza el método de Monte Carlo, el cual resuelve la ecuación de transporte (función de densidad de probabilidad conjunta FDP). En ese caso en particular los escalares obtenidos por medio de este método son las concentraciones del flujo.

La llama es simulada mediante tres modelos de reacción química: 5, 7 y 9 pasos de reacción, los cuales arrojaron resultados similares, en algunos casos, pero con diferencias en algunos otros; esta variación de los resultados depende de la velocidad de reacción en cada modelo.

Al realizarse las comparaciones con los datos experimentales se obtuvieron datos muy aproximados entre si tanto en la zona de recirculación ($z/D_o < 0.4$) como en la zona de reacción, principalmente para las predicciones de velocidad y especies de concentración mayoritaria (CH_4 , CO_2 , H_2O y O_2). La temperatura también tiene una gran aproximación a los datos experimentales, aunque existe una sobreestimación (aproximadamente 100 K) debida a que no

se tomaron en cuenta en el modelo las pérdidas por radiación. Con respecto a las especies de concentración minoritaria (OH , CO , y NO) se predicen con un margen de error aceptable debido a sus bajas concentraciones de estos en el flujo; cabe mencionar que se obtuvieron valores con cierto margen de error en las especies de concentración minoritaria debido a sus pequeñas escalas temporales y la gran dificultad que entraña predecir estas especies químicas.

De acuerdo con las gráficas, se puede observar que el número de pasos de reacción es muy importante para la predicción, sin embargo el tener un modelo con mayor número de pasos, no garantiza una mejor aproximación en todas las especies químicas. Sin embargo, se puede concluir que el modelo de 9 pasos de reacción predice valores de CO próximos a los experimentales en la zona de recirculación, que fue uno de los motivos por los cuales se realizó esta tesis. También cabe destacar que el modelo de 9 pasos, requiere de un mayor tiempo de cálculo en comparación con el modelo de 5 pasos. Por lo que el modelo de 5 pasos puede ser una buena aproximación en un primer intento en la simulación de este tipo de sistemas complejos.

La aerodinámica del flujo influye de manera importante en el perfil de las especies químicas. Cabe recordar que los vórtices que se desprenden detrás del cuerpo de estabilización son transitorios. Estos vórtices favorecen la mezcla entre los gases productos de la combustión y los gases frescos, por lo que se recomienda para un trabajo futuro el uso de LES, con la cual se representaría mejor la influencia de estos vórtices en la formación de las especies químicas.

APÉNDICE A

ESQUEMAS DE DISCRETIZACIÓN

1 Introducción

En este apéndice se presentan los esquemas lineales que se usan en la discretización de término convectivo de la ecuación general (4.1) introducida en el capítulo 4.

En la formulación de la ecuación discretizada (4.1), 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 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 ($u_e > 0$).

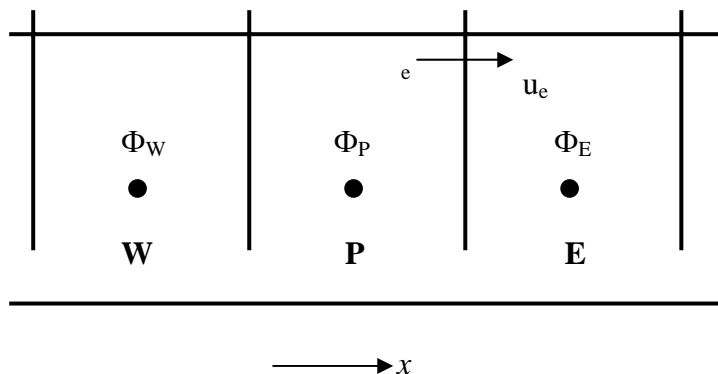


Figura 1: Diagrama esquemático de celdas.

2 Esquemas lineales

2.1 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 $u_e > 0$ [---]:

$$\phi_e = \phi_P \quad (1)$$

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.

2.2 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.

2.3 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:

$$\phi_e = \phi_P, \quad Pe > 2 \quad (4)$$

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 está dominado 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 las oscilaciones introducidas por el modelo pueden sacar al escalar de su dominio de definición.

APÉNDICE B

Modelización de NO_x

1 Introducción

Los flujos reactivos que se simulan en esta Tesis son premezclados y pobres de combustible (ratio de equivalencia menor que uno). La Técnica de combustión de premezcla pobre permite reducir las emisiones de NO_x durante la combustión, que se alcanzan en el sistema. La tasa de equivalencia puede estar cerca del límite de flamabilidad pobre de la mezcla, por lo que se pueden generar problemas de estabilidad en la llama. Además, por las bajas temperaturas existentes en la combustión de premezcla pobre y las inestabilidades asociadas, se puede tener un incremento en las concentraciones de CO e hidrocarburos (HC) ([48] y [6]), que también son contaminantes.

Los NO_x se producen, en combustibles sin contenido en nitrógeno, por los mecanismos de Zeldovich, N_2O intermedio y Prompt. Las reacciones de estas rutas se caracterizan por tener en general tasas de reacción más lentas que las principales reacciones que liberan calor.

En este apéndice se presentan las tres rutas de formación de los NO_x .

2 Rutas de formación del NO_x

2.1 Mecanismo de Zeldovich

El mecanismo de Zeldovich comprende las siguientes reacciones [49]:





El paso de reacción que controla la velocidad de formación de *NO* es la reacción (1). Debido a la relativa alta energía de activación (E_r) de la reacción (1), La formación de *NO* por este mecanismo es muy dependiente de la temperatura. Este mecanismo es muy sensible a las fluctuaciones de temperatura [50] y produce *NO* principalmente a temperaturas mayores que 1800 K [49]. Las siguientes reacciones adicionales se incluyen a este mecanismo por Michaud et al [51]:



donde $O(^1D)$ denota el átomo de O excitado electrónicamente.

Por su dependencia con la temperatura, esta ruta frecuentemente se denomina mecanismo “térmico” [43].

2.2 Mecanismo *N₂O* intermedio

En el mecanismo *N₂O* intermedio, el *NO* se forma a partir de vía la especie intermedia *N₂O*. Esta ruta tiene las siguientes reacciones [52]:





Las reacciones (7) y (14) pertenecen al mecanismo de Michaud et al [51].

En esta ruta, las reacciones de inicio son (6) y (7).

En la combustión de premezcla pobre, el NO se forma principalmente por la reacción (8) en altas presiones, y también por la reacción (11) en presiones próximas a 1 atm ([53] y [54]). En condiciones de premezcla pobre esta ruta puede contribuir significativamente en la formación de los NO_x total ([55], [56] y [57]).

2.3 Mecanismo Prompt

El mecanismo Prompt (ó súbito) fue identificado por Fenimore [58]. En esta ruta, los radicales hidrocarburos el frente de llama, CH_i, atacan el N₂ del aire para dar lugar HCN y otras especies cianadas como el HCNO, y a átomos N, que se oxidan a NO. La reacción de inicio de este mecanismo es:



En la combustión de premezcla pobre, el HCN se oxida a NO mediante la secuencia de reacciones:



El átomo N se oxida a NO principalmente por la reacción (2) [55].

El mecanismo de Prompt no es tan dependiente de la temperatura como el de Zeldovich debido a las relativamente bajas energías de activación de las tasas de reacción.

En la combustión de premezcla pobre a altas presiones, la contribución de este mecanismo en la formación de NO_x puede ser despreciable. Sin embargo, a presiones próximas a 1 atm, la contribución de esta ruta puede llegar a ser significativa [54].

APÉNDICE C

Modelos de Turbulencia

1 Introducción

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.

2 Cierres de segundo orden.

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

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

$$- \underbrace{\left(\overline{\tau_{ik} \frac{\partial u_j''}{\partial x_k}} + \overline{\tau_{ik} \frac{\partial u_i''}{\partial x_k}} \right)}_{(e)} \quad (1)$$

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:

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

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 $k = 1/2 \overline{u_i' u_i'}$ 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 isotrópica 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]:

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

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

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

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]:

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

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:

$$\begin{aligned} \Pi_{ij} = & -C_1\bar{\rho}\varepsilon\left(\frac{u_i''u_j''}{\tilde{k}} - \frac{2}{3}\delta_{ij}\right) + C_2\delta_{ij}\bar{\rho}u_l''u_m''\frac{\partial \tilde{u}_l}{\partial x_m} - C_3\bar{\rho}P_{ij} + C_4\bar{\rho}\tilde{k}\left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i}\right) \\ & - \frac{2}{3}C_4\bar{\rho}\tilde{k}\frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k}\delta_{ij} - \left(\frac{2}{3}C_2 + C_3\right)\left(\bar{\rho}u_l''u_j''\frac{\partial \tilde{u}_l}{\partial x_i} + \bar{\rho}u_l''u_i''\frac{\partial \tilde{u}_l}{\partial x_j}\right) \end{aligned} \quad (11)$$

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:

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

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

Modelo	MG	ML	MJ
C ϵ 1	1.4	1.44	1.40
C ϵ 2	1.8	1.90	1.90
C ϵ 3	0.15	0.15	0.18
C ϵ 4	0.22	0.21	0.22
C1	3	1.50	3.00
C2	0.3	-0.582	-0.44
C3	-	0.764	0.46
C4	-	-0.182	-0.23

3 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:

$$\bar{\rho} u_i'' u_j'' = -\bar{\rho} \nu_T \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) + \frac{2}{3} \left(\bar{\rho} \tilde{k} + \bar{\rho} \nu_T \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \right) \delta_{ij} \quad (13)$$

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 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.

4 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 las 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:

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

Los esfuerzos de Reynolds $u_i''u_j''$ se expresan de acuerdo con la ecuación (13).

El término (a) se aproxima como:

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

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

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

donde:

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

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

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

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

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

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

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's. 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.

BIBLIOGRAFIA

- [1] United States Environmental Protection Agency. <http://www.epa.gov/omswww/>, May 2000.
- [2] M. S. Anand and F. C. Gouldin. Combustion Efficiency of a Premixed of a Premixed Continuous Flow Combustor. *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 107:695-705, 1995.
- [3] P. Ferrão. *Análise Experimental de Chamas Turbulentas com Recirculação*. PhD thesis, Instituto Superior Técnico, Universidade Técnica de Lisboa, Portugal, 1993.
- [4] R. Aris. *Vectors, Tensors and the Basic Equations of Fluid Mechanics*. Prentice Hall International Series in the Physical and Chemical Engineering Sciences. 1962.
- [5] B. E. Launder and G. J. Reece and W. Rodi. Progress in the development of a reynolds stress turbulence closure. *Journal of Fluid Mechanics*, 68:537, 1975.
- [6] 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.
- [7] R. W. Bilger. Turbulent Jet Diffusion Flames. *Progress Energy Combustion Science*, 1:87-109, 1976.
- [8] J. A. Blasco. *Representación de la Cinética Química mediante Redes Neuronales Artificiales para la Simulación de Flujos Turbulentos Reactivos*. PhD thesis, Universidad de Zaragoza, España, 2000.
- [9] J. A. Blasco, N. Fueyo, C. Dopazo, and J. Ballester. Modeling the Temporal Evolution of a Reduced Combustion Chemical System with an Artificial Neuronal Network. *Combustion and Flame*, 113:38-52, 1998.
- [10] J. Blint. The Relationship of Laminar Flame Width to Flame Speed. *Combustion Science and Technology*, 49:79-92, 1986.
- [11] R. Borghi. *On the Structure and Morphology of Turbulent Premixed Flames*, pages 117-138. Plenum Press Corporation. 1985.
- [12] P. Boudier, S. Henriot, T. Poinso, and T. Bauritaud. A Model for Turbulent Flame Ignition and Propagation in Spark Ignition Engines. In The Combustion Institute, editor, *24th Symposium (International) on Combustion*, pages 503-510, Pittsburgh, 1992.

- [13] C. T. Bowman, R. K. Hanson, D. F. Davidson, J. W. C. Gardiner, V. Lissianski, G. P. Smith, D. M. Golden, M. Frenklach, H. Wang, and M. V. Lissianski. GRI-Mech 2.11. <http://www.gri.org>, 1995.
- [14] D. Bradley. Laminar Flamelet Modeling of Recirculating Premixed Methane and Propane-Air Combustion. *Combustion and Flame*, 71:109-122, 1988.
- [15] K. N. C. Bray. *Proc. R. Soc. Lond. A*, 431:315-335, 1990.
- [16] P. N. Brown, G. D. Byrne, and A. C. Hindmarsh. VODE: A Variable Coefficient ODE Solver. *SIAM Journal of Scientific and Statistical Computing*, 10:1038-1051, 1989.
- [17] S. Candel, F. Lacas, E. Maistret, N. Darabiha, and T. Poinso. Coherent Flame Model: Applications and Recent Extensions. In World Scientific, editor, *Recent Advance in Combustion Modeling*, pages 16-64. B. E. Larrourou, Singapore, 1991.
- [18] S. M. Cannon. *Modeling of Lean Premixed Gaseous Turbulent Combustion*. PhD thesis, Brigham Young University, USA, 1997.
- [19] S. M. Cannon, B. S. Brewster, and L. D. Smoot. Chemical Kinetic Modeling of a Bluff-Body Lean Premixed Combustor. 1998.
- [20] S. M. Cannon, B. S. Brewster, and L. D. Smoot. Stochastic Modeling of CO and NO in Premixed Methane Combustion. *Combustion and Flame*, 113:135-146, 1998.
- [21] R. S. Cant, S. B. Pope, and K. N. C. Bray. Modeling of Flamelet Surface to Volume Ratio in Turbulent Premixed Combustion. In The Combustion Institute, editor, *23th Symposium (International) on Combustion*, pages 809-815, Pittsburgh, 1990.
- [22] J. Y. Chen. A General Procedure for Constructing Reduced Mechanisms with Given Independent Reactions. *Combustion Science and Technology*, 57:89-94, 1988.
- [23] J. Y. Chen. Stochastic Modeling of Partially Stirred Reactors. *Combustion Science and Technology*, 2:63-94, 1997.
- [24] J. Y. Chen and W.C. Chang. Modeling Differential Diffusion Effects in Turbulent Nonreacting/Reacting Jets with Stochastic Mixing Models. *Combustion Science and Technology*, 133:343-375, 1998.

- [25] J. Y. Chen, W. Kollmann, and R. W. Dibble. PDF modeling of Turbulent No-Premixed Methane Jet. *Combustion Science and Technology*, 64:315346, 1989.
- [26] J. Y. Chen, Y. Liu, and B. Rogg. CO-H₂-N₂/Air Diffusion Flames: Thermal Radiation and Transfer Effects. Lecture Notes in Physics, m15. Springer-Verlag, Berlin, 1993.
- [27] Y. S. Chen and S. W. Kim. Computation of Turbulent Flows using and Extended k - ϵ E Turbulence Closure Model. Technical Report CR-179204, NASA, 1987.
- [28] F. C. Christo, A. R. Masri, and E. "M. Nebot. *Combustion and Flame*, 106:406, 1996.
- [29] F. C. Christo, A. R. Masri, E. M. Nebot, and S. B. Pope. An Integrated PDF Neuronal Network Approach for Simulating Turbulent Reacting Systems. In The Combustion Institute, editor, *26th Symposium (International) on Combustion*, Pittsburgh, 1996.
- [30] P. Clavin. Fundamentals of Combustion of Premixed Gases. In W. Kollmann, editor, *Modeling of Combustion and Turbulence*, Lecture Series 1992-3. Von Karman Institute for Fluid Dynamics. Rhode Saint Genese Belgium, March 1992.
- [31] H. Cohen, G. F. C. Rogers, and H.I.H. Saravanamutto. *Gas Turbine Theory*. Longman Group Limited. 1996.
- [32] R. A. Corr, P. C. Malte, and N. M. Marinov. Evaluation of NO_x Mechanisms for Lean, Premixed Combustion. *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 114:425-434, 1992.
- [33] S. M Correa. A Review of NO_x Formation Under Gas Turbine Combustion Conditions. *Combustion Science and Technology*, 87:329-362, 1992.
- [34] S. M. Correa. Carbon Monoxide Emissions in Lean Premixed Combustion. *Journal of Propulsion and Power*, 8:1144-1151, 1992.
- [35] S. M Correa. Turbulence-Chemistry Interactions in the Intermediate Regime of Premixed Combustion. *Combustion and Flame*, 93:41, 1993.
- [36] R. L. Curl. Dispersed Phase Mixing: 1. Theory and effects in Simple Reactors. *A. I. Ch. E. Journal*, 9(2):175-181, 1963.
- [37] S. C. Cutbill, A. G. Smith, M. Tumelty, and D. G. Gregory-Smith. Modeling Coanda Effect Flows Using Phoenix. *PHOENICS Journal of Computational Fluid Dynamics*; 9(2):229-249, 1996.

- [38] B. J. Daly and F. H. Harlow. Transport Equations in Turbulence. *Physics of Fluids*, 13(11):2634-2649, 1970.
- [39] P. Docherty and M. Fairweather. Radiative Heat Transfer in Combustion Systems. In W. Kollmann, editor, *Modeling of Combustion and Turbulence*, Lecture Series 1992-3. Von Karman Institute for Fluid Dynamics. Rhode Saint Genese Belgium, March 1992.
- [40] C. Dopazo. Probability Density Function Approach for a Turbulent Axisymmetric Heated Jet Centerline Evolution. *Physics of Fluids*, 18(4):397-404, 1975.
- [41] C. Dopazo. Relaxation of Initial Probability Density Functions in the Turbulent Convection of Scalar Fields. *Physics of Fluids*, 22(1):20-30, 1979.
- [42] C. Dopazo. Recent developments in PDF methods, pages 375-474. Academic press. 1994
- [43] T.D. Dreeben and A.R. Kerstein. Simulation of Vertical Slot Convection Using One-Dimensional Turbulence'. *Int. Journal Heat and Mass Transfer*, (in press), 1999.
- [44] J. M. Duclos, D. Veynante, and T. Poinso. A Comparison of the Flamelet Models for Premixed Turbulent Combustion. *Combustion and Flame*, 95:101-107, 1993.
- [45] [45] V. Eswaran and S. B. Pope. Direct Numerical Simulations of the Turbulent Mixing of a Passive Scalar. *Physics of Fluids A*, 31(3):506-520, 1988. ' , '
- [46] [46] A. Favre. *Problems of Hydrodynamics and Continuum Mechanics*. SIAM, , 1969.
- [47] [47] C. P. Fenimore. Formation of Nitric Oxide in Premixed Hydrocarbon Flames. In *13th Symposium (International) on Combustion*, pages 373-380, The Combustion Institute, Pittsburgh, PA, 1971.
- [48] [48] H. H. Ferziger and M. Peric. *Computational Methods for Fluid Dynamics*. Springer-Verlag. 1996.
- [49] [49] Centre for the Analysis and Dissemination of Demonstrated Energy Technologies. <http://194.178.172.86/home.htm>, March 2000.
- [50] [50] P. H. Gaskell and A. K. C. Lau. Curvature-Compensated Convective Transport: SMART, a New Boundedness-Preserving Transport Algorithm. *Int. J. Num. Methods Fluids*, 8:617-641, 1988.

- [51] [51] M. M. Gibson and B. A. Younis. Calculation of Swirling Jets with a Reynolds Stress Closure. *Physics of Fluids*, 29:38, 1986.
- [52] [52] P. Glarborg, R. J. Kee, J. F. Grcar, and J. A. Miller. PSR: A Fortran Program for Modeling Well-Stirred Reactors. Technical Report SAND86-820, Sandia National Laboratories, Livermore, CA, 1992.
- [53] [53] P. Glarborg, N. L. Lilløe, S. Byggstøl, B. F. Magnussen, P. Kilpinen, and M. Hupa. A Reduced Mechanism for Nitrogen Chemistry in Methane Combustion. In The Combustion Institute, editor, *24th Symposium (International) on Combustion*, Pittsburgh, 1992.
- [54] [54] D. C. Haworth and T. J. Mungal. *Journal of Fluid Mechanics*, 244:405-436, 1992.
- [55] [55] S. Haykin. *Neuronal Networks: A Comprehensive Foundation*. Macmillan College Publishing Company, New York, 1994.
- [56] [56] M. V. Heitor, A. M. K. P. Taylor, and J. H. Whitelaw. The Interaction of Turbulence and Pressure Gradients in a Baffie-Stabilized Premixed Flame. *Journal of Fluid Mechanics*, 181:387-413, 1987.
- [57] [57] A. C. Hindmarsh. ODEPACK, *A Systematized Collection of ODE Solvers*, pages 55-64. Scientific Computing, North-Holland, Amsterdam, 1983.
- [58] [58] I. Z. Hu and S. M. Correa. Calculations of Turbulent Flames Using a PSR Microstructural Library. In The Combustion Institute, editor, *26th Symposium (International) on Combustion*, Pittsburgh, 1996.
- [59] [59] J. Janicka, W. Kolbe, and W. Kollmann. Closure of the Transport Equation for the Probability Density Function of Turbulent Scalar Field. *Journal of Non-Equilibrium Thermodynamics*, 4:47-66, 1979.
- [60] [60] J. Janicka and W. Kollmann. A Two-Variables Formalism for the Treatment of Chemical Reactions in Turbulent H₂ - Air Diffusion Flames. In The Combustion Institute, editor, *17th Symposium (International) on Combustion*, pages 421-430; Pittsburgh, 1979.
- [61] [61] J. Janicka and W. Kollmann. The Calculation of Mean Radical Concentration in Turbulent-Diffusion Flames. *Combustion and Flame*, 44:319-316, 1982.
- [62] [62] C. Jiménez. Modelización de Flujos Reactivos: *el Método de la Función de Densidad de Probabilidad en Simulaciones de Grandes Escalas*. PhD thesis, Universidad de Zaragoza, España, 1998.
- [63] [63] W. P. Jones. Models for Turbulent Flows with Variable Density and Combustion. In W. Kollmann, editor, *Prediction Methods for Turbulent Flows*,

- [64] Lecture Series 1979-2. Von Karman Institute for Fluid Dynamics. Rhode Saint Genese Belgium, January 1979.
- [65] [64] W. P. Jones. *Turbulence Modeling and Numerical Solutions Methods for Variable Density and Combustion Flows*, pages 306-374. Academic Press.1994.
- [66] [65] W. P. Jones and M. Kakhi. *Mathematical Modeling of Turbulent Flames*, volume 306 of *Series E. Applied Sciences*, Kluwer Academic Publishers, pages 411-492. 1996.
- [67] [66] W. P. Jones and B. E. Launder. The Prediction of Laminarisation with a Two-Equation Model of Turbulence. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 15:301-314, 1972.
- [68] [67] W. P. Jones and R. P. Lindstedt. Global Reaction Schemes for Hydrocarbon Combustion. *Combustion and Flame*, 73:233-249, 1988.
- [69] [68] W. P. Jones and P. Musonge. Closure of the Reynolds Stress and Scalar Flux Equations. *Physics of Fluids*, 31(12):3589-3604, 1988.
- [70] [69] N. D. Joshi, M. J. Epstein, S.Durlak, S. Marakovits, and P. E. Sabla. Development of a Fuel Air Premixer for Aero-Derivative Dry Low Emissions Combustor. ASME Paper No. 94-GT-253, 1994.
- [71] [70] M. Kakhi. *The Transported Probability Density Function Approach for Predicting Turbulent Combustion Flows*. PhD thesis, Imperial College of Science Technology and Medicine, London, 1994.
- [72] [71] C. Kennel, F. Mauss, and N. Peters. Reduced Kinetic Mechanisms for Premixed Propane-Air Flames. In N. Peters and B. Rogg, editors, *Reduced Kinetic for Applications in Combustion Systems*, Lecture Notes in Physics, m 15, pages 123-141. Springer- Verlag, 1993.
- [73] [72] A. R. Kerstein. One-Dimensional Turbulence: Model Formulation and Application to Homogeneous Turbulence, Shear Flows, and Buoyant Stratified Flows. *Journal of Fluid Mechanics*, 392:277-334, 1999.
- [74] [73] A.R. Kerstein. Linear-Eddy Modelling of Turbulent Transport. Part 6. Microstructure of Diffusive Scalar Mixing Fields. *Journal of Fluid Mechanics*, 231:361-394, 1991.
- [75] [74] A.R. Kerstein and T.D. Dreeben. Prediction of Turbulent Free Shear Flow Statistics Using a Simple Stochastic Model. *Physics of Fluids*, 12(2):418-424, 2000.
- [76] [75] B. Koren. *A Robust Upwind Discretisation Method for Advection Diffusion and Source Terms*, page 117. Vieweg, Braunschweig, 1985.

- [77] [76] C. K. G. Lam and K. Bremhorst. A Modified Form of the $k - \epsilon$ model for Prediction Wall Turbulence. *ASME Journal of Fluid Engineering*, 113:456, 1981.
- [78] [77] T. Landenfeld, A. Kremer, E. P. Hassel, and J. Janicka. Reynolds Stress Closures for Strongly Swirling Combusting Jets. In *11 th Symposium on Turbulent Shear Flows*, Grenoble, 1997.
- [79] [78] B. E. Launder, M. A. Leschziner, and M. Sindir. The umist/ucd computations for the afosr-ittm-stanfords conference on complex turbulent flows. Technical Report TFD/82/1, UMIST, July 1982.
- [80] [79] B. E. Launder and D. B. Spalding. *Lectures in Mathematical Models of Turbulence*. Academic Press, 1972.
- [81] [80] C. K. Law. A Compilation of Experimental Data on Laminar Burning Velocities. In N. Peters and B. Rogg, editors, *Reduced Kinetic for Applications in Combustion Systems*, Lecture Notes in Physics, m 15, pages 13-26. Springer- Verlag, 1993. .
- [82] [81] B. Van Leer. *Upwind Difference Methods for Aerodynamic Problems Governed by the Euler Equations*, volume 22 of Am. Math. Soc., pages 327-336. 1985. .
- [83] [82] B. P. Leonard. A Stable and Accurate Convective Modeling Procedure Based on Cuadratic Upstream Interpolation. *Comp. Methods Appl. Mech. Eng.*, 19:59, 1979.
- [84] [83] G. Leonard and J. Stegmaier. Development of an Aeroderivative Gas Turbine Dry Low Emissions Combustion System. *ASME-Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 116:542-546, 1994.
- [85] [84] R. P. Lindstedt and E. M. Váos. Modeling of Premixed Flames with Second Moment Methods. *Combustion and Flame*, 116:461-485, 1999.
- [86] [85] F. C. Lockwood and A. S. Naguib. *Combustion and Flame*, 24:104, 1955.
- [87] [86] J. C. Ludwing, H. Q. Qin, and D. B. Spalding. The PHOENICS Reference Manual. Technical Report CHAM TR/200, CHAM Ltd, London, 1989.
- [88] [87] J. L Lumley. Pressure-Strain Correlation. *Physics of Fluids*, 18(6):750, 1975.
- [89] [88] U. Maas-and S. B. Pope. Implementation of Simplified Chemical Kinetics Based on Intrinsic Low-Dimensional Manifolds. In The Combustion Institute, editor, *24th Symposium (International) on Combustion*, pages 103-112, Pittsburgh, 1992.

- [90] [89] U. Maas and S. B. Pope. Simplifying Chemical Kinetics: Intrinsic Low-Dimensional Manifolds in Composition Space. *Combustion and Flame*, 88:239-264, 1992.
- [91] [90] U. Maas and S. B. Pope. Laminar Flame Calculations Using Simplified Chemical Kinetics Based on Intrinsic Low-Dimensional Manifolds. In The Combustion Institute, editor; *25th Symposium (International) on Combustion*, pages 1349-1356, Pittsburgh, 1994.
- [92] [91] S. Magnussen and Hjertager. On Mathematical Models of Turbulent Combustion with Special Emphasis on Soot Formation and Combustion. In The Combustion Institute, editor, *16th Symposium (International) on Combustion*, pages 719-729, Pittsburgh, 1977.
- [93] [92] E. Maistret, E. Darabiha, T. Poinso, D. Veynante, F. Lacas, S. Candel, and E. Esposito. In *Third International Conference on Numerical Combustion*, pages 177-188, 1989.
- [94] [93] H. P. Mallampalli, T. H. Fletcher H.P., and J. Y. Chen. Evaluation of CH₄/NO_x Global Mechanisms Used for Modeling Lean Premixed Turbulent Combustion of Natural Gas. In *Fall Meeting of the Western States Section of the Combustion Institute*, University of Southern California Los Angeles, CA., October 28-29, 1996.
- [95] [94] H. P. Mallampalli, T. H. Fletcher H.P., and J. Y. Chen. Updated CH₄/NO_x global mechanism used for modeling lean premixed turbulent combustion of natural gas. http://www2.et.byu.edu/tom/gas_turbines/updated_5step.html, 1998.
- [96] [95] P. C. Malte and D. T. Pratt. The Role of Energy-Releasing Kinetics in NO_x Formation: Fuel-Lean Jet Stirred CO-Air Combustion. *Combustion Science and Technology*, 9:221-231, 1974.
- [97] [96] J. B. McVey, F. C. Padgett, T. J. Rosfjord; A. S. Hu, A. A. Peracchio, B. Sehlein, and D. R. Tegel. Evaluation of Low-NO_x Combustor Concepts for Aero-derivative Gas Turbine Engines. *ASME-Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 115:581-587, 1993.
- [98] [97] M. G. Michaud, P. R. Westmoreland, and A. S. Feitelberg. Chemical Mechanisms of NO_x Formation for Gas Turbine Conditions. In The Combustion Institute, editor, *24th Symposium (International) on Combustion*, Pittsburgh, 1992.
- [99] [98] J. A. Miller and C. T. Bowman. Mechanism and Modeling of Nitrogen Chemistry in Combustion. *Progress in Energy and Combustion Science*, 15:287-338, 1989.

- [100] [99] P. Moin and K. Mahesh. Direct Numerical Simulation: a Tool in Turbulence Research. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 30:539-578, 1998.
- [101] [100] S. P. Nandula, R. W. Pitz, R. S. Barlow, and G. J. Fiechtner. Rayleigh-Raman-LIF Measurements in a Turbulent Lean Premixed Combustor. *In 34th Aerospace Sciences Meeting Exhibit*, Reno, NV, 15-18 January 1996.
- [102] [101] D. G. Nicol, P. C. Malte, A. J. Hamer, R. J. Roby, and R. C. Steele. Development of a Five-Step Global Methane Oxidation-NO Formation Mechanism for Lean-Premixed Gas Turbine Combustion. *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 121:272-280, 1999.
- [103] [102] D. G. Nicol, R. C. Steele, N. M. Marinov, and P. C. Malte. The Importance of Nitrous Oxide Pathway to NO_x in Lean Premixed Combustion. *In The ASME International Gas Turbine, and Aeroengine Congress and Exposition*, Cincinnati, Ohio, 1993.
- [104] [103] D. G. Nicol, R. C. Steele, N. M. Marinov, and P. C. Malte. The Importance of the Nitrous Oxide Pathway to NO_x in Lean Premixed Combustion. *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 117:100-111, 1995.
- [105] [104] L. Vali no and C. Dopazo. Quasistationary probability density functions in the turbulent mixing of a scalar field. *Physical Reviews Letters*, 72(22):3518-3521) 1994.
- [106] [105] B. Nöll. Evaluation of a Bounded High-Resolution Scheme for Combustor Flow Computations. *AIAA Journal*, 30(1):64-69, 1992.
- [107] [106] A. T. Norris and A. T. Hsu. Comparison of PDF and Moment Closure Methods in the Modeling of Turbulent Reacting F:flows. In SAE and ASME ASME, editor, *30th Joint Propulsion Conference-AIAA*, Indianapolis, Indiana, June 27-29 1994.
- [108] [107] A. T. Norris and S. B. Pope. Modeling of extinction in turbulent diffusion flames by the velocity-dissipation-composition pdf method. . *Combustion and Flame*, 100:211-220, 1995.
- [109] [108] 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.
- [110] [109] J. C. Pan, M. D. Vangsness, S. P. Heneghan, W. J. Schmoll, and D. R. Ballal. Laser Diagnostic Studies of Confined Turbulent Premixed Flames Stabilized by Conical Bluff Bodies: Data Set. Technical Report UDRTR-91-102, University of Dayton, July 1991.

- [111] [110] S. V. Patankar. Numerical Heat Transfer and Fluid Flow. Series in Computational Methods in Mechanics and Thermal Science. Hemisphere Publishing Corporation, January 1980.
- [112] [111] 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.
- [113] [112] N. Peters. Numerical Simulation of Combustion Phenomena. Lecture Notes in Physics, 241, page 90. Springer-Verlag, Berlin, 1985.
- [114] [113] N. Peters. Laminar Flamelets Concepts in Turbulent Combustion. In The Combustion Institute, editor, *21th Symposium (International) on Combustion*, pages 1231-1250, Pittsburgh, 1986,:
- [115] [114] D. G. Pfuderer, A. A. Neuber, G. Früchtel, E. P. Hassel, and J. Janicka. Turbulence Modulation in Jet Diffusion Flames: Modeling and Experiments. *Combustion and Flame*, 106:301-317, 1996.
- [116] [115] W. Polifke, K. Döbbeling, T. Sattelmayer, and D. G. Nicol P. C. Malte. A NO_x Prediction Scheme for Lean-Premixed Gas Turbine Combustion Based on Detailed Chemical Kinetics. *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 118:765-772, October. 1996.
- [117] [116] S. B. Pope. *Combustion and Flame*, 27:299, 1976.
- [118] [117] S. B. Pope. Transport Equation for Joint Probability Density Function of Velocity and Scalar in Turbulent Flow. *Physics of Fluids*, 24(4):588-596, 1976.
- [119] [118] S. B. Pope. The Statistical Theory of Turbulent Flames. *Phil. Trans. R. Soc.*, pages 291-529, 1979.
- [120] [119] S. B. Pope. A Monte Carlo Method for the PDF Equations of Turbulent Reactive Flow. *Combustion Science and Technology*, 25:159-174, 1981.
- [121] [120] S. B. Pope. Transport Equation for Joint Probability Density Function of Velocity and Scalar in Turbulent Flow. *Physics of fluids*, 24(4):588-596, 1981.
- [122] [121] S. B. Pope. PDF Methods for Turbulent-Reactive Flows. *Progress Energy Combustion Science*, 11:119-192, 1985.
- [123] [122] S. B. Pope. Computationally Efficient Implementation of Combustion Chemistry "in-situ" Adaptive Tabulation. *Combustion Theory Modeling*, 1:41-63, 1997.

- [124] [123] W. Rodi. *Turbulence Models and their Application in Hydraulics*. International Association for Hydraulics Research, ISBN 902127002-1. Delf, Holland, 1984.
- [125] [124] P. L. Roe. Finite- Volume Methods for the Compressible Navier-Stokes Equations. In *Proceedings 5th Int. Conf. Numerical Methods in Laminar and Turbulent Flow*, volume V, pages 2088-2101, Montreal, 1987.
- [126] [125] T. Rutar and P. C. Malte. Experimental Measurements of NO_x and CO in a Jet-Stirred Reactor at Pressures of 3.0, 4.7 and 6.5 Atm and 'Variable Residence Times. In *"Fall Meeting of the Western States Section of the Combustion Institute, Paper No. WSS/CI 9SF-S*, University of Washington, Seattle, Washington, October 26-27 1998.
- [127] [126] T. Rutar, D. G. Nicol, J. C. Y. Lee and P. C. Malte. NO_x Behavior in Lean Premixed Combustion. In The Combustion Institute, editor, *27th Symposium (International) on Combustion*, Poster No. W2A01, Pittsburgh, 1998.
- [128] [127] R. Siegel and J. R. Howell. *Thermal Radiation Heat Transfer*, McGraw-Hill, Washington, 2nd edition, 1981.
- [129] [128] L.D. Smoot and P. J. Smith. *Coal Combustion and Gasification*. Plenum Press, New York, 1985.
- [130] [129] T. S. Snyder, T. J. Rosfjord, J. B. McVey, A. S. Hu, and B. C. Schlein. Emission and Performance of a Lean-Premixed Gas Fuel Injection System for Aeroderivative Gas Turbine Engines. *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 118:38-45, 1996.
- [131] [130] D. B. Spalding. Mixing and Chemical Reaction in Steady, Confined Turbulent Flames. In Institute of Combustion, editor, *13th Symposium (International) on Combustion*, pages 649-657, Pittsburgh, 1971.
- [132] [131] D. B. Spalding. A Novel Finite-Difference Formulation for Differential Expressions Involving Both First and Second Derivatives. *Int. Journal Num. Methods Engineering*, 4:551, 1972.
- [133] [132] D. B. Spalding. Development of the Eddy-Breakup Model of Turbulent Combustion. In The Combustion Institute, editor, *16th Symposium (International) on combustion*, page 1657, Pittsburgh, 1976.
- [134] [133] D. B. Spalding. Mathematical Modeling of Fluid Dynamics, Heat Transfer and Mass Transfer Processes, Technical Report HTS/8011, Imperial College of Science Technology and Medicine, 1980.

- [135] [134] D. B. Spalding. A General-Purpose Computer Program for Multidimensional One and Two-Phase Flows. *In IMACS Meeting*, Lehigh University, Pennsylvania, 1981.
- [136] [135] R. C. Steele, A. C. Jarrett, P. C. Malte, J. H. Tonouchi, and D. G. Nicol. Variables Affecting NO_x Formation in Lean-Premixed Combustion. *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 119:102-107, 1997.
- [137] [136] R. C. Steele, P. C. Malte, D. G. Nicol, and J. C. Kramlich. NO_x and N₂O in Lean Premixed Jet Stirred Flames. *Combustion and Flame*, 100, 1995.
- [138] [137] P. K. Sweby. High Resolution Schemes Using Flux Limiters for Hyperbolic Conservation Laws. *SIAM Journal on Mathematical Analysis*, 21:995-1011, 1984.
- [139] [138] S. Tavoularis and S. Corrsin. Experiments in Nearly Homogeneous Turbulent Shear Flow with a Uniform Mean Temperature Gradient, Part 1. *Journal of Fluid Mechanics*, 104:311-347, 1981.
- [140] [139] H. Tennekes and J. L. Lumley. *A First Course in Turbulence*. MIT Press. 1977.
- [141] [140] D. Veynante, F. Lacas, and S. Candel. *In Proceedings of the Marble Symposium*, pages 237-256, 1988.
- [142] [141] J. Warnatz, U. Mass, and R. W. Dibble. *Combustion*. Springer. 1996.
- [143] [142] N. P. Waterson. Development of Bounded Higher-Order Convection Scheme for General Industrial Applications. Technical Report 1994-33, Von Karman Institute, Belgium, 1994.
- [144] [143] N. P. Waterson and H. Deconinck. *A Unified Approach to the Design and Application of Bounded Higher-Order Convection Schemes*. CFD Lectures Series 1995-21, Von Karman Institute for Fluid Dynamics. Rhode-Sain-Genese, Belgium, 1995.
- [145] [144] C. K. Westbrook and F. L. Dryer. Chemical Kinetic Modeling of Hydrocarbon Combustion. *Progress Energy Combustion Science*, 10(1), 1984.
- [146] [145] F. A. Williams. *Combustion Theory*. Second edition, the Benjamin/Cummings Publishing Company. 1985.
- [147] [146] L. Xie, S. Hayashi, and K. Hirose. NO_x Formation in Turbulent Lean Premixed Combustion with Minimum Heat Losses. In The Combustion Institute, editor, *26th Symposium (International) on Combustion*, Pittsburgh, 1996.

- [148] [147] V. Yakhot and S. A. Orszag. Renormalization Group Analysis of Turbulence. 1. Basic Theory. *Journal of Scientific Computing*, 1(1):3-51, 1986.
- [149] [148] V. Yakhot, S. A. Orszag, S. Thangam, T. B. Gatski, and C. G. Speziale. Development of Turbulence Models for Shear Flows by a Double Expansion Technique. *Physics of Fluids A*, 4(7), 1992.
- [150] [149] V. Yakhot and L. M. Smith. The Renormalization Group, the E-expansion and Derivation of Turbulence Models. *Journal of Scientific Computing*, 7(1), 1992.
- [151] [150] B. Yang and S. B. Pope. An Investigation of the Accuracy of Manifolds Methods and Splitted Schemes in the Computational Implementation of Combustion Chemistry. *Combustion and Flame*, 112:16-32, 1998.
- [152] [151] J. H. Yu. *On Formation of NO_x and CO in Turbulent Premixed Combustion of Natural Gas*. PhD thesis, Laboratory of Thermal Engineering of Twente University of Technology, Netherlands, 1996.