



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

Facultad de Ingeniería

“Simulación numérica de una flama premezclada con
un flujo de aire adyacente”

TESIS

Para obtener el título de:

Ingeniero Mecánico.

Presenta:

Omar Ramírez Ramírez

Director de tesis:

Dr. William Vicente y Rodríguez.



Ciudad Universitaria México D.F a 10de noviembre de 2006.



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



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.

Dedicatoria:

A mis padres:

**Paula Ramírez Patricio.
Hugo Ramírez Jiménez**

Agradecimientos:

En estas líneas quiero agradecer a todas aquellas personas que me han apoyado y me han brindado su amistad durante el transcurso de esta fase de vida.

A mi Universidad por brindarme esta oportunidad. Al Dr. William Vicente Y Rodriguez por todo su tiempo, paciencia, tolerancia y empeño para la realización de este trabajo, al Dr. Martín Salinas Vázquez por su apoyo y también por contagiarnos de esas ganas de trabajar a diario. Pero, sobre todo gracias a ambos por brindarme su amistad.

Gracias también todos a mis compañeros y amigos por compartir no solo salones de clases, si no también parte de su tiempo.

En especial a:

Edgar Andrés Chol Orea.
Luis Alberto Espinosa Arzate.
David Iván Ramírez Rebollar.
Servando Rosales Madrigal.
Gabriel Vázquez Pérez.
Zeus Hiram Zamora Guevara.

Gracias también a mi hermana Mary por su apoyo incondicional. También quiero agradecer a todos mis compañeros y amigos con los que cada viernes y fines de semana, durante muchos años jugué fútbol.

Y a DGAPA por el apoyo recibido bajo el proyecto IN109106

Índice:	Página
Objetivos.....	XI
1. Introducción.....	1
2. Ecuaciones de transporte.....	5
1. Balance de masa.....	5
2. Conservación de especies.....	6
3. Conservación de energía total.....	8
4. Ecuación de estado y flujo difusivo.....	10
5. Ecuación diferencial homogénea y fracción de mezcla.....	13
6. Promedio de las ecuaciones.....	15
7. Función de densidad de probabilidad conjunta.....	19
8. Ecuación de transporte para la función de densidad de probabilidad conjunta.....	20
8.1 Deducción e interpretación.....	20
8.2 Modelos de mezcla.....	24
8.3 Modelo linear Mean Square Estimation.....	26
8.4 Modelo de Curl modificado.....	26
3. Modelos de combustión.....	29
1. Clasificación de los sistemas con reacción.....	31
2. Modelo Eddy Break Up.....	36
3. Función de densidad de probabilidad de forma supuesta.....	37
4. Modelos de flama.....	39
5. Mecanismos reducidos.....	40
6. Mecanismos químicos para el metano.....	42
6.4 Mecanismo sistemáticamente reducido de cinco pasos.....	42
7. Métodos de representación química.....	45
7.1 Método de la tabla de interpolación.....	45
8. Modelo de radiación.....	49
4. Método de solución.....	53
1. Introducción.....	53
2. Método de volúmenes finitos.....	54
3. Método de Monte Carlo.....	60
3.1 Discretización de la PDF.....	61
3.2 Técnica de pasos fraccionados.....	62
3.3 Pasos de evolución.....	64
3.4 Paso fraccionado de transporte.....	64
3.5 Proceso de remoción.....	66
3.6 Paso fraccionado de mezcla.....	66
3.7 Paso fraccionado de reacción química.....	68
4. Acoplamiento de los métodos de volúmenes finitos y Monte Carlo.....	69
5. Predicción de una flama de metano y aire con un flujo de aire circundante.....	70
1. Introducción.....	71
2. Descripción del modelo a simular.....	71
3. Detalles numéricos.....	73
4. Casos simulados.....	75
5. Resultados numérico.....	77
5.1 Descripción de los contornos para las simulaciones.....	77
5.1.1 Análisis cualitativo.....	77
5.2 Efecto de la velocidad del flujo de aire y relación aire combustible en la La mezcla de la flama.....	88

5.3	Temperatura y concentración de especies mayoritarias.....	89
5.3.1.	Temperatura.....	89
5.3.2	CO ₂	90
5.3.3	H ₂ O.....	95
5.3.4	O ₂	97
5.2	Concentraciones de especies minoritarias.....	100
5.4.1	CO.....	100
5.4.2	OH.....	103
5.4.3	NO.....	106
6.	Conclusiones y recomendaciones para futuros trabajos.....	109
<i>Apéndice.</i>		
A	Esquemas de discretización.....	125
	Esquemas lineales.....	125
	1. Diferencias desplazadas de primer orden.....	125
	2. Diferencias centradas.....	126
	3. Híbrido.....	126
B	Modelos de turbulencia.....	129
	1. Cierres de segundo orden.....	129
	2. Modelos de viscosidad turbulenta.....	132
	2.1 Modelo $K - \varepsilon$	133
C	Modelación de NO _x	135
	1. Rutas de formación de NO _x	135
	1.1 Mecanismo de Zeldovich.....	135
	1.2 Mecanismo N ₂ O intermedio.....	136
	1.3 Mecanismo Espontáneo.....	137
	2. Factores que influyen en la formación de NO _x	137
	2.1 Combustible.....	138
	2.2 Tiempo de residencia en la zona de combustión.....	138
	2.3 Temperatura de combustión adiabática.....	138
	2.4 Presión.....	138
<hr/> <i>Bibliografía</i>		113

Objetivo

Observar la influencia que ejerce un flujo de aire sobre la evolución de las especies químicas de una flama, en forma numérica, dentro de un quemador premezclado. El objetivo de incluir esta corriente de aire es el disminuir la producción de NOx (óxidos de nitrógeno), mediante la reducción de la temperatura dentro de la cámara de combustión.

Además, se analiza el efecto y la evolución de las especies químicas, (NO, CO, CO₂, OH, O₂, H₂O) y temperatura, que se presentan al modificar la velocidad de entrada de aire adyacente a la cámara de combustión, así como también estudiar los efectos por modificar la tasa de equivalencia de la mezcla de combustible para este mismo modelo.

Una vez obtenidos los resultados de las simulaciones, se realiza una comparación entre los resultados obtenidos a partir de las simulaciones con flujo de aire adyacente y con diferente composición de mezcla, así como también los mismos se comparan con una simulación en la cual no se incluye este flujo de aire adyacente¹.

1

- La simulación que no cuenta con flujo de aire adyacente, posee una tasa de equivalencia de $\Phi=0.7738940$, por lo que para esta simulación la premezcla es pobre.

1

Introducción

La energía eléctrica que se genera en el mundo es producida en su gran mayoría por la quema de combustibles fósiles, teniendo como principal inconveniente la generación de contaminantes locales y gases de efecto invernadero (por ejemplo, CO₂ y HC). Entre los principales contaminantes tenemos: 1) óxidos de nitrógeno [NO_x], 2) bióxido de azufre [SO₂], 3) monóxido de carbono [CO], e 4) hidrocarburos no quemados [HC]. Estos dos últimos son resultado de una baja eficiencia en el proceso de combustión; mientras que los NO_x dependen de la composición del combustible y de la temperatura de combustión. El problema ambiental relacionado directamente con la producción de estos contaminantes (SO₂ y NO_x) es generalmente la lluvia ácida, y la formación de OZONO. Para disminuir su impacto, se ha impulsado la puesta en marcha de normas ambientales más estrictas en materia de contaminación, y también en lo que se refiere a la investigación y desarrollo de fuentes de energía renovables y procesos de conversión de energía limpios.

En la actualidad se puede obtener energía eléctrica de diversas formas, una de ellas es mediante la conversión de energía nuclear a energía eléctrica, también se puede obtener haciendo uso de celdas fotovoltaicas, celdas de hidrógeno, etc. Solo por mencionar algunas. Estas dos últimas ofrecen una alternativa bastante viable a futuro puesto que no producen contaminantes; mientras que para la energía nuclear, se tiene un serio problema con el manejo y depósito de los desechos radioactivos producidos. Por estas razones la utilización de una turbina de gas es una alternativa interesante como fuente generadora de energía y de potencia.

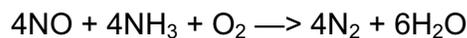
La turbina de gas ha incrementado su uso debido a la implementación de centrales de ciclo combinado, en donde puede ofrecer una eficiencia de aproximadamente el 58% con un aprovechamiento del 90% del combustible en la generación de energía eléctrica y térmica, además de requerir de menores cantidades de agua para su funcionamiento y una

inversión económica menor respecto a plantas que se dedican solo a la generación de electricidad. Además las centrales que utilizan el ciclo combinado pueden utilizar una mayor diversidad de combustibles fósiles como: gas natural, productos de la refinación del petróleo, carbón, etc. Para la turbina de gas el combustible utilizado juega un papel importante ya que influye directamente en la potencia del ciclo y la emisión de contaminantes, por ejemplo al utilizar metano (CH₄) como combustible su combustión completa está casi libre de (SO₂) y partículas, así como mantener bajas concentraciones de CO y NO_x (≈ 10 ppm).

Aún haciendo uso de este tipo de combustibles (gases) se presenta una alta concentración de (NO_x), lo cual se debe a la alta temperatura alcanzada dentro de la cámara de combustión, por eso para disminuir las emisiones de esta especie química se hace uso de diversos sistemas y métodos como los que se describen a continuación.

Para reducir las emisiones de este contaminante se aplica un método denominado Reducción Catalítica Selectiva (SCR, por sus siglas en ingles.), el cual consiste en hacer reaccionar el óxido de nitrógeno con amoníaco anhídrido dentro de un contenedor. El resultado de esta reacción de reducción es nitrógeno y agua, los cuales son inofensivos para los seres vivos y el medio ambiente. Haciendo uso de este método se puede reducir hasta en un 75% las emisiones de NO_x.

Química en el proceso de SCR.



Este proceso presenta los siguientes inconvenientes: para poder realizar este proceso se hace uso de sustancias peligrosas como el amoníaco, por lo cual es indispensable tener un manejo especial sobre estas sustancias, incrementando el costo de operación. Mientras que las dimensiones de un equipo de estas características también representa un inconveniente importante.

Otro método utilizado se denomina Combustión premezclada Pobre (Lean Premixed Combustión, LPC) el cual consiste en mezclar el combustible y el aire previo a su entrada

al quemador, de tal forma que exista un exceso de aire, este exceso de aire evita la formación de regiones de alta temperatura y por ende una menor formación de (NOx). Este tipo de equipos presenta problemas como lo es la auto ignición, propagación de la llama “aguas arriba” y el de la extinción total o parcial de la flama debido a la proximidad de la composición al límite de flamabilidad pobre, por esta razón se requiere el uso de un sistema de control muy preciso y costoso. Gore y Zhan (1994) reportan que se puede tener bajas emisiones de NOx para tasas de equivalencia² que oscilen en un valor cercano $\Phi_B=2.0$ (mezcla pobre). Por otra parte Kim et al. (154) reportan haber obtenido para trabajos similares, bajas concentraciones para tasas de equivalencia con valores entre $\Phi_B=2.0$ y $\Phi_B=1.3$ respectivamente. Después de este valor, las emisiones de NOx aumentan considerablemente y en valores de Φ_B próximos al valor estequiométrico se presentan problemas con las emisiones de NOx. De forma similar la empresa Power Systems Mfg, ha diseñado equipo en los cuales las concentraciones de NOx oscilan en 3 ppm. Para poder lograr esto se debe realizar una minuciosa mezcla entre aire y combustible. Con este proceso y un rediseño de los inyectores de combustible se reducen las fluctuaciones de la temperatura dentro de la cámara de combustión, teniendo una temperatura promedio de $\approx 1565^\circ\text{C}$, con lo que se asegura que se tienen menores zonas de alta temperatura y por lo tanto menores zonas de formación de óxidos de nitrógeno (NOx).

También se han agregado corrientes de vapor de agua, oxígeno y aire adyacentes al flujo de combustible con el fin de enfriar la cámara de combustión. La corriente de vapor de agua puede ayudar a disminuir las emisiones de NOx, sin embargo, aumenta los niveles de CO y partículas suspendidas. Además, al hacer uso del agua implica el dar un tratamiento posterior al agua, el cual es muy costoso. Por otro lado también disminuye la vida útil del equipo ya que se presentan problemas de corrosión y de erosión. El uso de oxígeno no presenta problemas excepto que el oxígeno es muy costoso para su utilización. Así que el uso de una corriente de aire para enfriar la cámara de combustión es la mejor alternativa, teniendo como principal inconveniente la disminución de la eficiencia térmica.

En esta tesis se estudia el efecto que tiene una corriente de aire adyacente en la combustión de una flama premezclada. Se estudian los efectos que se producen al incluir

² Tasa de equivalencia. Relación entre gasto másico de combustible y gasto másico de aire de una mezcla de combustible.

esta corriente de aire en la formación de contaminantes y el efecto de tener una mezcla con una tasa de equivalencia relativamente baja con un flujo de aire adyacente. La razón por la cual se realiza una simulación numérica, se debe principalmente al costo que representa el fabricar un modelo para realizar el experimento. Además la medición de contaminantes en este tipo de equipos se hace mediante el uso de técnicas no intrusivas las cuales también son costosas y difíciles de implementar. Por otra parte el avance en materia computacional proporciona una herramienta más para la simulación de estos fenómenos físicos, la computadora. Ésta permite la visualización y predicción de varias propiedades del flujo como perfil de velocidades, temperaturas, zonas de formación de especies químicas, etc. las cuales no se pueden visualizar en un modelo físico y son imposibles de estudiar a detalle.

La simulación numérica de fenómenos físicos tiene considerables ventajas como: los resultados obtenidos se pueden obtener de forma directa, para realizar varios experimentos solo se cambian valores en el código del programa y se pueden realizar varias simulaciones al mismo tiempo. Mientras que solo se tiene por inconveniente la programación, que suele ser compleja, y el margen de error de los resultados obtenidos respecto a los que se toman de forma experimental.

Para poder modelar el sistema se utilizan las ecuaciones promediadas de Reynolds, o Favre, Averaged Navier-Stokes Equations, RANS y funciones de densidad de probabilidad conjunta (PDF). El método (RANS) consiste en promediar todas las escalas espaciales y temporales de las fluctuaciones turbulentas y resolver las ecuaciones de transporte en términos de las variables medias del sistema. La evolución de las especies químicas se simulan mediante la PDF, la cual contiene toda la información estadística sobre los escalares que influyen en la reacción y permite calcular el término de reacción sin ninguna aproximación. Estas ecuaciones fueron resueltas mediante la combinación de las técnicas de Volúmenes Finitos y Monte Carlo.

2

ECUACIONES DE TRANSPORTE

2.1 Introducción

Existen ecuaciones que gobiernan el movimiento de un fluido que reacciona químicamente, las cuales nos 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 balance de masa, cantidad de movimiento, energía y por último, la ecuación de la especie química. A continuación se presenta la alternativa de ecuaciones promediadas de Reynolds o Favre Averaged Navier- Stokes Equations, RANS, que tienen exigencias razonables de cómputo en comparación con la DNS.

Por último, 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. Las ecuaciones que gobiernan el movimiento instantáneo del flujo reactivo son: continuidad, cantidad de movimiento, energía y especies químicas. Las cuales se presentan a continuación.

2.2 Balance de masa.

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:

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

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

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

Donde μ es la viscosidad molecular de la mezcla, μ_v es el coeficiente de viscosidad volumétrico y $\vec{\delta}$ 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:

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

2.4 Conservación de las especies

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

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

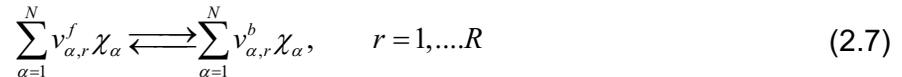
Donde m_α es la masa de la especie y m_T es la masa total de la mezcla (contenida en el mismo volumen). De acuerdo con la definición (5), la suma de todas las fracciones másicas de las especies es uno. $\sum_{\alpha=1}^N Y_\alpha = 1$.

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

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

Donde 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 $\sum_{\alpha=1}^N \bar{J}_\alpha = 0$. El flujo difusivo de la especie α , \bar{J}_α se trata más adelante.

Una expresión más general para la tasa 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 tasa 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 (2.6) también puede formularse en términos de la molalidad, n_α (número de moles por unidad de masa de la mezcla), definida como:

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

2.5 Conservación de la energía total

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

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

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. Cuando, como es el caso de los fluidos estudiados en esta Tesis, $Ec \ll 1$, el término Φ_v se puede despreciar.

El término \bar{J}_h se presenta más adelante. El intercambio de energía por radiación (\dot{Q}_r), puede ser importante en flujos con combustión cuando las temperaturas son altas. Inicialmente no se considera en esta Tesis; más adelante, el efecto de la radiación en los flujos estudiados se evaluará con el modelo de pérdidas de calor por radiación que se introduce en el capítulo 3.

2.6 Ecuación 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.

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:

$$h_\alpha = \int_{T_0}^T C_{p_\alpha} T' dT' + \Delta h_{f,\alpha} \quad (2.21)$$

Donde C_{p_α} es el calor específico a presión constante de la especie α , T_0 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 gradiente de especies, de temperatura (efecto Soret), y de presión [145]. Estos dos últimos efectos, generalmente, son 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 α y β , $D_{\alpha\beta}$ 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, \vec{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 (\vec{J}_h) se expresa con la ley de Fourier:

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

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:

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

Donde μ es la viscosidad molecular, ρ la densidad de la mezcla y D_α el coeficiente de difusión de la cada especie.

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

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

Si se aplican las suposiciones anteriores y se sustituyen las expresiones de flujos difusivos, las ecuaciones de balance de masa, 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:

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

Donde μ es la viscosidad molecular, C_p calor específico y k la conductividad térmica de la mezcla.

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 los 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 $\overline{v''\phi''}$. 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 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 entalpías de 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 Promediado de las ecuaciones

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

El 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 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:

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

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

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 valor promedio de Favre a las ecuaciones instantáneas de balance de masa, cantidad de movimiento, energía y especies químicas, se obtiene [141]:

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

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

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

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

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

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

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:

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

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

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

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

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

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 :

$$\bar{\rho} = p_0 \left(R_c T \sum_{\alpha=1}^N \frac{Y_\alpha}{W_\alpha} \right)^{-1} \quad (2.58)$$

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

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 $\bar{v}''\Phi''$, de las ecuaciones (2.54), (2.55) y (2.56) son términos desconocidos que requieren modelación. El cierre del término $\bar{\rho}\bar{v}''\bar{v}''$ 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 representar en primera instancia 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]); 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 $\underline{\phi}(\underline{x}, t) = \underline{\psi}$ para una localización \underline{x} y un tiempo, t , dados, donde $\underline{\phi}$ es el vector de composición aleatorio y $\underline{\psi}$ es el espacio muestral de $\underline{\phi}$.

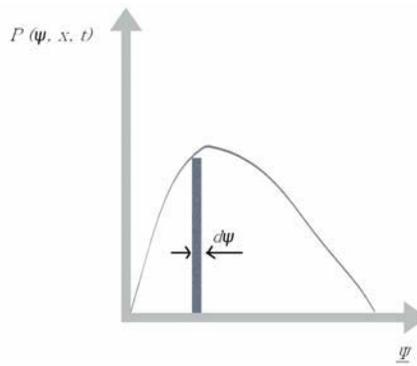


Figura 2.1. Función de densidad de probabilidad en una posición x del dominio y en un tiempo t .

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

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

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

Con esta propiedad se pueden obtener cantidades medias de la tasa de reacción o la densidad:

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

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

- La PDF se calcula a partir de una ecuación de transporte.
- La PDF 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 PDF conjunta (de todos los escalares que determinan el estado termoquímico local de la mezcla multicomponente reactiva).

2.10.1 Deducción e interpretación

Se puede obtener una ecuación de transporte para $P(\underline{\psi})$, a partir de la definición de la PDF 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 PDF 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:

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

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 a esta ecuación, se obtiene la ecuación de evolución para la PDF granular:

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

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 modelación, lo cual es una de las ventajas del método. La ecuación (2.71),

igualmente puede ser deducida a partir de la integración de la PDF conjunta de composición-velocidad, $P(\underline{V}, \underline{\phi})$, sobre el espacio de velocidad [121].

La PDF 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 re-arreglar 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 PDF de Favre conjunta (de todas las variables termoquímicas del sistema):

$$\frac{\partial}{\partial t} [\rho \tilde{P}(\underline{\psi})] + \nabla \cdot [\rho \tilde{\underline{v}} \tilde{P}(\underline{\psi})] = - \underbrace{\frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} [S_\alpha \tilde{P}(\underline{\psi})]}_{(i)} - \underbrace{\nabla \cdot [\rho \langle \underline{v}'' | \underline{\phi} = \underline{\psi} \rangle \tilde{P}(\underline{\psi})]}_{(ii)} - \underbrace{\frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} [\langle \nabla \cdot \underline{J}_{\phi_\alpha} | \underline{\phi} = \underline{\psi} \rangle \tilde{P}(\underline{\psi})]}_{(iii)} \quad (2.74)$$

De la ecuación (2.74), los términos (ii) y (iii) son no cerrados y requieren modelación.

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

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

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 de 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 PDF 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 PDF con múltiples dimensiones son el método de Monte Carlo [119], (uno de los cuales se usa en esta Tesis), es tratado en los siguientes capítulos. Con este método, la PFD 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.

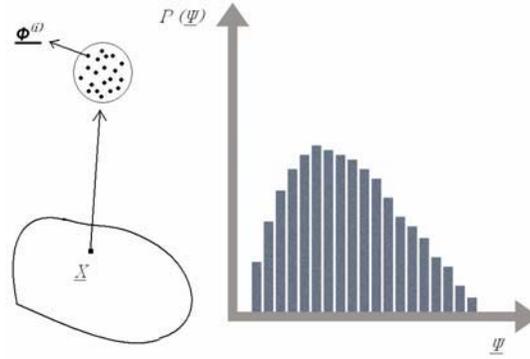


Figura 2.2. Representación discreta de la función densidad de probabilidad en una posición x del dominio y en un tiempo t .

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

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

A continuación se presentan algunas aproximaciones del término de mezcla. Teniendo en cuenta la representación discreta de la PDF que se utiliza en la solución, los modelos de mezcla se expresa 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 isotropa. Con estas condiciones, la ecuación de la PDF (2.74) queda como [121]:

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

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

$$\frac{d \langle \phi \rangle}{dt} = 0 \tag{2.81}$$

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 PDF 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 PDF 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 súperasimetría (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 factibilidad [121].

Se puede consultar Información más detallada sobre los modelos de mezcla, por ejemplo, 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]:

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

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 PDF de un escalar inerte en turbulencia homogénea e isotrópica permanece sin cambio, y no relaja la forma inicial arbitraria de la PDF 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:

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

Donde H es la probabilidad de transición:

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

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 PDF 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]):

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

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

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 seleccionaran 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.

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 utilizarán par 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 incluirá 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 altamente no lineal, por lo que su media no puede ser calculada simplemente a partir de las variables medias, que son los resultados que se obtienen del modelo. 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 fracción 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, que es sujeta a convección, alabeada, y estirada o comprimida por la turbulencia, 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]).

Los tiempos característicos de la cinética química y de la escala integral de la turbulencia, en la formación de contaminantes como el CO y NO, 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 (PDF) representa una opción alternativa. El método de la PDF permite evaluar el término químico sin ninguna aproximación si se conoce la PDF conjunta de los escalares que intervienen en el término. Para determinar la PDF local se puede recurrir a dos métodos:

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

En el capítulo 2 se presenta 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 279 reacciones y 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 su "stiffness", 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. Aun 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 modelación, 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 es 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 es revisada con 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 como que crea una zona de recirculación.

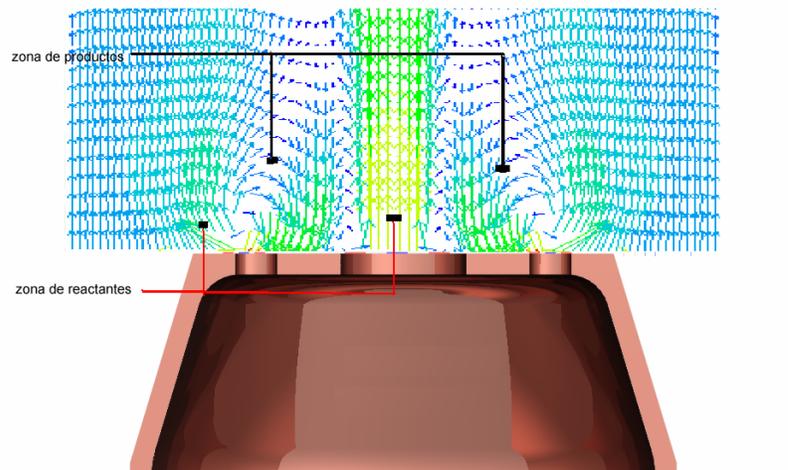
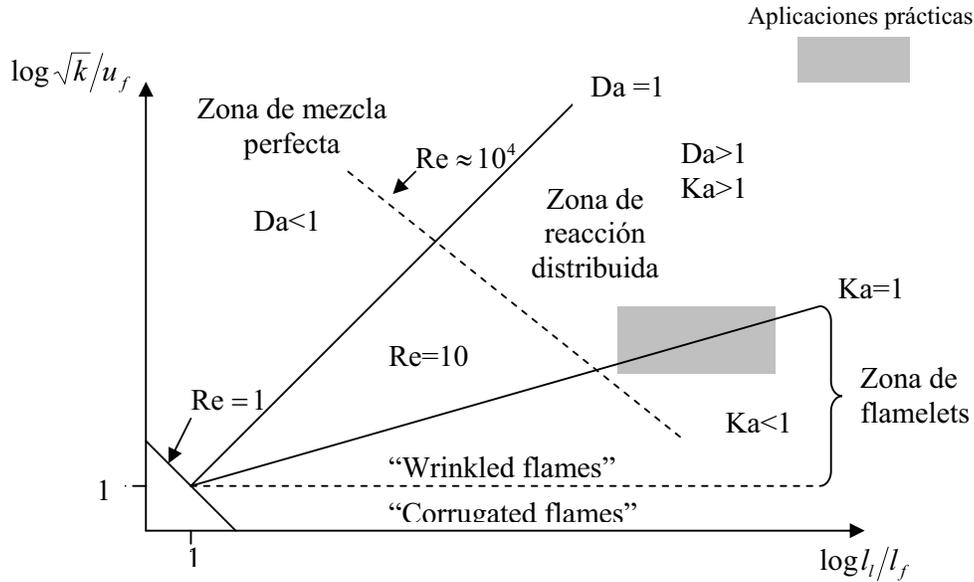


Figura 3.1. Representación esquemática de una llama premezclada.

Los flujos premezclados se pueden clasificar 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:

$$Da_I = \frac{t_I}{t_q} = \frac{u_F l_I}{\sqrt{k} l_F} \tag{3.3}$$

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 Damkóhler 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:

$$\text{Re}_T = \frac{\sqrt{kl_I}}{\nu} \quad (3.4)$$

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:

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

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

A las zonas de llama laminar y de mezcla perfecta, les corresponden $\text{Re}_T < 1$ 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 en la cual las estructuras turbulentas solamente deforman la región de combustión) está caracterizada por $\text{Re}_T \gg 1$ (régimen turbulento), $Da_I \gg 1$ (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.

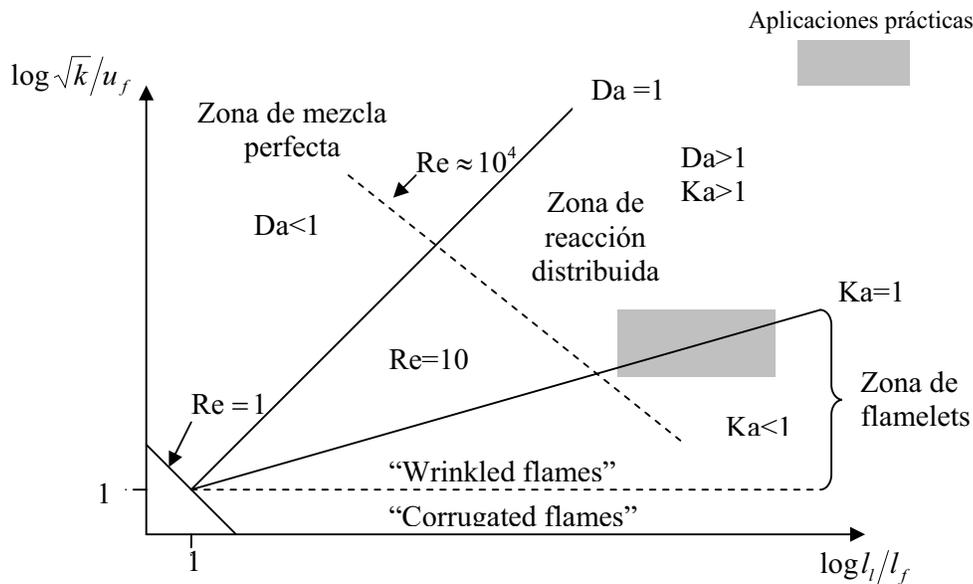


Figura 3.2. Diagrama de Borghi.

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}_c , 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:

$$\bar{S}_c = -C_{EBU} \bar{\rho} \frac{\tilde{\mathcal{E}}}{\tilde{\kappa}} \sqrt{\overline{Y_c'^2}} \quad (3.8)$$

Donde C_{EBU} es una constante y $\overline{Y_c'^2}$ 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 $\sqrt{\overline{Y_c'^2}}$ y por la fracción másica media de la especie con menor presencia:

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

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 PDF 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):

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

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

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

Algunas formas para la PDF se muestran en la Figura 3.3. Si la variable tiene un valor constante, entonces la forma de la PDF 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 PDF 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 los sesgos 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 los sesgos 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, $\overline{\phi^{n^2}}$:

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

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:

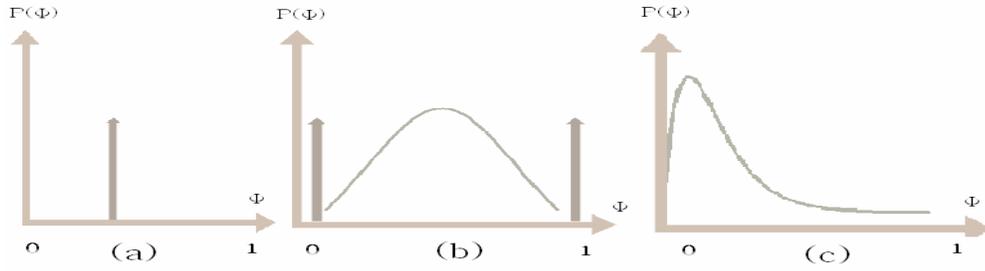


Figura 3.3. Formas para la PDF: (a) Delta de Dirac, (b) Gaussiana truncada y (c) beta

Mediante

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

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 PDF de forma asumida presenta algunos inconvenientes, entre los que se cuenta la elección de una distribución apropiada para la PDF. Así, se toma frecuentemente una función Gaussiana para la temperatura, y funciones beta para los escalares. Cuando la PDF 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 flama.

Los modelos "flamelet" describen al flujo turbulento reactivo como un conjunto de elementos de llama laminar denominados "flamelets" [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 ($Da_l \gg 1$) y la tasa de consumo del combustible (masa de combustible quemado por unidad de tiempo y por unidad de volumen) se expresa como:

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

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]):

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

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 modelación; algunos modelos son presentados por Duclos et al [44].

3.6 Mecanismos reducidos.

Incluso la combustión de los hidrocarburos 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 [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 su dificultad de resolución, 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 dificultad de resolución 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, de 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 "troncal" las hipótesis de estado estacionario para algunas especies y de equilibrio parcial para reacciones particulares [53]. Los mecanismos "troncal" 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 "troncal". 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 "stiff", 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 modelación (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 a 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.

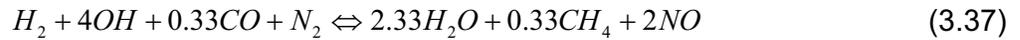
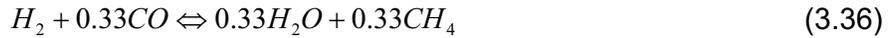
3.7 Mecanismos químicos para el metano.

Para la combustión del metano se pueden encontrar en la literatura diversos mecanismos reducidos, sin embargo el mecanismo de 5 pasos de reacción que se presenta a continuación ha presentado ventajas como la precisión en representar adecuadamente los fenómenos principales de la cinética química y la sencillez.

3.7.1 Mecanismo sistemáticamente reducido de cinco pasos.

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 se presenta en el apéndice A y 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, Espontaneo 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]:

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

$$\omega_{R2} = +\omega_2 + \omega_{11} - \omega_{14} + \omega_{15} + \omega_{18} + \omega_{19} + \omega_{22} + \omega_{23} + \omega_{25} + \omega_{27} + \omega_{32} \quad (3.40)$$

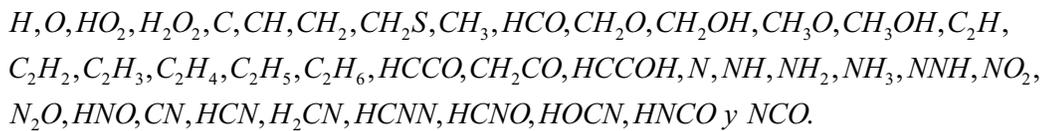
$$\begin{aligned}
& + \omega_{33} + \omega_{34} + \omega_{35} + \omega_{36} + \omega_{37} + \omega_{38} + \omega_{39} + \omega_{40} + \omega_{41} + \omega_{42} + \omega_{43} + \omega_{45} + \omega_{47} \\
& + \omega_{52} + \omega_{55} + \omega_{56} + \omega_{57} + \omega_{61} + \omega_{66} + \omega_{67}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

$$\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:



3.7 Método de representación de la química

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

$$\frac{d}{dt}(\phi_\alpha) = S_\alpha, \quad \alpha = 1, \dots, N \quad (3.44)$$

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 "stiff", como el representado por la ecuación (3.44), requiere utilizar pasos temporales pequeños y métodos de integración especiales [57]. Algunas de las rutinas numéricas para resolver estos sistemas "stiff" 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 a acceder durante la simulación. Así, durante la simulación del flujo, los cambios en las especies fueron obtenidos de la tabla por interpolación multidimensional [61].

Para evitar almacenar regiones del espacio de composición a las que no se accedió durante la simulación, generalmente se limita el dominio almacenado para cada escalar. 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 ilustró 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 determinó 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

$$n_{CH_4} + n_{CO_2} + n_{CO} = \frac{f}{W_{CH_4}} \quad (3.45)$$

Átomos de H

$$n_{H_2} + 2n_{H_2O} + 4n_{CH_4} = \frac{4f}{W_{CH_4}} \quad (3.46)$$

Átomos de O

$$2n_{O_2} + n_{H_2O} + n_{CO} + 2n_{CO_2} = \frac{2\psi(1-f)}{W_{N_2} + \psi W_{O_2}} \quad (3.47)$$

Átomos de N

$$n_{N_2} = \frac{(1-f)}{W_{N_2} + \psi W_{O_2}} \quad (3.48)$$

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

$$n_T = n_{H_2} + n_{O_2} + n_{H_2O} + n_{CH_4} + n_{CO} + n_{CO_2} + n_{N_2} \quad (3.49)$$

En la deducción de las ecuaciones (3.45), (3.46), (3.47) y (3.48) 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 simuló 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 $n_{CO_2} = n_{CO} = 0$:

$$n_{CH_4}^{\max} = \frac{f}{W_{CH_4}} \quad (3.50)$$

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:

$$n_{CH_4}^{\min} = 0 \quad (3.51)$$

➤ 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 $n_{CO_2} = 0$:

$$n_{CO}^{\max} = \frac{f}{W_{CH_4}} - n_{CH_4} \quad (3.52)$$

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

$$n_{CO}^{\min} = 0 \quad (3.53)$$

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

Haciendo uso de las ecuaciones (3.45) y (3.46) y con la determinación de los límites máximo y mínimo para n_{O_2} , se obtienen los límites para n_T [25]:

$$n_T^{\max} = \frac{(1+\psi)(1-f)}{W_{N_2} + \psi W_{O_2}} + 2 \left(\frac{f}{W_{CH_4}} + \frac{n_{CO}}{4} \right) - n_{CH_4} \quad (3.54)$$

$$n_T^{\min} = \frac{(1-f)}{W_{N_2} + \psi W_{O_2}} + \frac{3f}{W_{CH_4}} - 2n_{CH_4} + \max \left[\frac{\psi(1-f)}{W_{N_2} + \psi W_{O_2}} - \frac{2f}{W_{CH_4}} + 2n_{CH_4} + \frac{1}{2}n_{CO}, 0 \right] \quad (3.55)$$

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.

3.10 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 costos 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]):

$$q_{rad} = -4\sigma K_p (T^4 - T_\infty^4) \quad (3.57)$$

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]:

$$K_p = X_{CO} K_{p,CO_2}(T) + X_{H_2O} K_{p,H_2O}(T) \quad (3.58)$$

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

$$K_{p,CO_2} = 10.0^a \quad (3.59)$$

$$K_{p,H_2O} = 10.0^b \quad (3.60)$$

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

$$a = 2.689 - 0.2986(10^{-2})T + 0.1080(10^{-5})T^2 - 0.1317(10^{-9})T^3 \quad (3.61)$$

y

$$b = -1.262396(10^{-3})\left(\frac{T}{300}\right)^4 + 3.020593(10^{-2})\left(\frac{T}{300}\right)^3 - 2.532505(10^{-1})\left(\frac{T}{300}\right)^2 + 6.776739(10^1)\left(\frac{T}{300}\right) + 1.032984 \quad (3.62)$$

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.

4

MÉTODO DE SOLUCIÓN

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 (PDF) merece atención especial, pues presenta para su solución el inconveniente adicional de su alta dimensionalidad. Las variables independientes de la PDF 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 PDF; la solución se acopla a un método de volúmenes finitos, que resuelve las ecuaciones promediadas de balance de masa, 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 PDF. 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 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 dinámica de fluidos computacional, por ejemplo en Patankar [110], Ferziger y Peric [48]. A continuación, se proporciona un resumen, el cual sirve 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 .

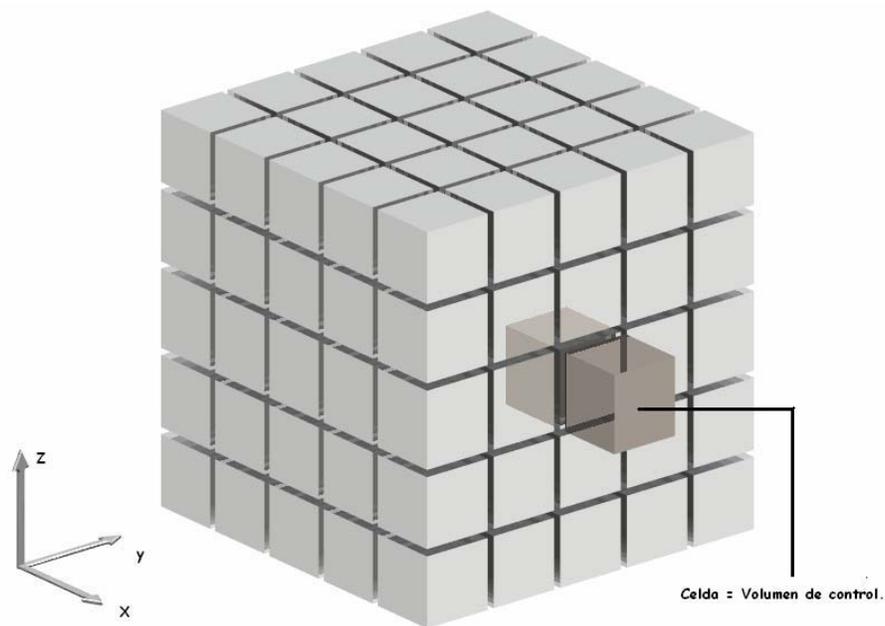


Figura 4.1 Representación del sistema discretizado en volúmenes finitos.

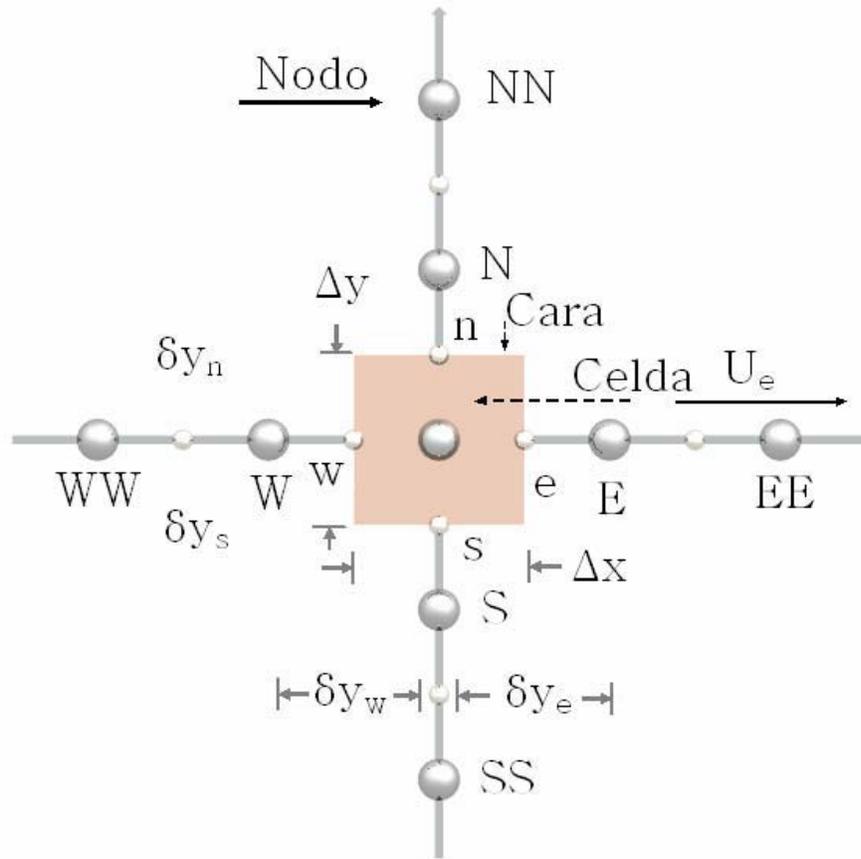


Figura 4.2 Diagrama esquemático de un volumen de control bidimensional

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

Definiendo los símbolos F , D , y Pe como:

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

Donde \bar{v}_i es la velocidad en la cara i , δi es la distancia entre los nodos que incluyen la cara i y Pe es de número de Peclet, que es una relación entre la convección y la difusión, \bar{v} es la velocidad en la cara i y x_i . (Las expresiones F y D representan el efecto de los términos convectivo y difusivo de la ecuación de transporte (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 decajada; 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 D se presentan algunos de los esquemas de discretización lineales y no lineales de alto orden, 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:

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

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

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 balance de masa 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 dominancia 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 PDF. Este método 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 PDF es solo factible, dada su alta adimensionalidad, mediante técnicas de Mante Carlo [117]

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

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

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 PDF 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 PDF mediante la técnica de volúmenes finitos. En cada celda la PDF 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 aplican 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 PDF

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

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

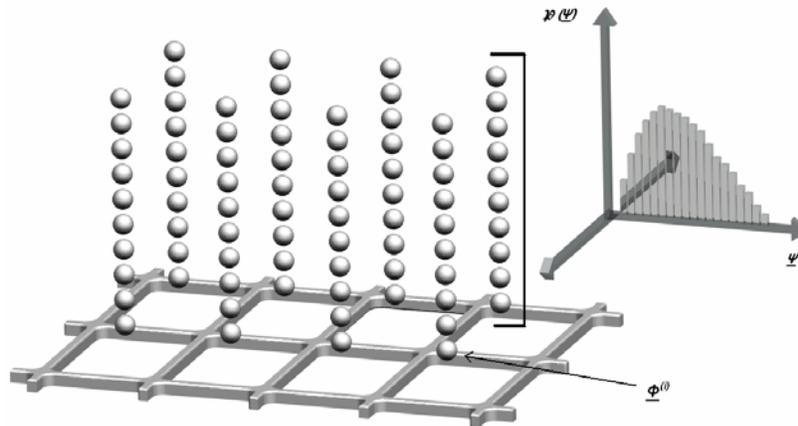


Figura 4.3 Representación esquemática de las partículas en la malla de volúmenes finitos.

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 PDF (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 PDF 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.

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

La función de densidad de probabilidad, $P(\underline{\psi})$, 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 definieron previamente los operadores identidad, transporte, reacción y mezcla como sigue:

- Identidad, \mathcal{I} :

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

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

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

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

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

➤ 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 PDF 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:

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

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

$$\tilde{P}_p = (\tau + S_Q)\tilde{P}_{T,S} \quad (4.29)$$

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 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 PDF 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 PDF 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; puede encontrarse en [119] una justificación rigurosa de que las reglas enunciadas simulan en verdad el comportamiento de la PDF.

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 PDF. 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 PDF 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:

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

Como la PDF 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 PDF 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):

$$N_p \geq N_p \frac{a_w}{a_T} + N_p \frac{a_e}{a_T} \tag{4.32}$$

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:

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

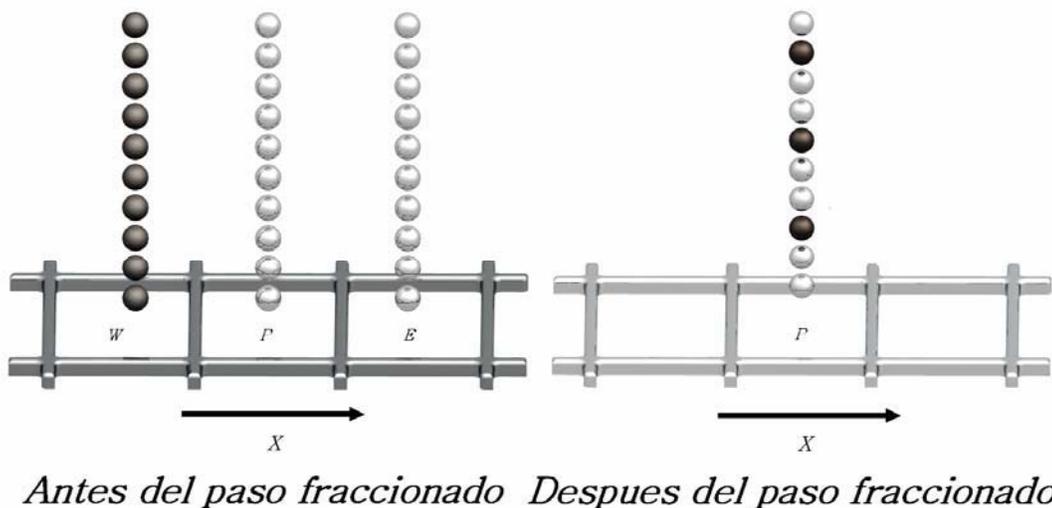


Figura 4.4 Representación del paso fraccionado de transporte en la dirección x para la celda

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 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 PDF 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 PDF en el nodo considerado son "barajadas" aleatoriamente en un proceso que se denominó "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 PDF. El paso fraccionado de mezcla es:

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

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.

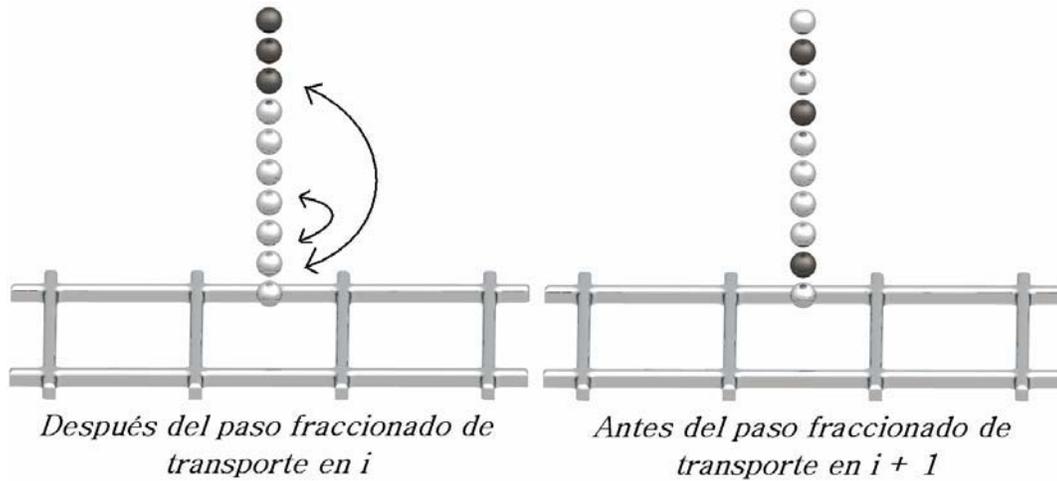


Figura 4.5 Representación del proceso de agitación en la celda P.

A diferencia del paso fraccionado de transporte, que involucra la interacción de la PDF 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:

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

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:

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

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:

$$\tilde{P}_p = (\tau + S_Q)\tilde{P}_{T,S} \quad (4.39)$$

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:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\phi^{(i)}) = \mathcal{S}_\phi^{(i)} \quad (4.40)$$

Donde $\Delta\phi$ 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 PDF 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_x 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 $\tilde{\epsilon}$ 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 PDF 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.

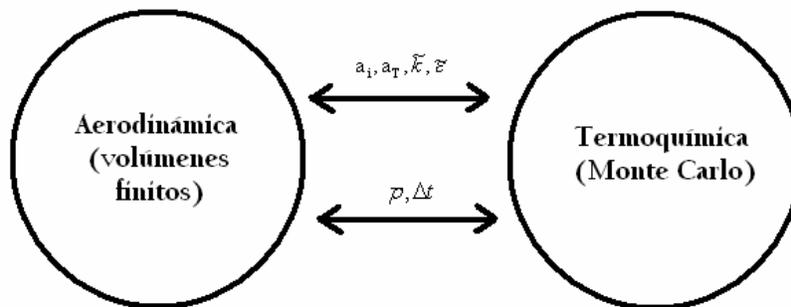


Figura 4.6 Representación esquemática del acoplamiento entre los métodos de volúmenes finitos y de Monte Carlo.

5

Simulación numérica de un quemador con flujo de aire adyacente.

5.1 Introducción

En este capítulo se presentan los resultados obtenidos de las simulaciones numéricas realizadas mediante el modelo presentado en el capítulo 2.

Se realizaron dos series de simulaciones; en la primera serie de simulaciones se estudió el efecto que se produce en la cámara de combustión al variar la velocidad del flujo de aire adyacente que entra a la cámara de combustión. En la segunda serie de simulaciones se modificó la relación de equivalencia de la mezcla de metano y aire, de tal forma que se tiene ingresando al quemador una mezcla pobre, una estequiométrica, y una rica. En esta segunda serie de casos, se mantuvo constante tanto el gasto del flujo de aire adyacente como el gasto de la mezcla aire y combustible que ingresa por el quemador.

En los resultados podemos observar el efecto que tiene el flujo de aire adyacente en la temperatura y en las especies de concentración mayoritarias (CH_4 , H_2O) y especies minoritarias (OH , NO , CO).

5.2 Descripción del modelo simulado.

El caso considerado es un quemador como el que se muestra esquemáticamente en la *figura 1*. El flujo dentro de este quemador es confinado, y es estabilizado mediante una boquilla. Se colocó una mezcla de aire y metano en el espacio de combustión a través de los agujeros de la boquilla. Se formaron zonas de recirculación aguas abajo de la boquilla, en las cuales fueron atrapados los gases productos de la combustión y calientes, que tienen el propósito de quemar la mezcla aire-combustible entrante. Se introdujo un chorro de aire lateral en el espacio anular alrededor de la flama. El objetivo de este flujo de

aire turbulento es la disminución de la temperatura, que favorece la formación de los NO térmicos.

La mezcla que sale por estos orificios tiene en la primera serie de experimentos una tasa de equivalencia de $\Phi = 0.42719$. El flujo de aire adyacente tiene una temperatura de 300 K. La longitud del sistema a modelado, L , es de 0.203 [m], que se mide a partir de la boquilla (figura 2).

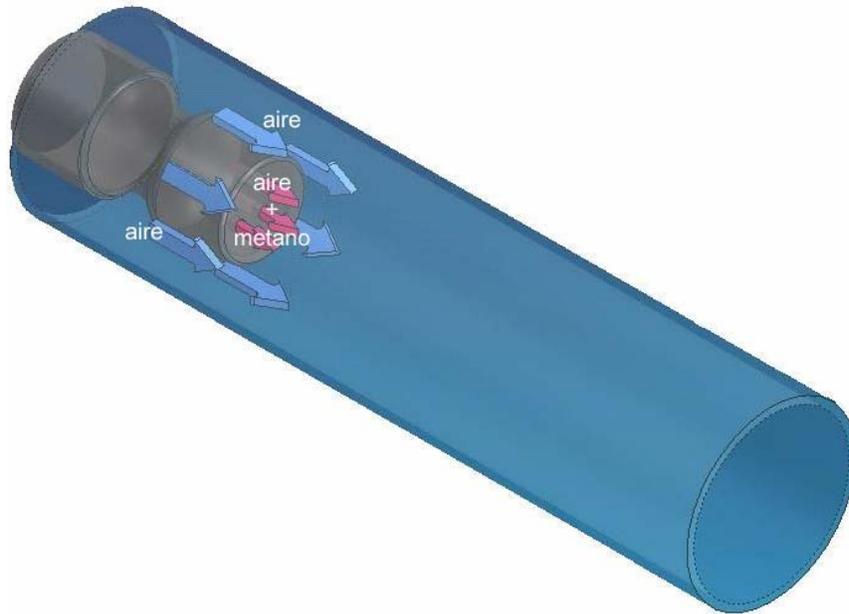


Figura 1. Modelo a simular.

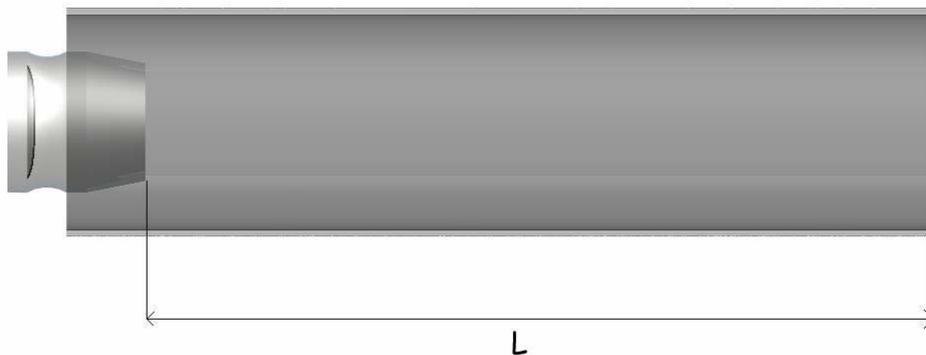


Figura 2. Modelo a simular (perfil).

El diámetro del quemador, figura 3, es $\Phi_1=0.04445$ [m]. La placa cuenta con cinco orificios, uno en el centro con un diámetro $D_1= 0.0066675$ [m] y cuatro más colocados en un arreglo circular con diámetro $D_2 = 0.01889125$ [m], y un diámetro interno de tubo $\Phi_2= 0.0395$ [m].

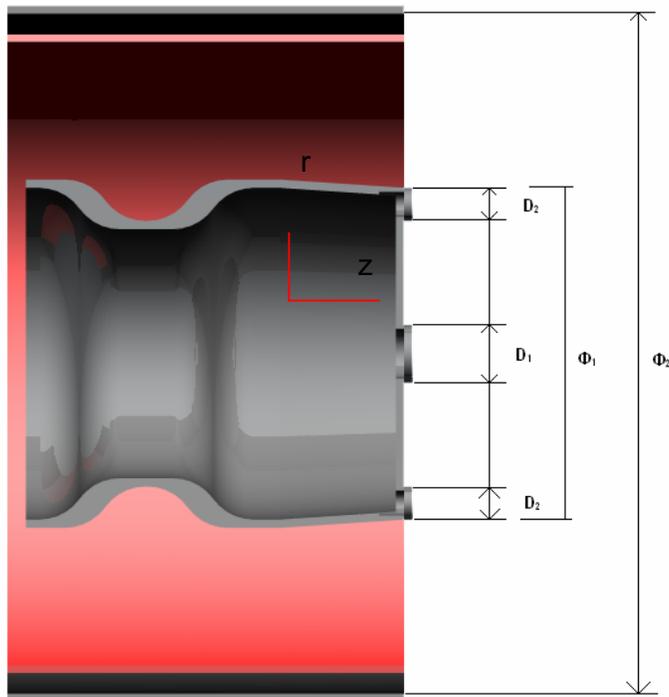


Figura 3. Dimensiones de la boquilla

5.3 DETALLES NUMERICOS

Con fines de ahorro en tiempo de cálculo, la simulación del sistema mostrado anteriormente se hizo en dos dimensiones y en coordenadas cilíndricas. El dominio de cálculo se discretiza con una malla de 40 x 45 celdas en la dirección radial (r) y axial (z) respectivamente.

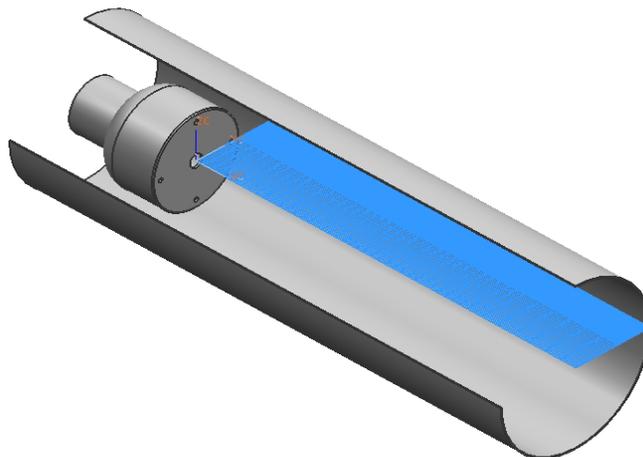


Figura 4 Dominio de la simulación y el sistema.

En la *figura 5* se presenta el dominio que se usó en la simulación. En la entrada de la mezcla al dominio, las condiciones de velocidad y energía cinética turbulenta y su tasa de disipación se asignan a partir de una simulación en frío aguas arriba. En la *figura 4* se muestra la malla con las condiciones de frontera del sistema.

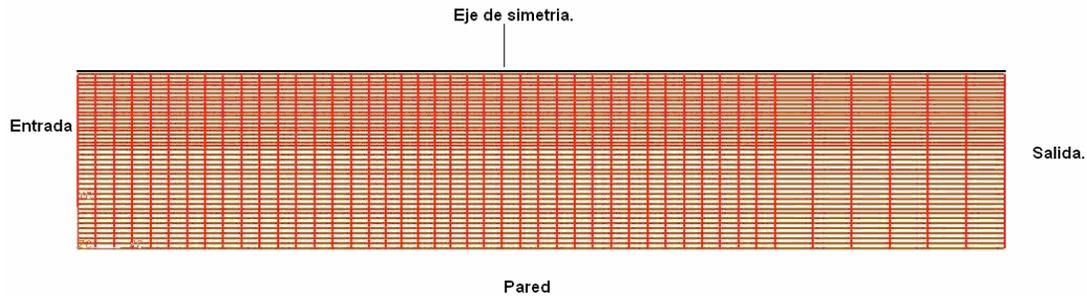


Figura 5. Dominio completo de la simulación.

En el módulo de volúmenes finitos del modelo estocástico, la turbulencia se simuló con el modelo $K - \varepsilon - RNG$. La discretización del término convectivo de las ecuaciones de cantidad de movimiento y del modelo de turbulencia se hizo con el modelo de discretización híbrido. En el módulo de Monte Carlo, la reacción química se modeló con el mecanismo de cinco pasos de reacción de Mallampalli et al* (), sistemáticamente reducido a partir del mecanismo detallado GRI 2.11*. Suponiendo que no hay pérdidas de calor y que las especies tienen igual difusividad, la PDF 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 fracción de mezcla no se incluye porque es constante en el dominio (capítulo 3), como lo es la entalpía en ausencia de pérdidas de calor y en la hipótesis de igual difusividad.

La PDF es por tanto:

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

Donde como escalares independientes de la PDF, n_α , se tomó la molalidad de la especie α . La representación de la química se hizo con la técnica de las tablas de tabulación insitu.

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

En cada celda del dominio, la PDF se simuló con 100 partículas de Monte Carlo. Con estas condiciones se tuvo aproximadamente un tiempo de cálculo de 7 días en una estación de trabajo “sunblade 2000 con sistema operativo Solaris 8.0, dos procesadores UltraSPARC III Cu” simulando 6000 pasos temporales.

En este trabajo no se contó con datos experimentales, sin embargo el modelo numérico ya se ha validado para el caso de una llama turbulenta de premezcla pobre estabilizada mediante un cuerpo romo (Vicente et al., 2004, y Vicente et al., 2005.)[155]

Los resultados obtenidos para cada uno de los casos se presentan a continuación.

5.4 Casos simulados.

Se realizaron dos series de simulaciones para estudiar su efecto en las concentraciones de las especies químicas. En primera, se estudia el efecto que tiene la velocidad del flujo de aire adyacente que entra a la cámara de combustión. En la segunda serie de simulaciones se modifica la tasa de equivalencia de la mezcla aire y combustible, de tal forma que se tienen mezclas: 1) pobre, 2) estequiométrica y 1) rica. En la tabla 1, se muestran las dos series de casos simulados.

Primer serie de simulaciones.	Velocidad de salida de aire	Tasa de equivalencia Φ
Quemador s/flujo de aire	10	$\Phi=0.773894$
Quemador 1 c/flujo de aire	10	$\Phi=0.773894$
Quemador 2 c/flujo de aire	6.0	$\Phi=0.773894$
Quemador 3 c/flujo de aire	3.54026	$\Phi=0.773894$
Quemador 4 c/flujo de aire	1.77013	$\Phi=0.773894$

(a)

Simulación	Velocidad de salida de aire	Tasa de equivalencia Φ
Quemador 5 c/flujo de aire.	6.0	$\Phi=0.77389407$
Quemador 6 c/flujo de aire.	6.0	$\Phi_1=1.0000000$
Quemador 7 c/flujo de aire.	6.0	$\Phi_2=1.3955600$

(b)

Tabla 1. (a) Serie de simulaciones con velocidad de flujo de aire modificada. (b) serie de simulaciones con variación en la tasa de equivalencia aire-combustible.

Cabe destacar que la influencia del flujo de aire adyacente se compara, principalmente con el caso en el que existe un flujo de aire nulo, el cual se simula con la presencia de una placa plana (disco). Este caso es mostrado en la figura 5.

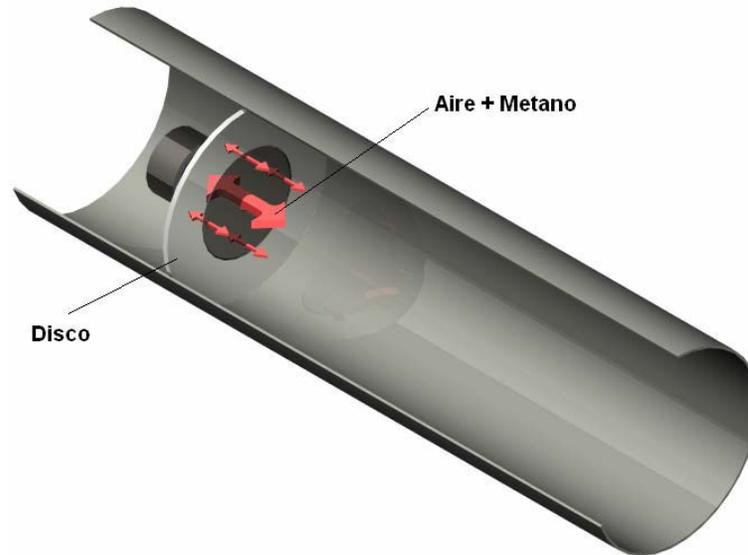


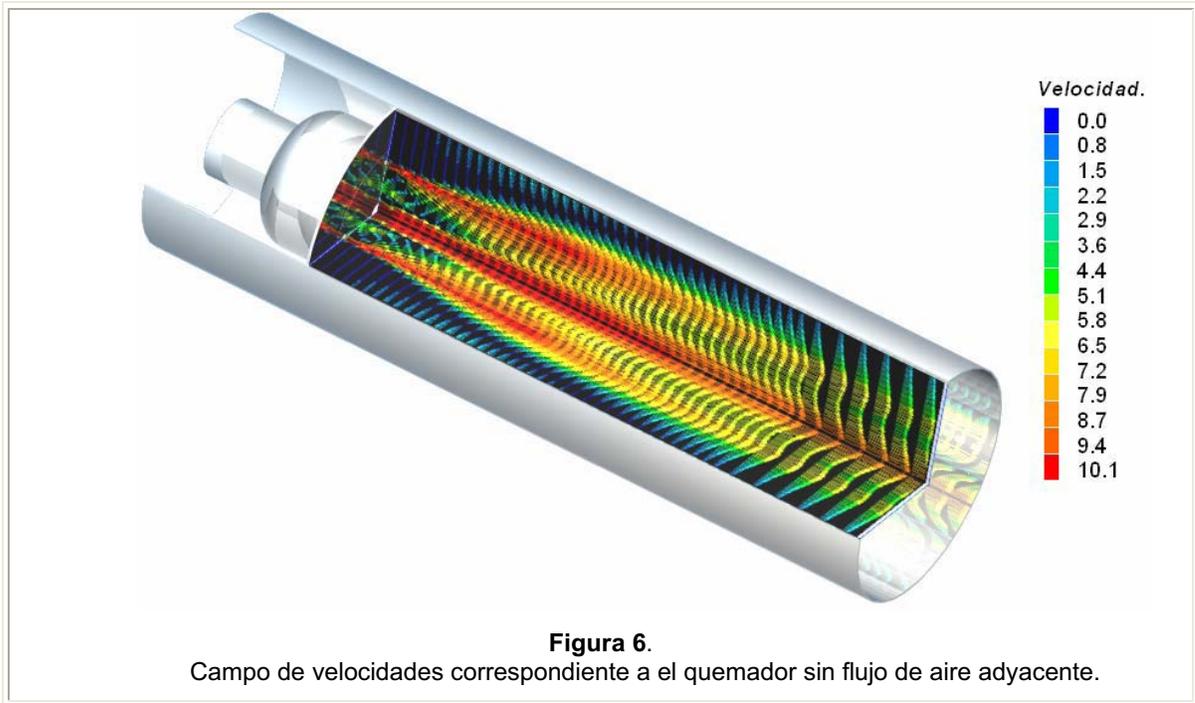
Figura 5. Esquema de la simulación de aire con flujo nulo.

5.5 Resultados numéricos.

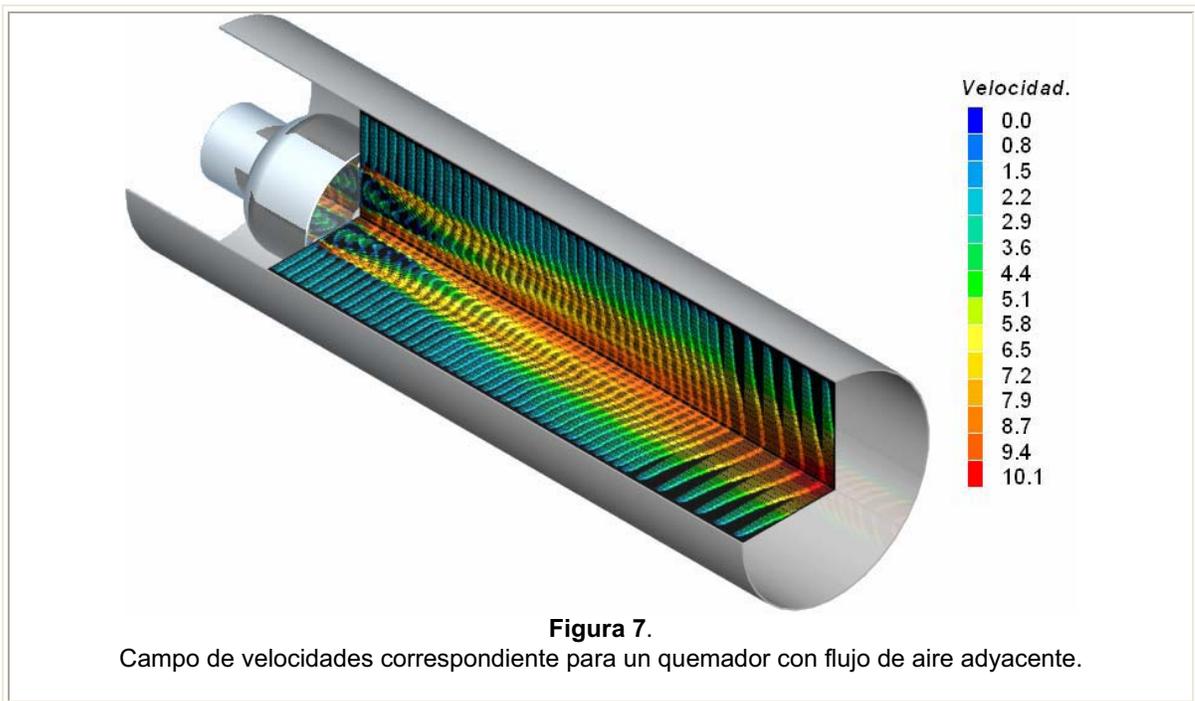
5.5.1 Análisis cualitativo

En esta sección se presentan los resultados obtenidos tanto para los casos sin y con flujo de aire adyacente. Primero se muestran algunos resultados generales de los cálculos, y después se analiza el efecto del cambio en la velocidad del aire adyacente y la composición en la mezcla. En la primera parte solo se muestran los resultados de la simulación en la cual la velocidad del flujo de aire es de 6 [m/s], debido a que los demás casos son semejantes. No obstante, se presentan diferencias más acentuadas debido a la acción del flujo de aire adyacente, que tiene una mayor influencia a velocidades mayores. Las comparaciones en las variaciones de cada uno de los parámetros anteriores se hacen en el centro del quemador y a lo largo del mismo, que es donde se nota principalmente los efectos. Las longitudes se muestran siempre adimensionadas con el diámetro de la boquilla.

La figura 6 muestra el campo de velocidad que se presenta en el quemador sin flujo de aire adyacente. En esta figura se aprecia que la mayor velocidad se tiene en las salidas de la mezcla aire y combustible de la boquilla. En esta boquilla se forman zonas de recirculación que estabilizan la llama. La primera se forma a la salida de la boquilla, mientras que la segunda zona de recirculación se forma en la periferia de la boquilla. 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 en una llama no confinada (el efecto en la pared de la llama se está estudiando paralelamente en otro trabajo).

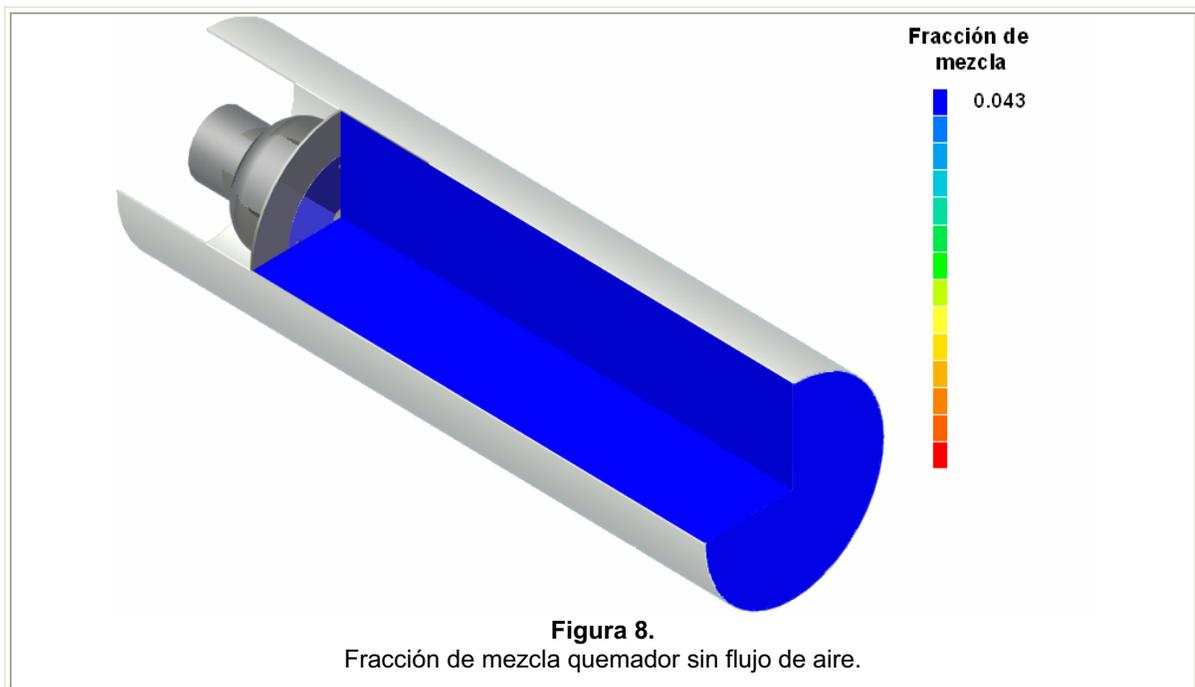


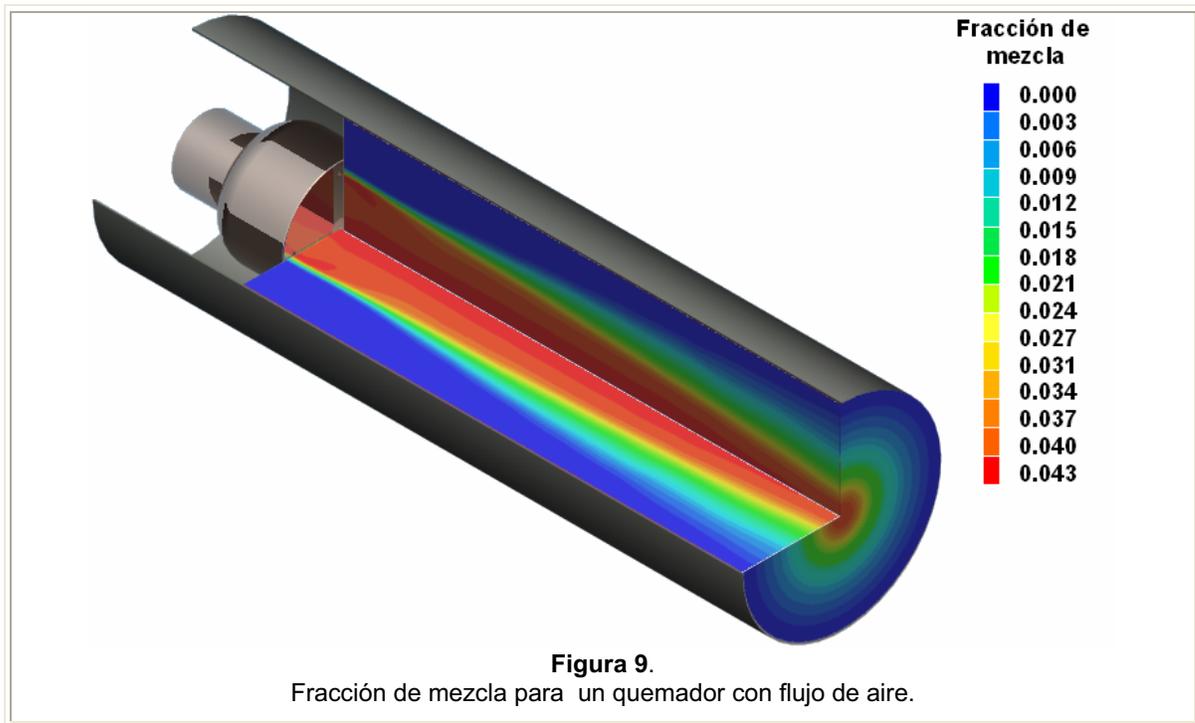
La figura 7 muestra el campo de velocidad que se presenta para simulaciones con flujo de aire. A diferencia del comportamiento mostrado para el caso sin flujo de aire, aquí desaparece la zona de recirculación que se formaba en la periferia de la boquilla.



La fracción de mezcla para los casos con y sin flujo adyacente de aire dentro de la cámara de combustión se presenta en las figuras 8 y 9 respectivamente. Como era de esperarse, la fracción de mezcla, que es un escalar conservado, se mantiene constante para la simulación sin flujo de aire.

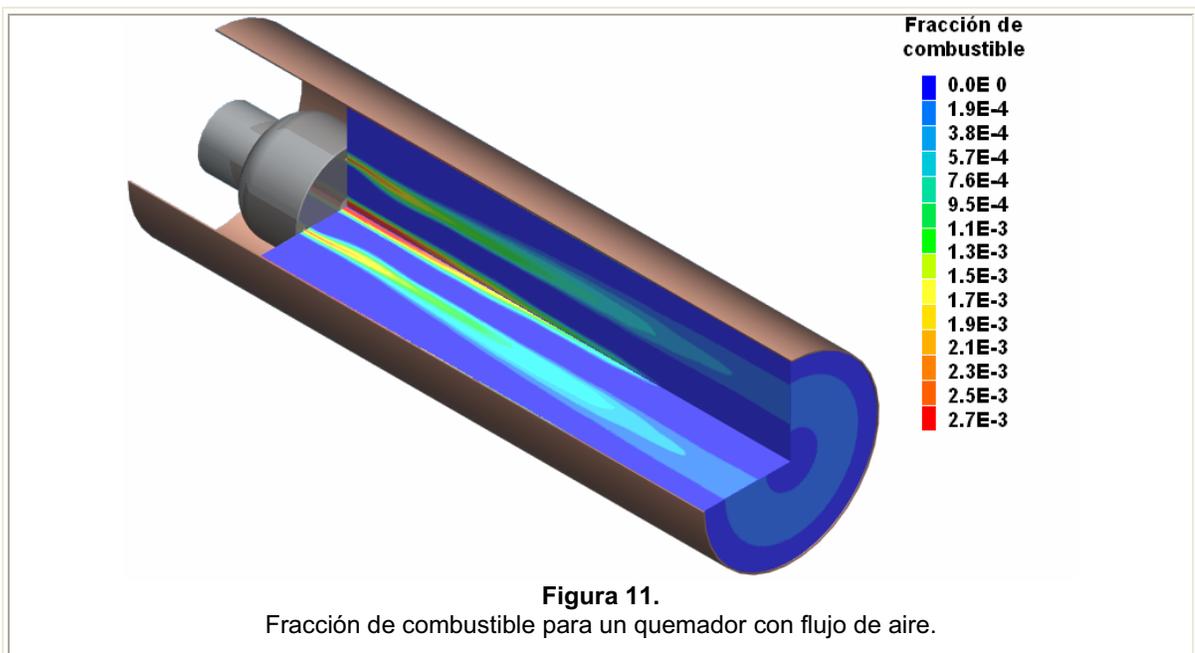
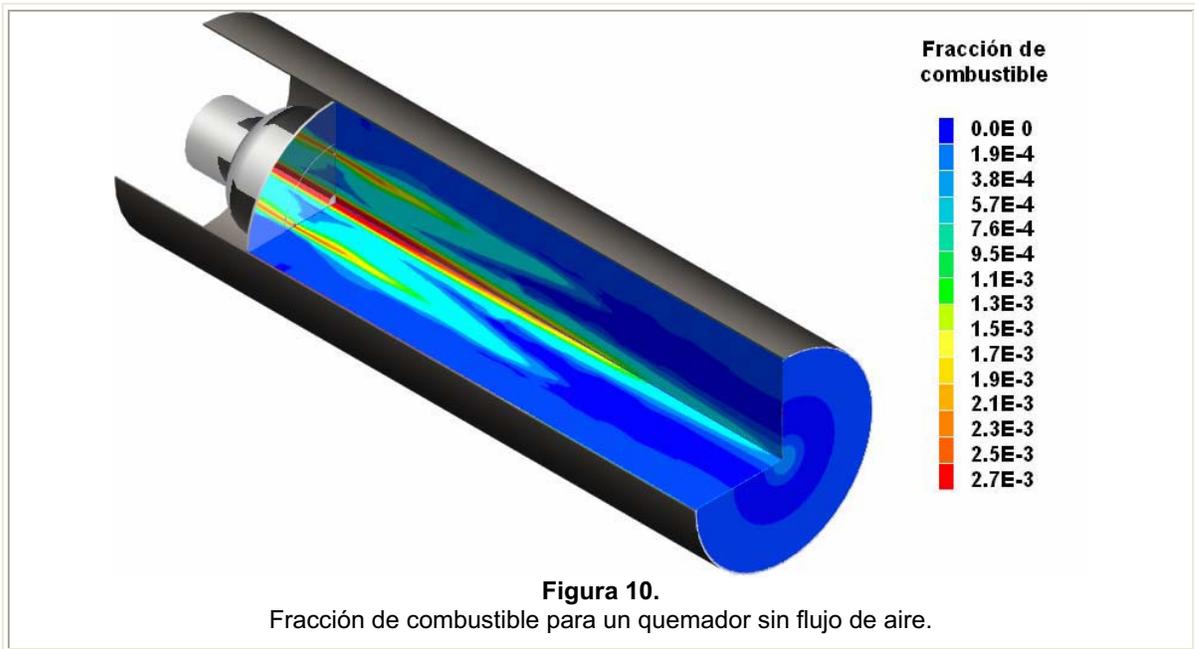
La simulación de la dispersión de este escalar es un indicativo que la simulación es correcta. En el caso con flujo de aire adyacente, la región de mezcla es máxima en la zona central de la cámara de combustión y es cero en la corriente de aire. La velocidad del flujo de aire adyacente tiene un efecto importante en la dispersión de esta fracción de mezcla, mientras mayor es la velocidad, menor es la dispersión hacia la periferia de la boquilla.



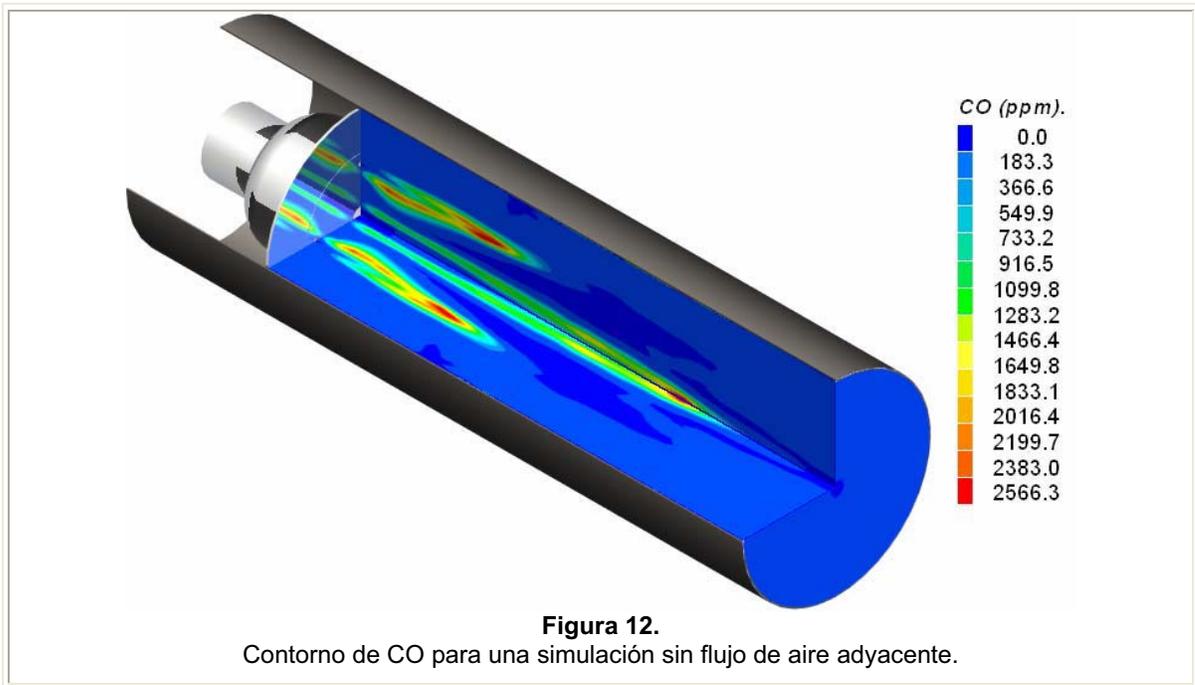


Las figuras 10 y 11 muestran los contornos de la fracción molar de metano para los casos sin y con flujo de aire respectivamente. En las zonas de recirculación, las concentraciones de metano tienen un valor casi nulo, que es aproximadamente su valor de equilibrio. Una mayor dispersión de metano se presenta en la simulación del quemador para el caso sin flujo de aire adyacente, que se debe por la falta de fluido en esas zonas. En zonas posteriores a la zona de recirculación las concentraciones de metano son próximas a cero.

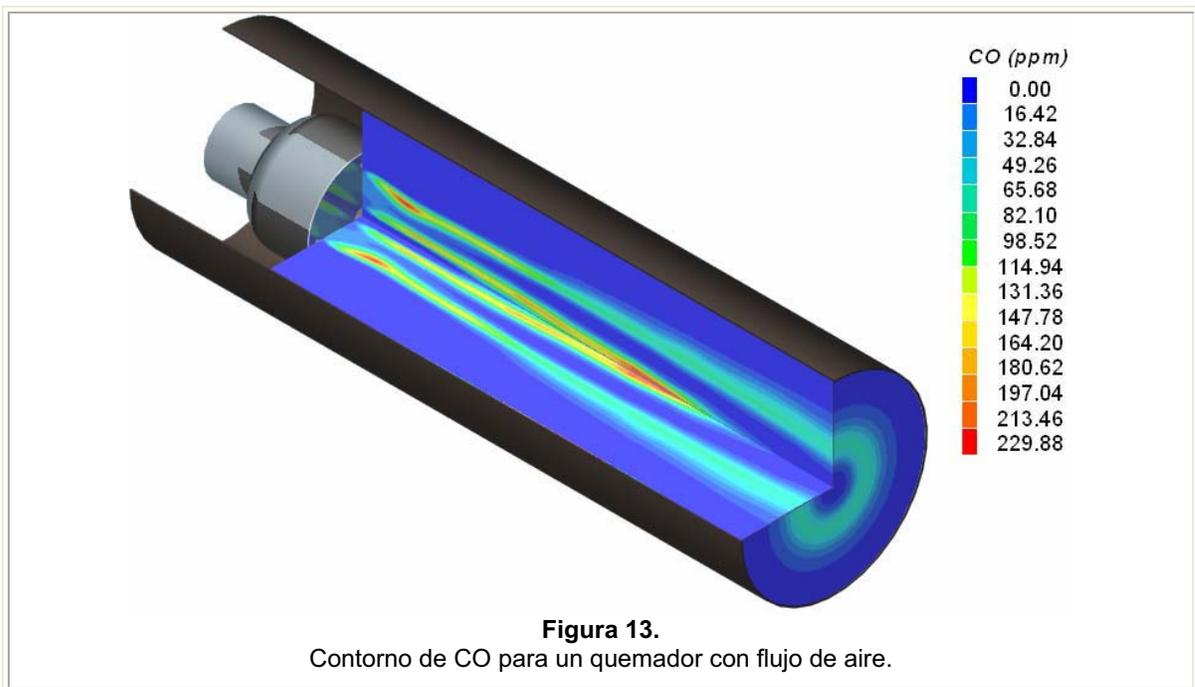
Las zonas de recirculación son zonas de gases productos de la combustión, por lo que su alta temperatura produce la ignición de la mezcla de gases frescos que entra por los orificios de la boquilla. En la frontera entre los productos calientes y los reactantes frescos se produce principalmente la reacción.



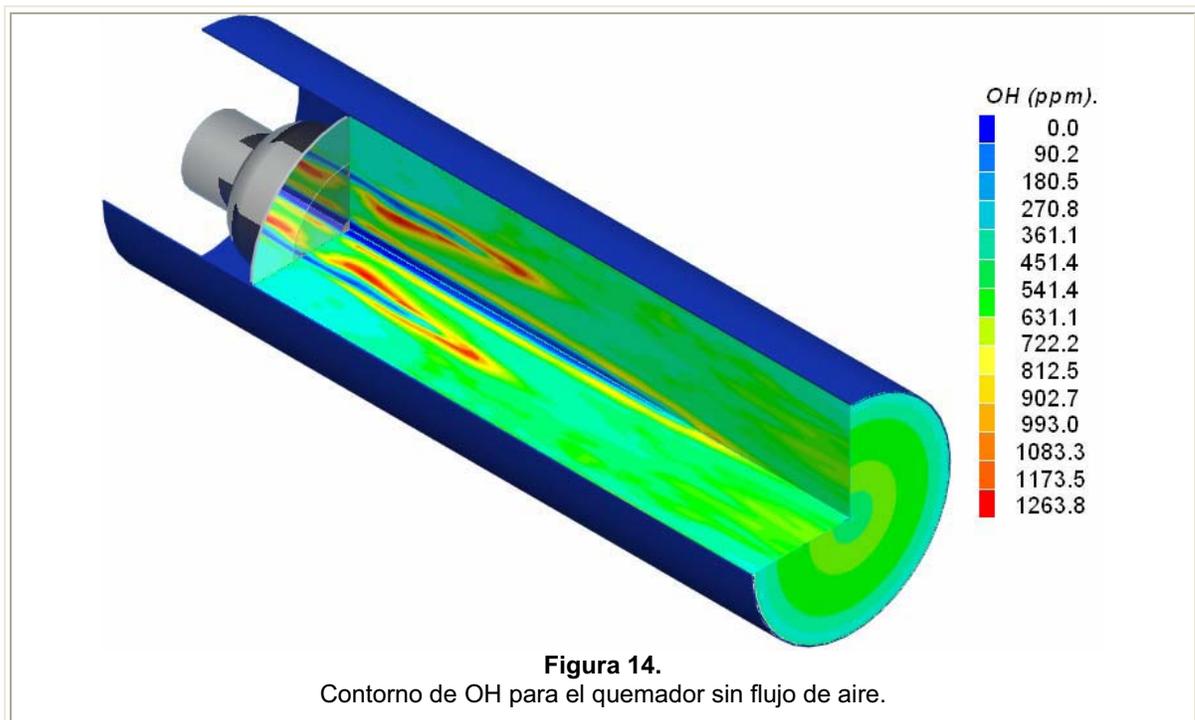
El contorno de fracción molar de CO dentro de la cámara de combustión para el caso sin flujo de aire adyacente se presenta en la figura 12. La mayor concentración de CO se tiene en la frontera entre los gases productos de la combustión y la mezcla de reactantes frescos, que es donde se forma principalmente. En esta zona de reacción se alcanzan concentraciones de aproximadamente 2050 ppm.



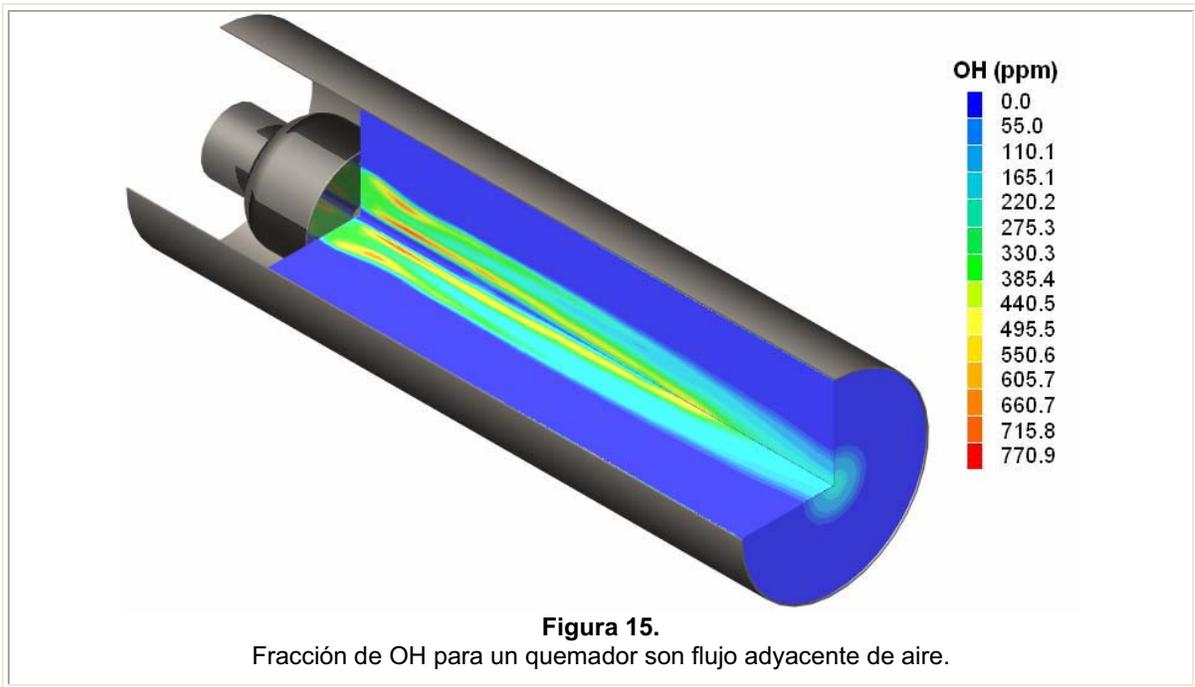
La figura 13 muestra el contorno de CO para la simulación con flujo de aire, la máxima formación se lleva a cabo en la misma zona pero la concentración varía de acuerdo a la velocidad de entrada de aire y tasa de equivalencia.



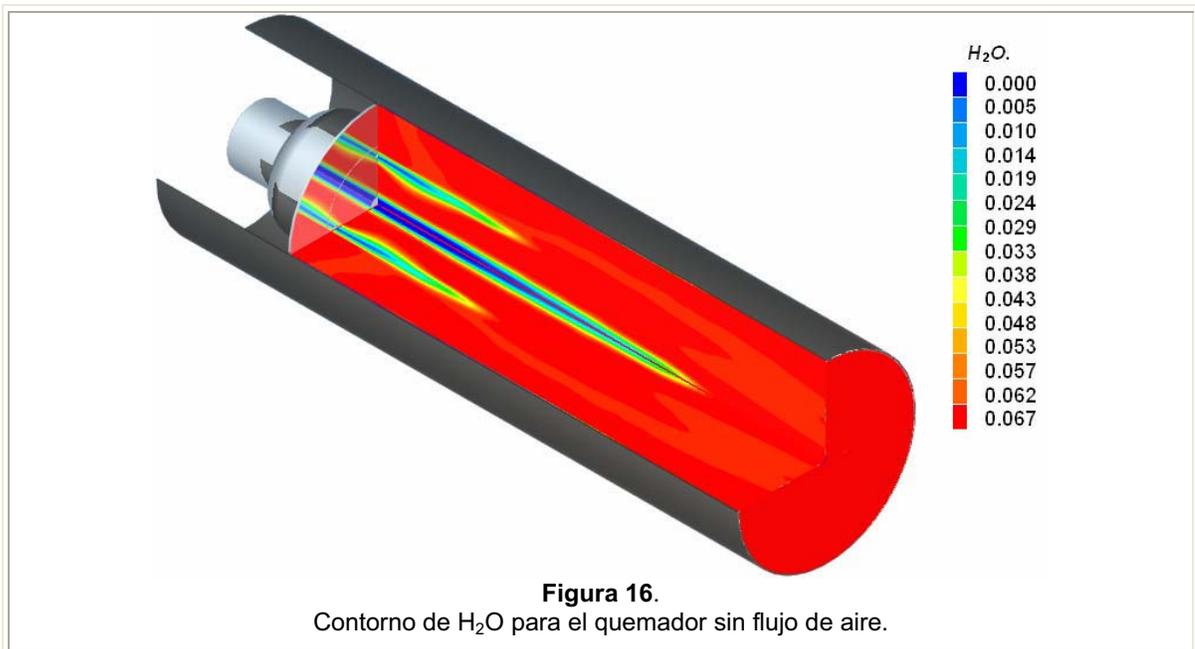
La figura 14 muestra los contornos de OH, que al igual que el CO su mayor concentración se localiza en la frontera entre los reactantes frescos y productos calientes. El OH, para la simulación sin flujo de aire, presenta una concentración máxima de aproximadamente 1900 ppm. En el resto del quemador, se tiene una concentración aproximadamente uniforme de 900 ppm.

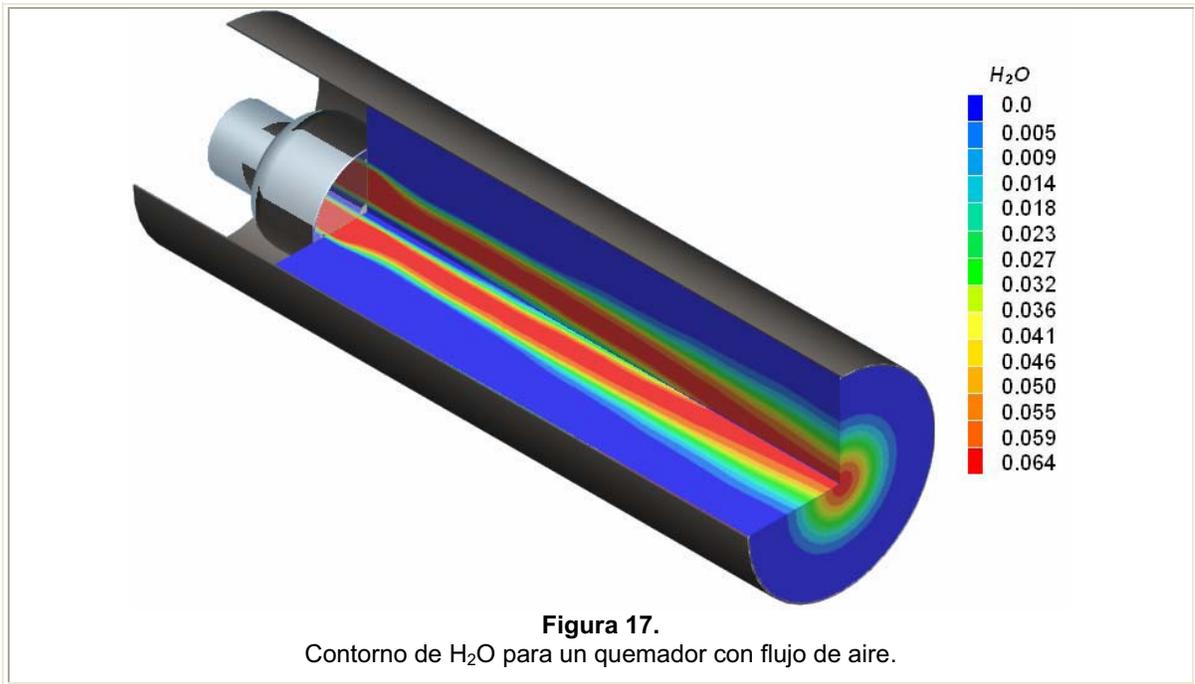


El contorno de OH para la simulación con flujo de aire se muestra en la figura 15. La concentración de OH es menor respecto al caso anterior. La influencia del flujo de aire sobre la producción de esta especie química se refleja en el tamaño de la zona de concentración de OH, la cual es de mayor tamaño mientras menor es la velocidad de entrada de aire.

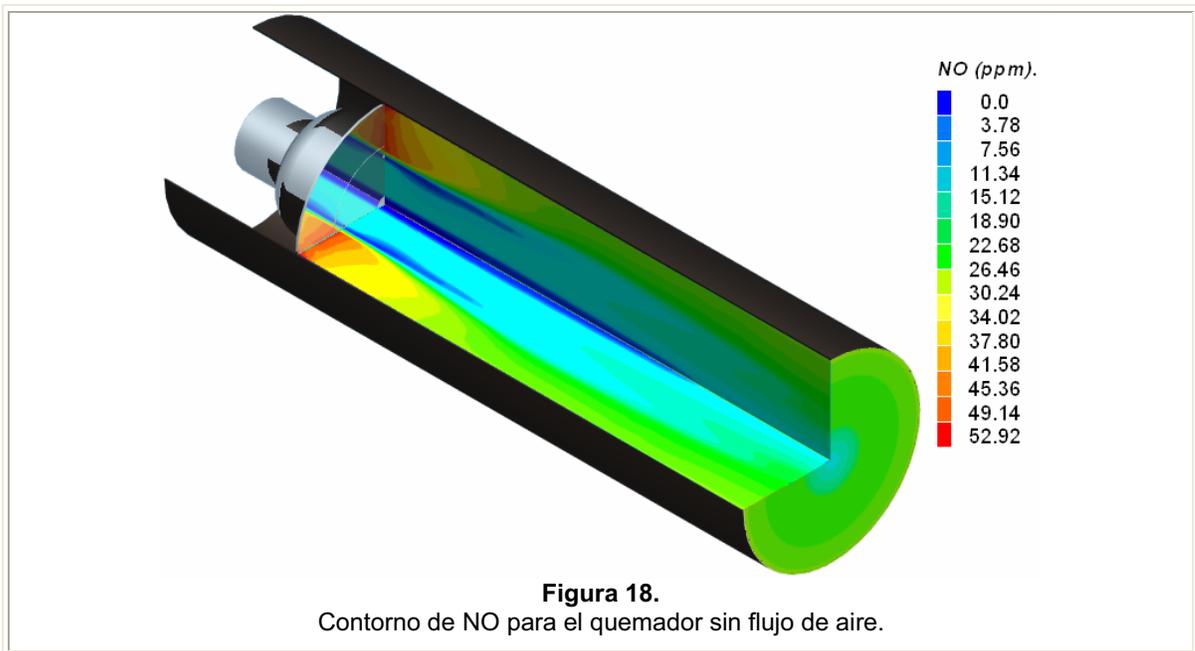


Las figuras 16 y 17 muestran el contorno de vapor de agua dentro del quemador sin y con flujo de aire respectivamente. En el caso de la representación del quemador sin flujo de aire, los contornos de H₂O después de la zona de reacción presentan un valor homogéneo y próximo al valor de equilibrio. Un valor igual se presenta en los contornos mostrados en la figura 17, solo que en este caso, esta especie solo se tiene en la zona central, zona de gases productos de la combustión.

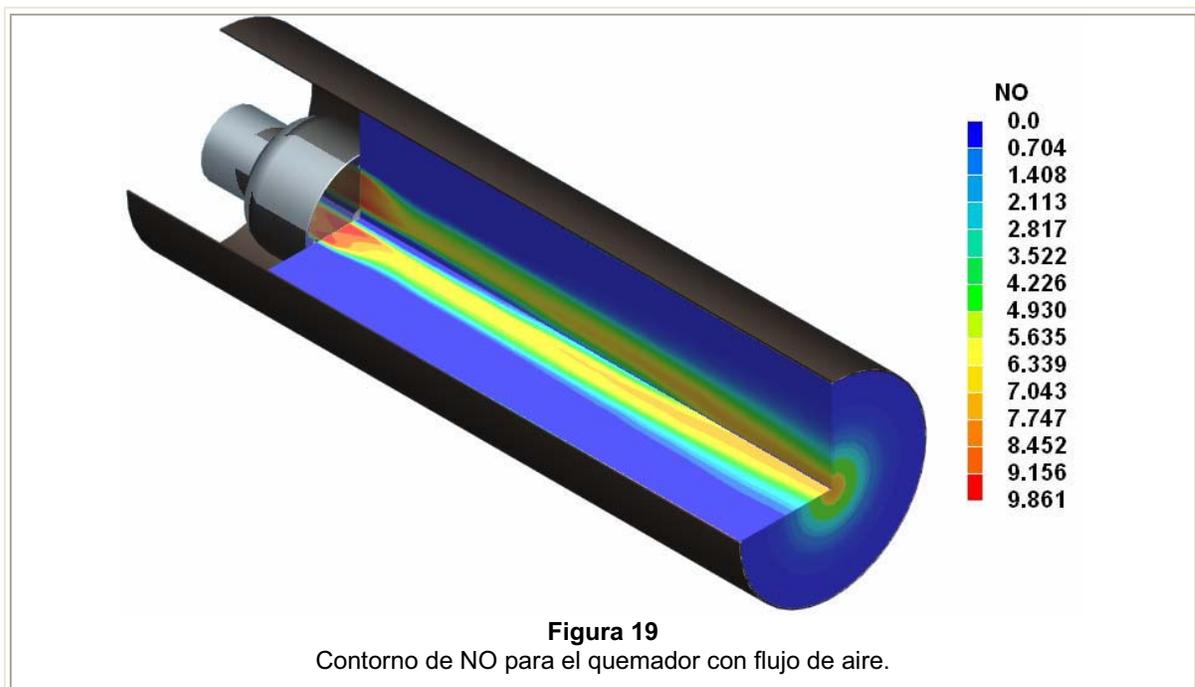




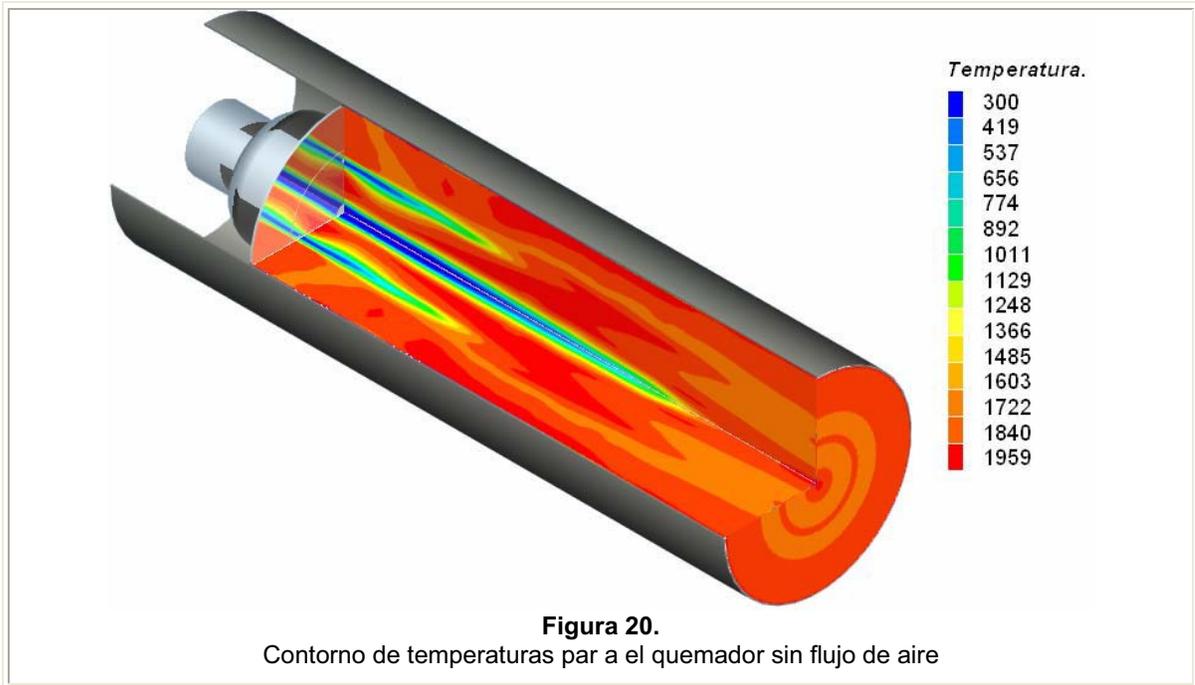
En la figura 18 se muestra los contornos de NO dentro de la cámara de combustión para el caso sin flujo de aire lateral. En esta figura se observa que en la región adyacente a la pared se produce un máximo de 60 ppm y disminuye gradualmente hasta aproximadamente 30 ppm a la salida de la cámara de combustión. Caso contrario sucede en la zona central en la cual se producen aproximadamente 12 ppm y se tiene un máximo de 20 (ppm) en la zona de salida de la cámara de combustión.



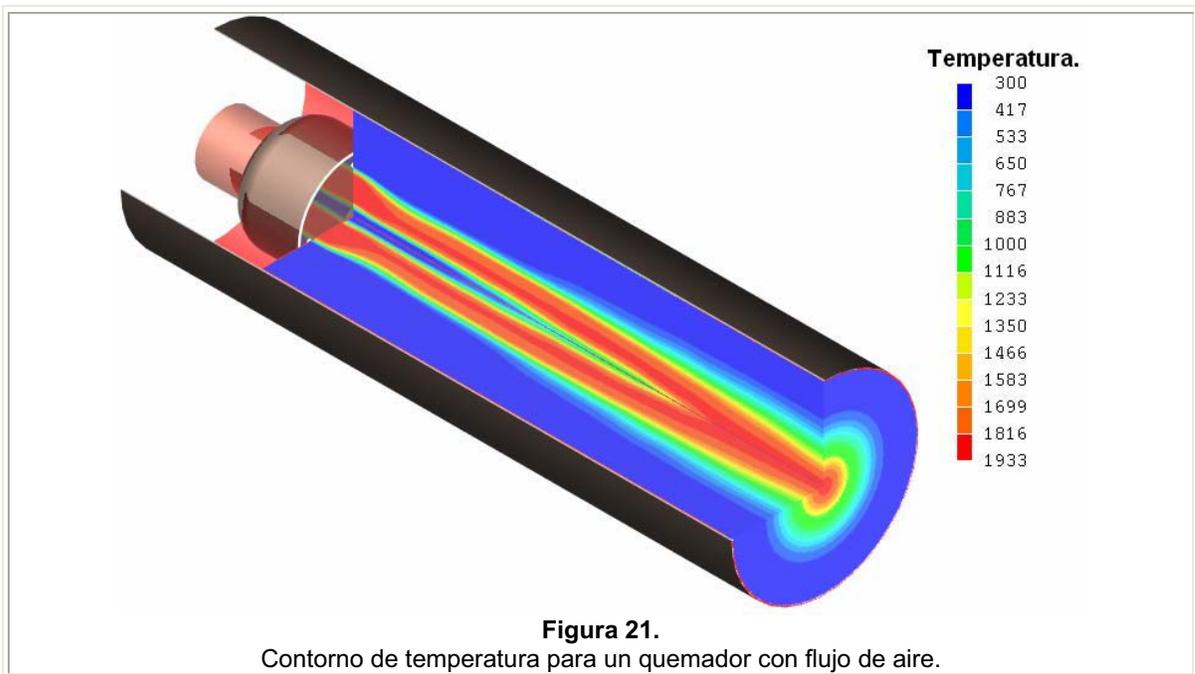
La figura 19 muestra el contorno de NO para la simulación con flujo de aire, en donde se produce hasta 12 ppm como máximo. Cabe mencionar que las zonas de recirculación son zonas de especies radicales, las cuales pueden propiciar una mayor formación de NO.



La figura 20 muestra el contorno de temperatura para la simulación sin flujo de aire. En esta figura se observa que la temperatura es de aproximadamente 1990 K en toda la cámara de combustión exceptuando las zonas de entrada de combustibles frescos.



Para la simulación con flujo de aire, figura 21, la máxima temperatura se presenta en la región central de la cámara de combustión y es de 1920 K aproximadamente.



5.2 Efecto de la velocidad del flujo de aire adyacente, y de la relación aire y combustible en la mezcla de la flama.

Para estudiar el efecto del flujo de aire adyacente en la llama, en esta sección se comparan las predicciones variando parámetros como la velocidad del flujo de aire adyacente y la relación aire combustible en la mezcla de la llama. Estas comparaciones también se hacen con el caso en el cual el flujo de aire es nulo. En el caso de la simulación (la cual no tiene flujo de aire adyacente), las propiedades se grafican en todo el dominio y en diferentes posiciones axiales debido a que las mayores concentraciones de las especies se localizan fuera del eje axial-central. En las gráficas, la posición axial se adimensionó con el diámetro de la boquilla del quemador y las especies se presentan en unidades de fracción molar, salvo que se indique otra unidad. En primer lugar se analiza el efecto de modificar la velocidad del aire en el flujo adyacente. Posteriormente, se presenta el efecto de modificar la relación aire-combustible de la mezcla que entra por la boquilla.

Para esta primera serie de simulaciones se muestra la relación $\dot{m}_{a/c} / \dot{m}_{aire}$

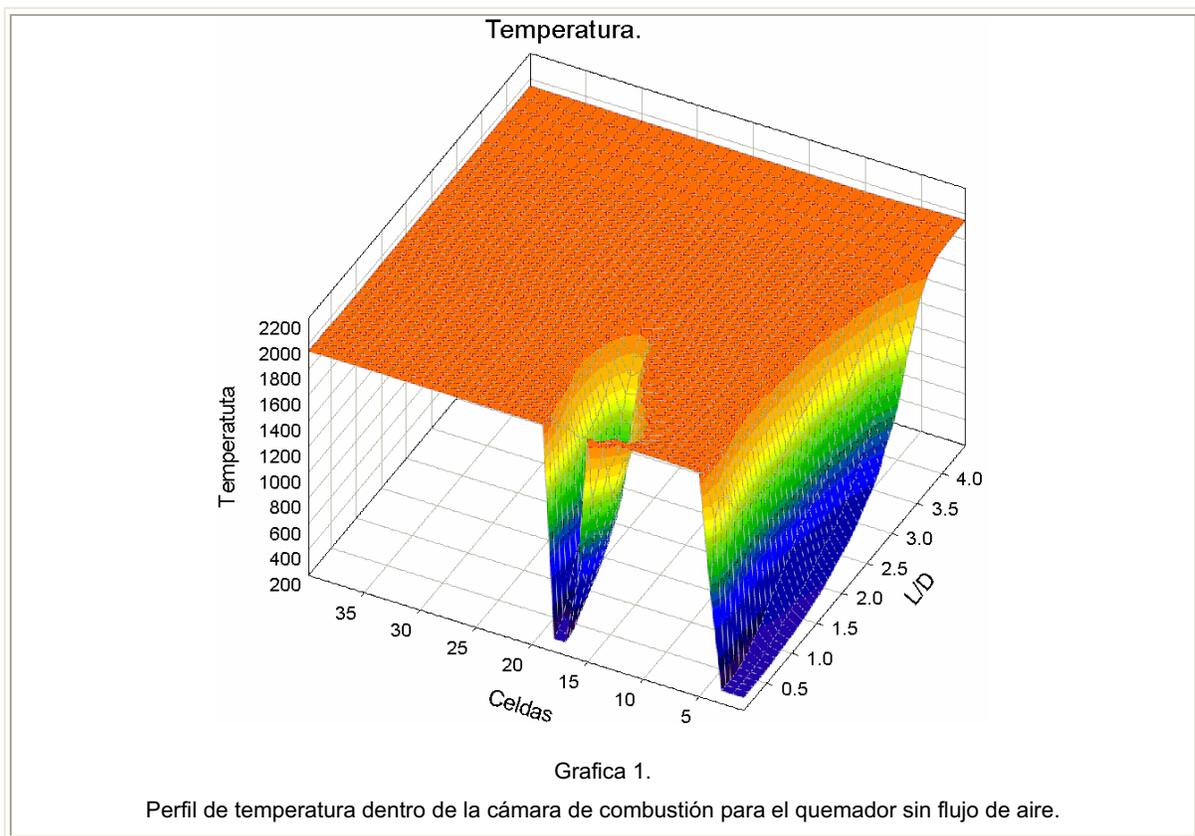
Velocidad del flujo de aire adyacente	$\dot{m}_{a/c} / \dot{m}_{aire}$
10 [m/s]	.01505523
6 [m/s]	.0209206
3.54 [m/s]	.0425257
1.77 [m/s]	.0850515

Tabla 1. Tabla de relación de gastos

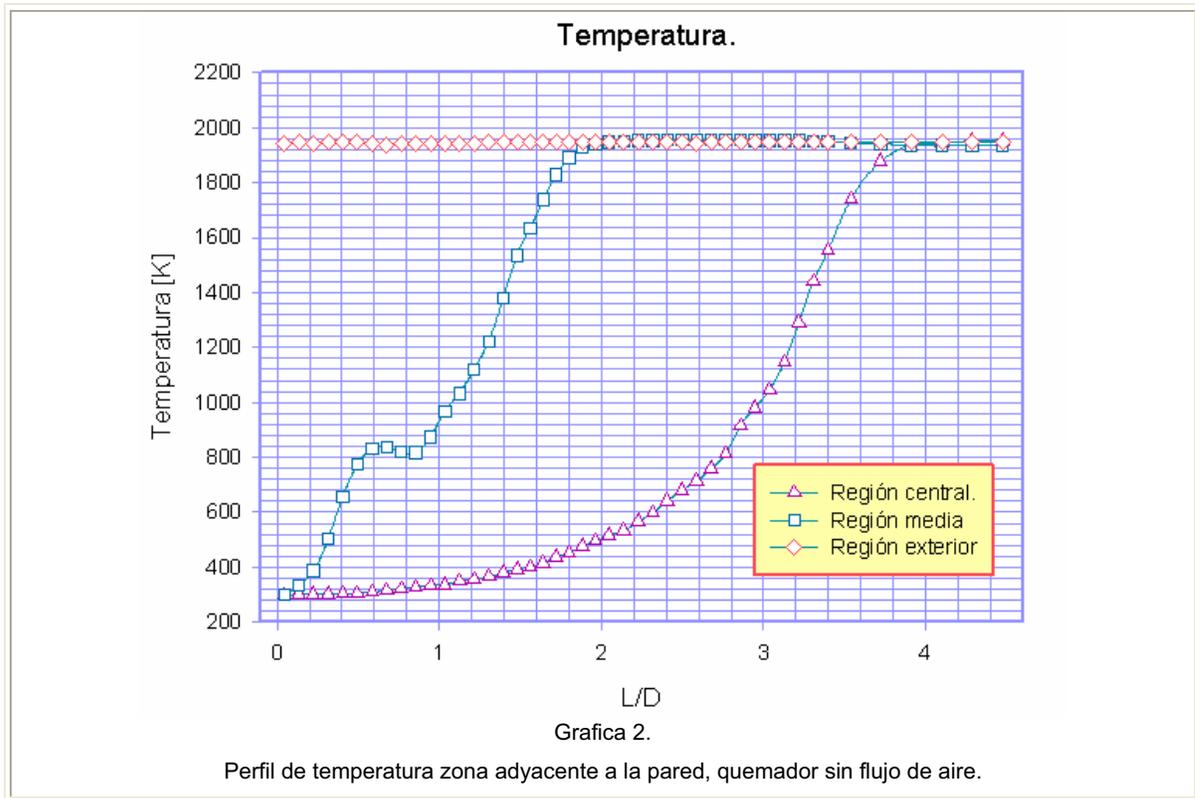
5.3 Temperatura y concentración de especies mayoritarias.

5.3.1 Temperatura.

La gráfica 1 muestra los perfiles de temperatura en todo el dominio de cálculo para el caso del quemador sin flujo de aire. La temperatura mínima de 300 K se localiza en la zona de la mezcla aire-combustible que está entrando a la cámara de combustión a través de la boquilla. La temperatura máxima es uniforme a lo largo del quemador y tiene una temperatura promedio de aproximadamente 1944 K, la cual es la temperatura de equilibrio.



En la gráfica 2 se muestra un perfil axial de temperatura en la zona próxima a la pared, en donde se presenta una zona de recirculación secundaria y la mayor concentración de NO. Las fluctuaciones que se presentan en esta zona se deben principalmente a la aleatoriedad del modelo numérico, que trata de representar el proceso de la forma más veraz posible.

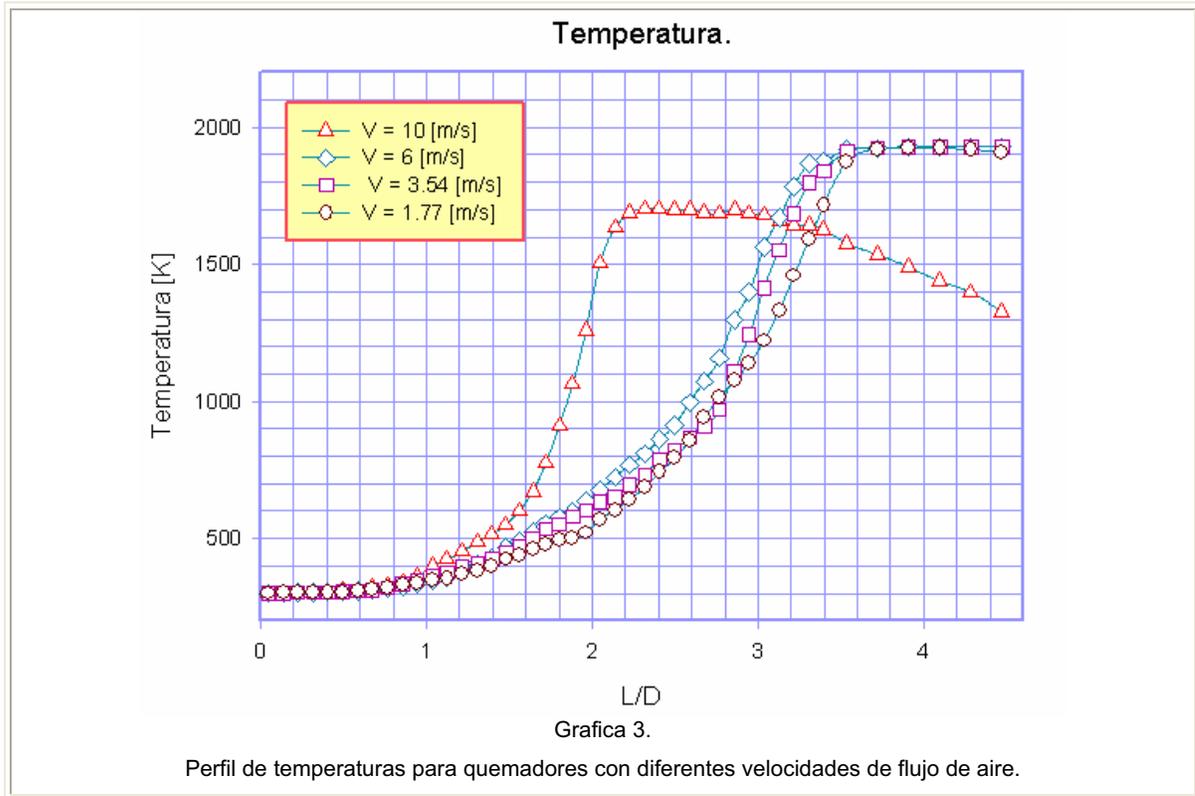


El perfil de temperaturas observado en las gráficas anteriores fue modificado por la acción de incluir una corriente de aire adyacente, También se observan variaciones en el perfil de temperaturas por modificar la velocidad con que entra este mismo en la cámara de combustión como lo se vera en las siguientes graficas.

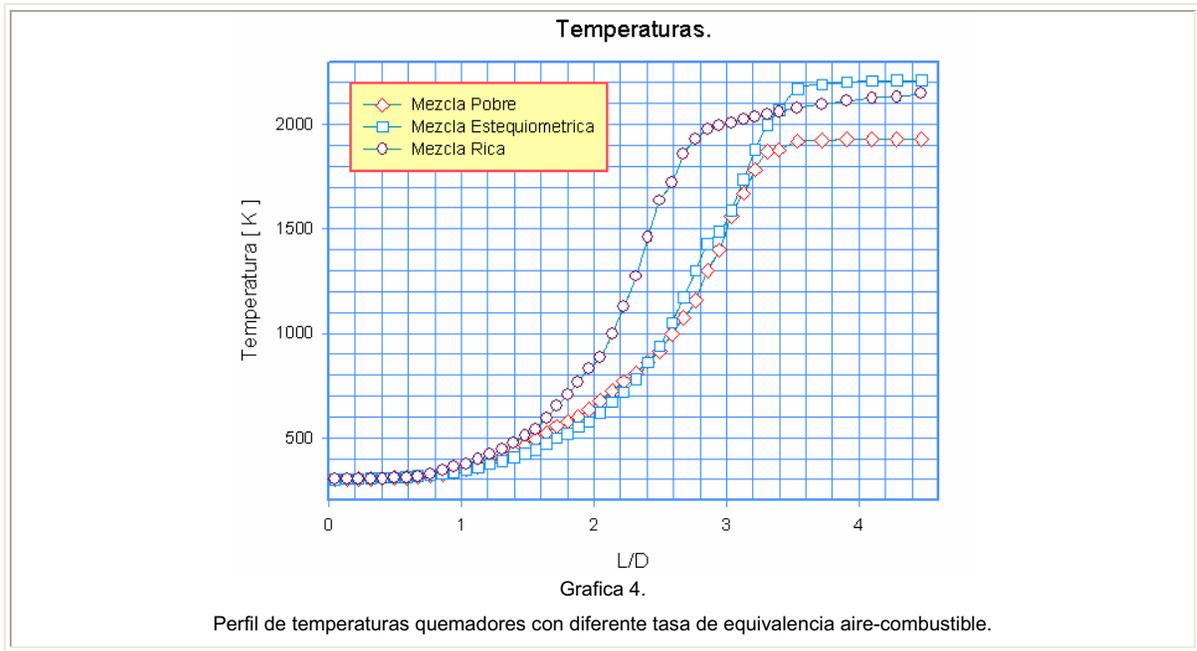
En la gráfica 3 se presenta el perfil de temperatura para las simulaciones con flujo de aire adyacente. Conforme se incrementa la velocidad del flujo de aire, la zona de reacción disminuye de tamaño, por lo que los gradientes son más pronunciados para estos casos.

Para velocidades de flujo de aire adyacente de 1.77 m/s, 3.54 m/s y 6 m/s respectivamente, existe una diferencia mínima en lo que se refiere al perfil de temperatura. La temperatura máxima para estos casos tiene un valor de 1950 K y un valor $L/D = 3.6$. Para la simulación en la que la velocidad del flujo adyacente de aire es de 10 m/s, la temperatura máxima es de 1700 K aproximadamente y se presenta en un valor $L/D = 2.2$, Se observó para esta simulación un enfriamiento significativo en la cámara de combustión, y además, solo para esta simulación a la salida e la cámara de combustión se presenta una disminución en la temperatura la cual tiene un valor de 1300 K. Esta

menor temperatura, como se presenta después, produjo una menor concentración de NO en la salida del quemador.

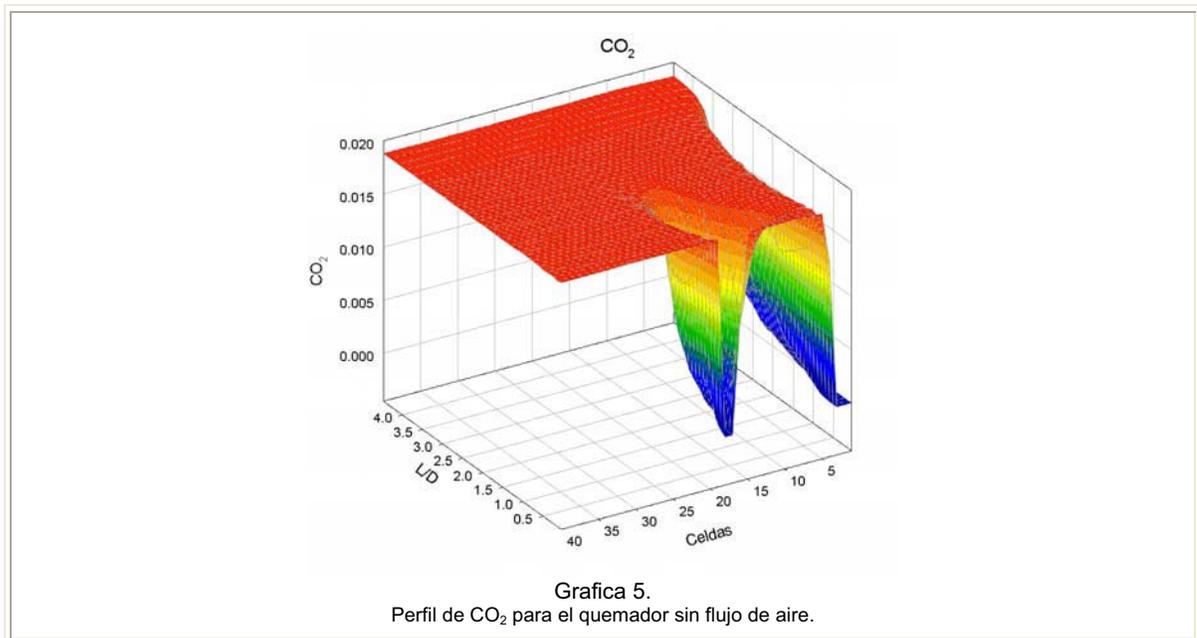


El efecto en la temperatura con el cambio en la relación aire y combustible se muestra en la gráfica 4. Las relaciones de combustible que se simularon son: $\Phi=0.77389407$; $\Phi_1=0.055200089$; $\Phi_2=1.395564$, representando Φ una mezcla pobre, Φ_1 una mezcla estequiométrica, Φ_2 una mezcla rica respectivamente. Para estas tres simulaciones la velocidad del flujo de aire adyacente tiene un valor de 6 m/s. La simulación con Φ (mezcla pobre) presenta una temperatura de 1950 K, al incrementar la relación de aire combustible a Φ_1 (mezcla estequiométrica) la temperatura es de 2200 K el cual es un incremento del 12.82% respecto a la temperatura de la simulación con mezcla pobre. Mientras que para la simulación con Φ_2 (mezcla rica) la temperatura máxima que se presenta es de 1150 K aproximadamente, lo cual representa un decremento del 41% en la temperatura respecto a la simulación de mezcla pobre. Estas diferencias se deben a la presencia del exceso de aire, que hay que calentar, en el caso de una mezcla pobre, y a la falta de oxidante, en el último caso.



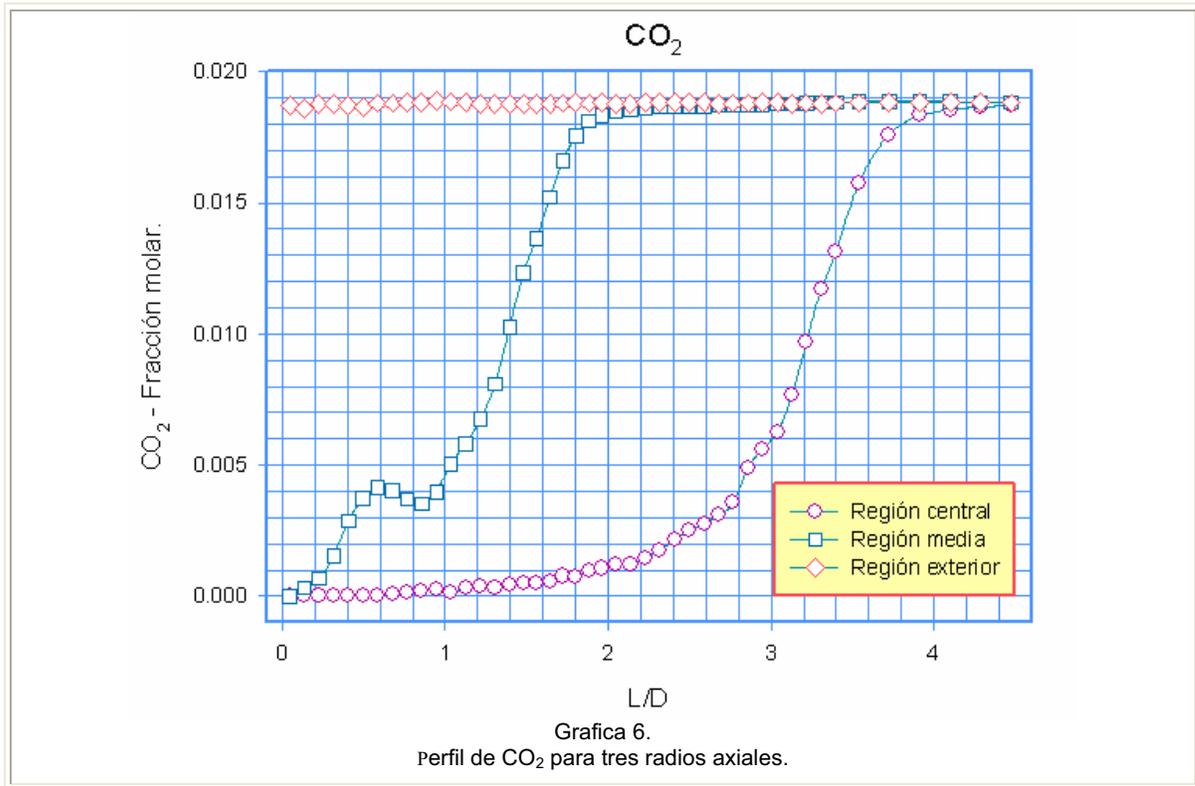
5.3.2 CO₂.

La gráfica 5 muestra el perfil de CO₂ para todo el dominio del quemador sin flujo de aire lateral. Observó una concentración homogénea dentro de la cámara de combustión.

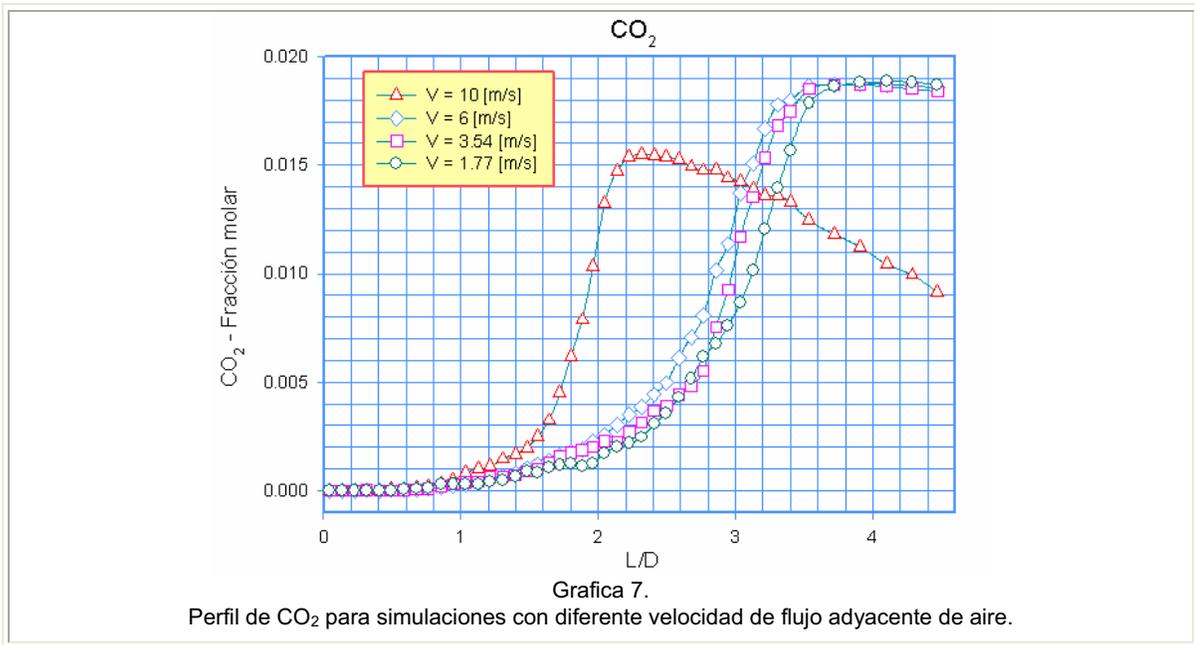


La gráfica 6 presenta la concentración de CO₂ para dos zonas representativas del dominio del quemador. La primer grafica, que es de la zona central, muestra un incremento de esta especie química hasta un valor de 0.018, la segunda grafica, la cual es de la zona media, también alcanza esta concentración ara un valor L/D = 1.8 debido a

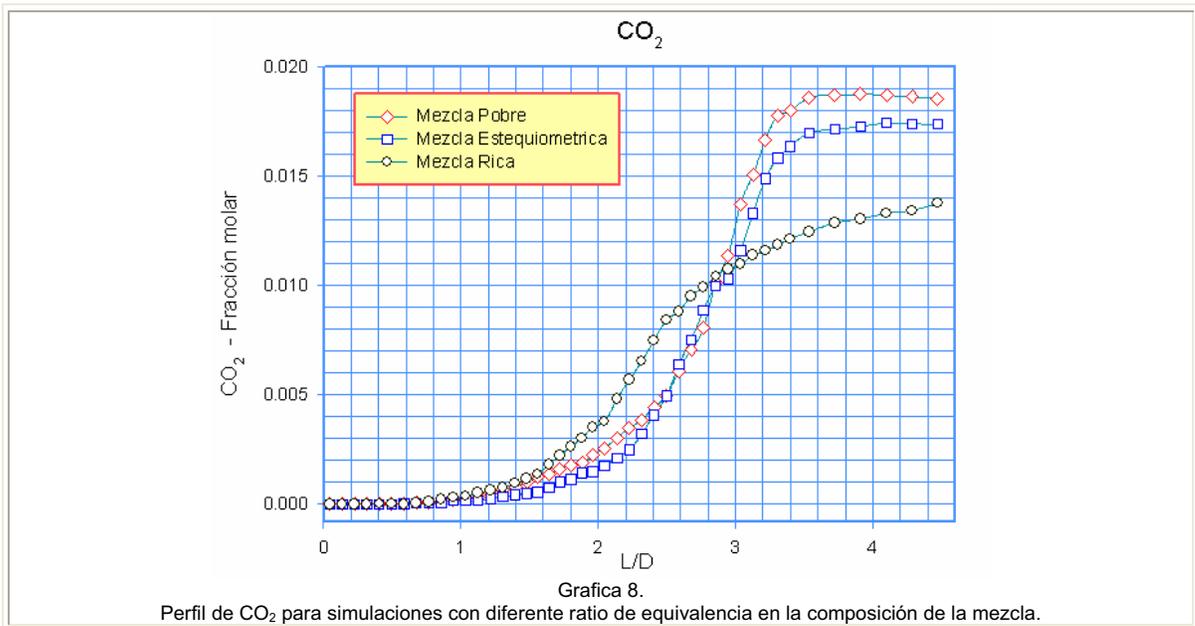
lo pronunciado de su pendiente, y la tercer grafica muestra la zona adyacente a la pared del quemador. Para esta zona también existen fluctuaciones, las cuales varían un pequeño rango, esto se debe a la influencia de la zona de recirculación presente en esta zona.



La influencia del flujo de aire adyacente en las concentraciones de CO₂ se muestra en la gráfica 7. La concentración de CO₂ para las velocidades de entrada de aire de 1.77 m/s, 3.54 m/s y 6 m/s tuvieron un valor de 0.019 para un valor L/D = 3.6. Para el caso de la simulación con la velocidad del flujo de aire de 10 m/s una concentración de 0.016 en L/D = 2.2 que corresponde a la zona de productos de la combustión, próxima a la zona de reacción. Conforme alcanza la salida del quemador, al igual que el valor de la temperatura, la concentración también presenta una disminución y en este caso es de 0.008.

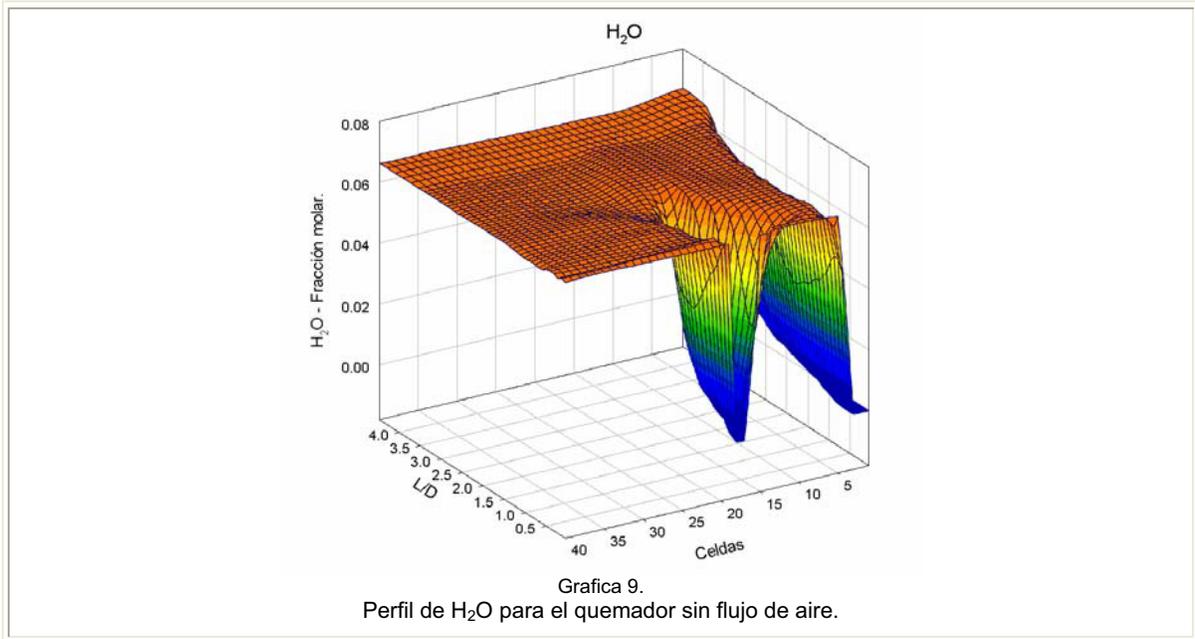


En la gráfica 8 se muestran los resultados de las simulaciones en las que se modificó la relación de combustible, para una relación de combustible de Φ se tiene una concentración de 0.019, al aumentar la relación del combustible a Φ_1 la concentración de CO₂ disminuye a 0.017, para una relación de combustible de Φ (mezcla rica) la valor es de 0.014 que representa un 26% menos respecto a la simulación sin flujo de aire.

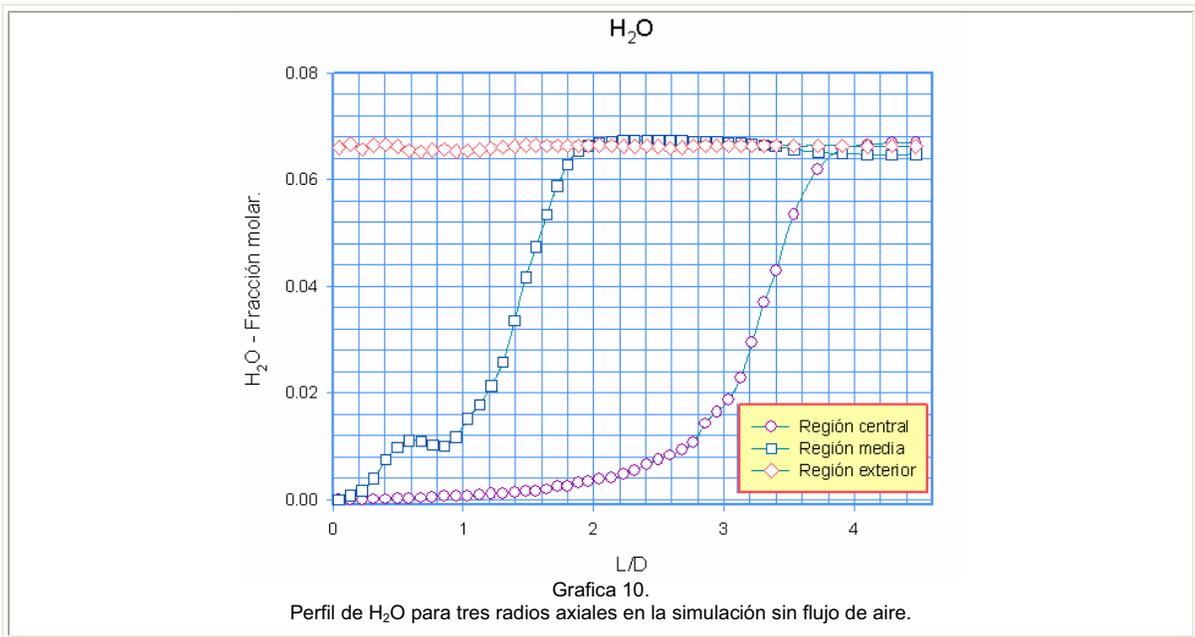


5.3.3 H₂O.

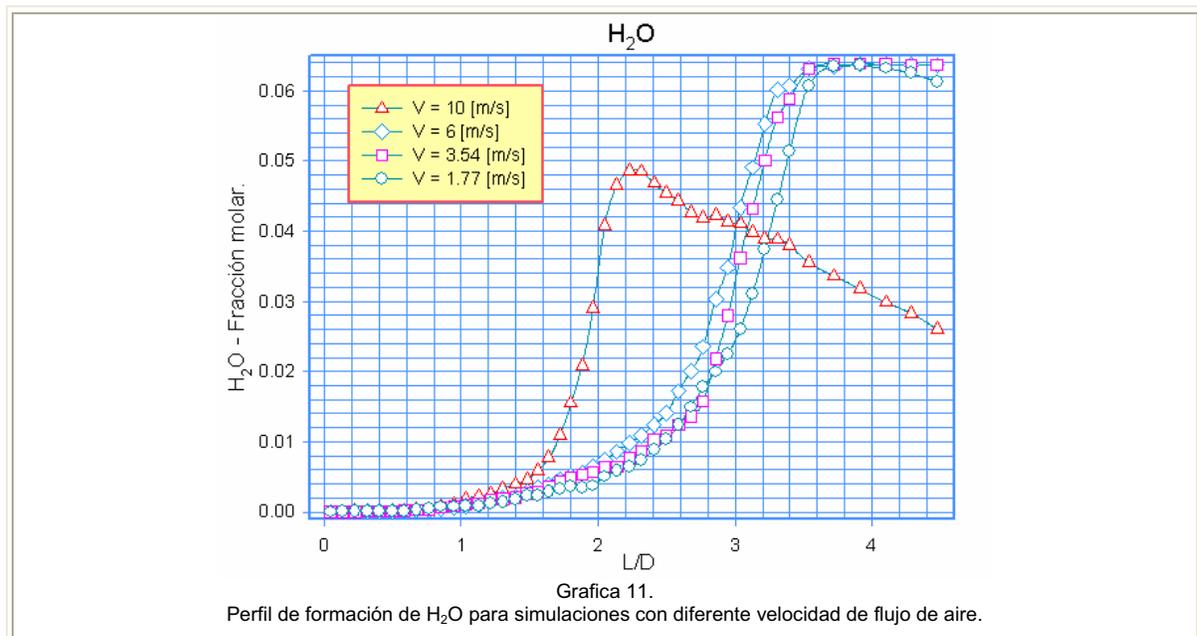
La gráfica 9 muestra el perfil de H₂O en todo el dominio para la simulación del quemador sin flujo de aire. En esta gráfica se observa que la formación de esta especie se lleva a cabo en la región posterior a la zona de reacción. Al igual que en las concentraciones de CO₂, la concentración del H₂O es homogénea en la cámara.



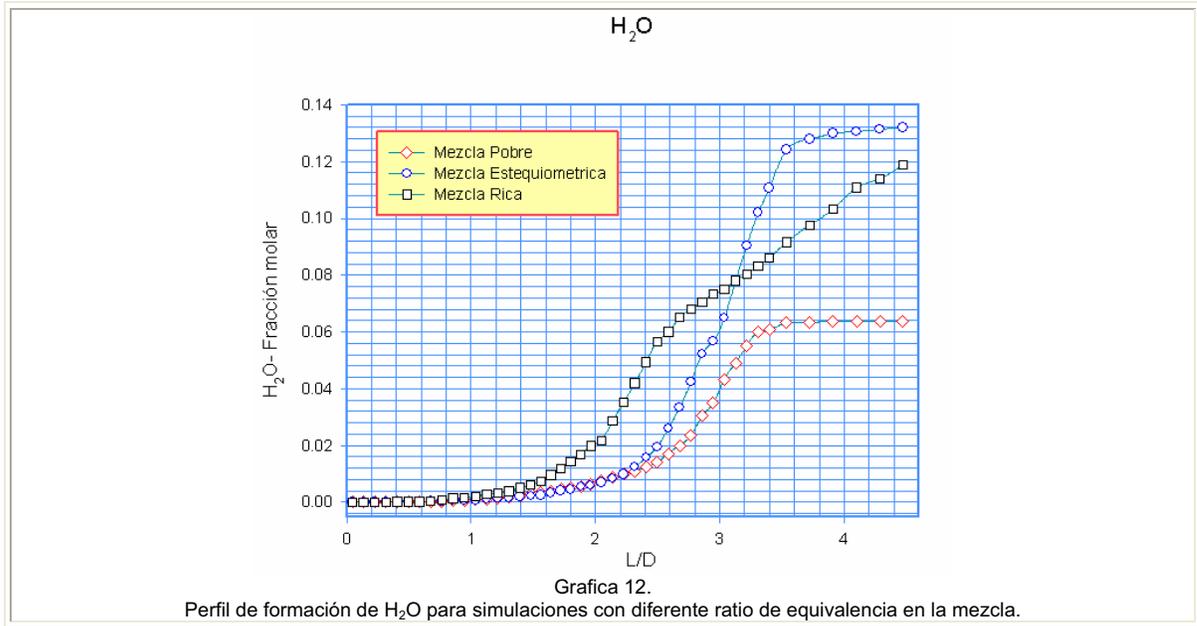
En la zona adyacente a la pared de la cámara de combustión existen fluctuaciones importantes para el H₂O (gráfica 10), que como ya se ha explicado se debe a la zona de recirculación presente es esta zona.



En la gráfica 11 se observó el efecto del flujo de aire sobre esta especie química (H_2O). Para las velocidades de 1.77 [m/s] a 6 [m/s], la concentración máxima que se registra es de 0.064 para el valor $L/D = 3.4$, y este valor se mantiene hasta la salida del quemador. La disminución debida al efecto de aire para estos casos es solo del 5%. Para la velocidad de 10 [m/s] la máxima concentración es de 0.05, la cual se presenta en $L/D = 2.2$, teniendo una disminución del 26%; esta concentración disminuye hacia la salida del quemador en donde se presenta una concentración de 0.028.

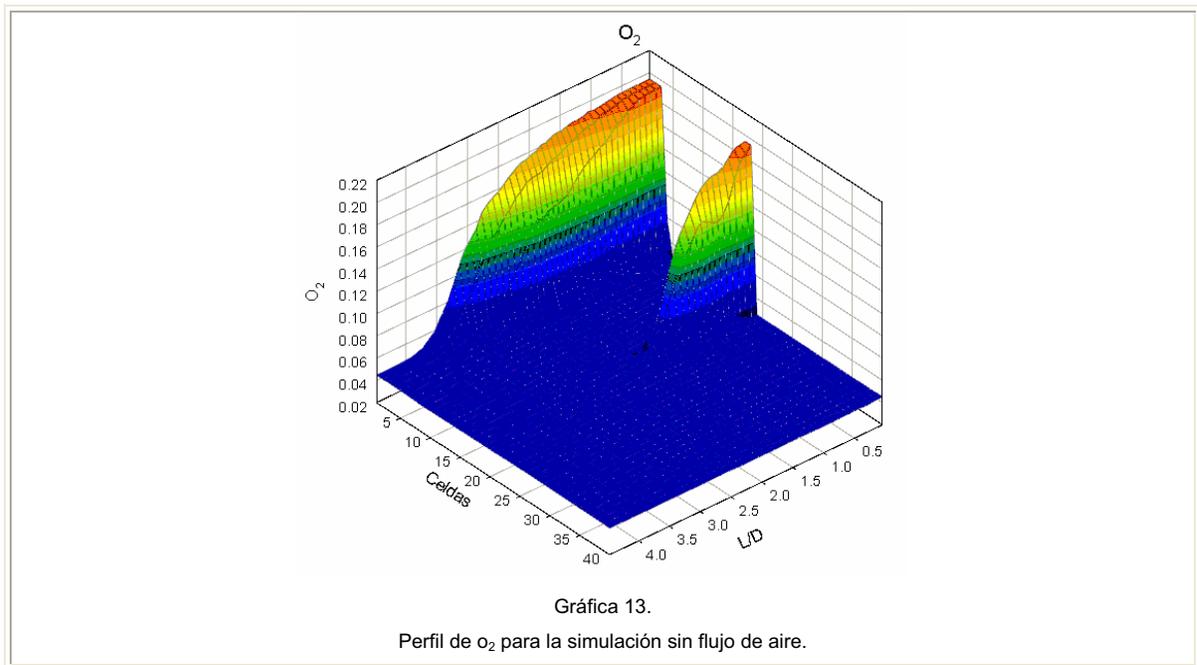


La gráfica 12 muestra el perfil de H_2O para las simulaciones en las que se modificó la relación de combustible. La mínima concentración es de 0.064, y se obtuvo en la simulación de mezcla pobre $\Phi = 0.77389407$, para la mezcla estequiométrica Φ_1 la concentración fue de 0.125 para un valor $L/D = 3.4$ y aumentó 0.135 a la salida del quemador. Para la simulación con Φ_2 (mezcla rica) el valor máximo fue de 0.11 y se presenta a la salida del quemador. de aire.



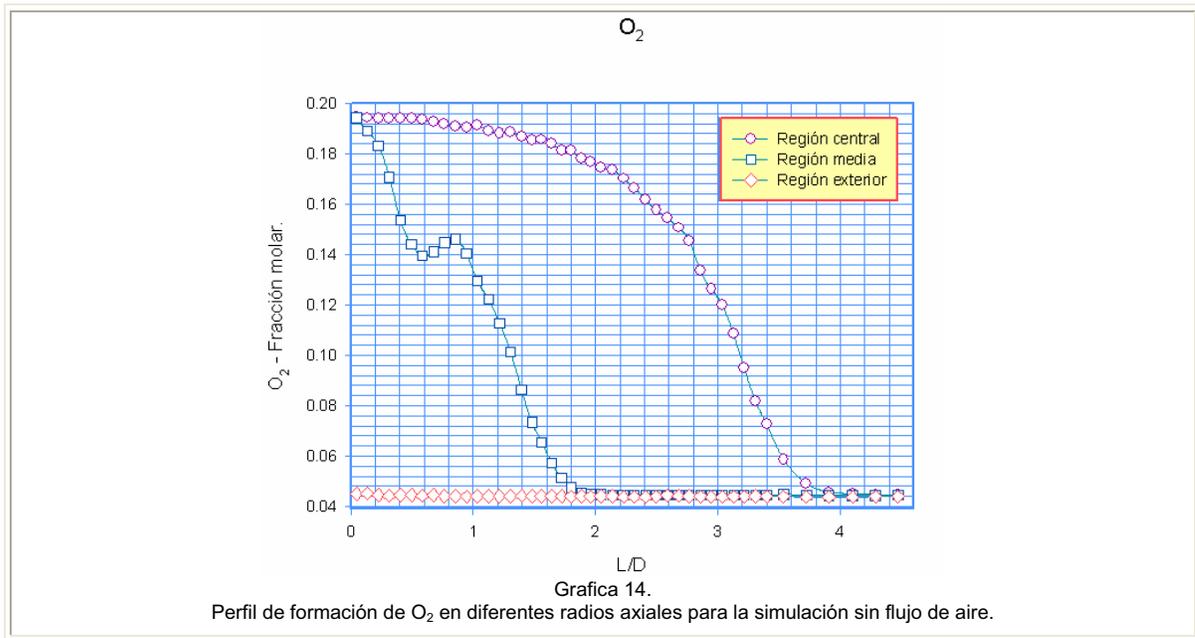
5.3.4 O₂.

El perfil de O₂ para la simulación sin flujo de aire lateral se muestra en la gráfica 13. Las concentraciones mayoritarias se presentaron en la salida de la boquilla del quemador con un valor de 0.21, el cual disminuyó conforme el oxígeno reacciona en el proceso de combustión.



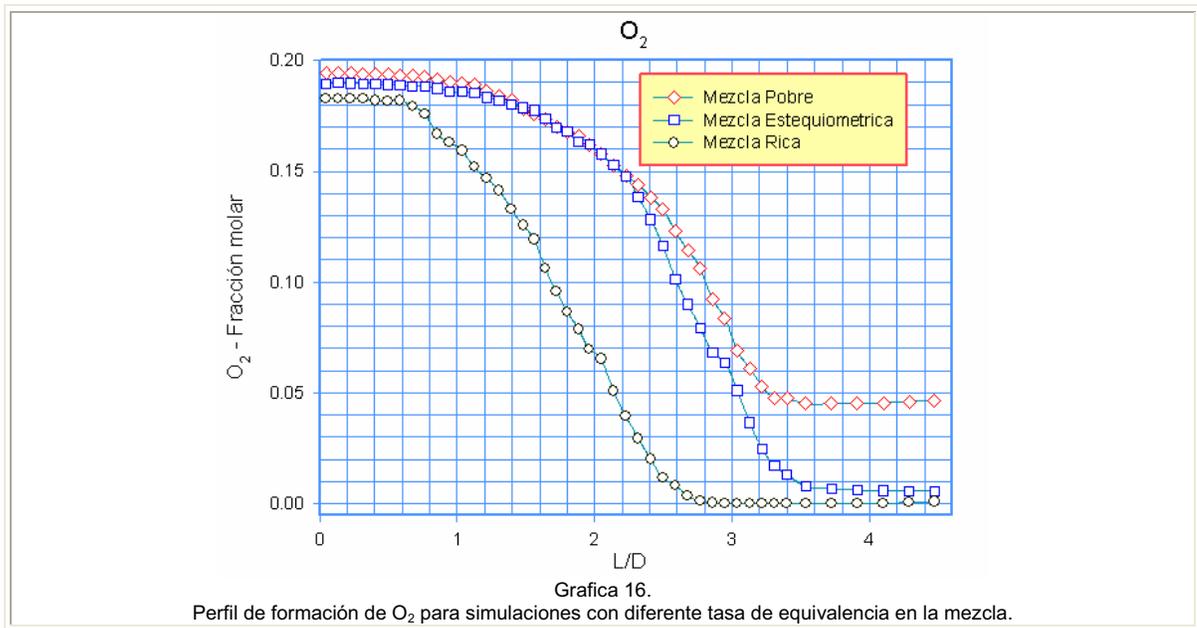
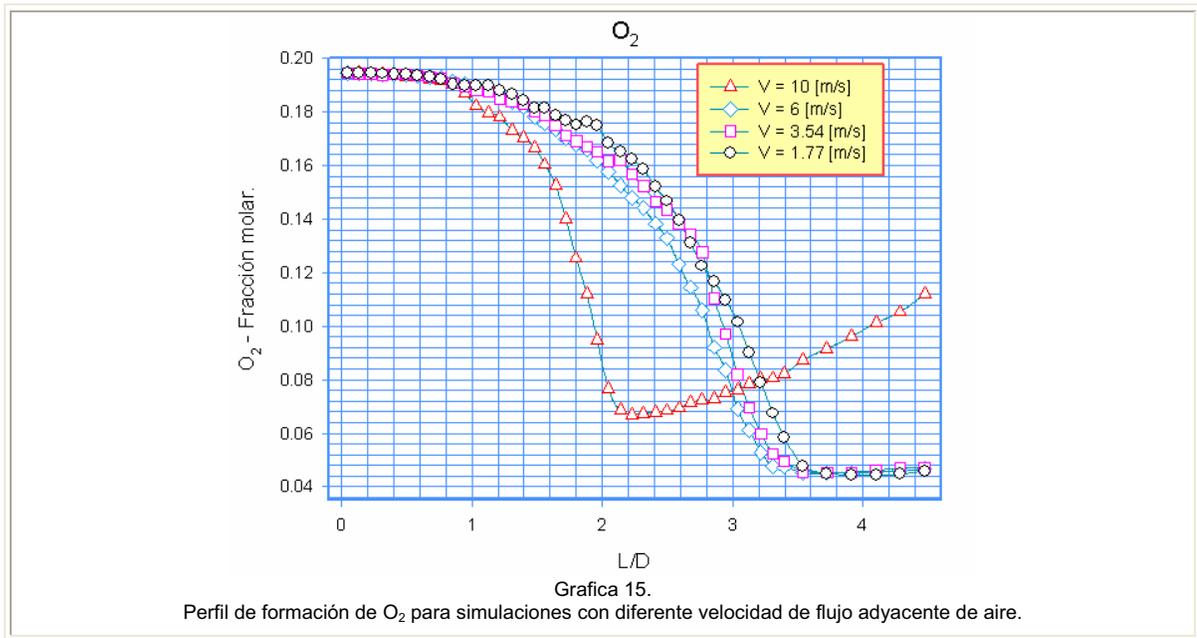
En la gráfica 14 se observó esta especie química para diferentes radios axiales, se observa en la zona central una disminución gradual hasta su valor de equilibrio 0.044, en

la región adyacente a la pared del quemador solo se observa una oscilación en la concentración debida a la zona de recirculación presente en esta región.



La gráfica 15 muestra los perfiles de O_2 para las simulaciones con flujo de aire adyacente. Para todas las simulaciones, la concentración inicial es la misma 0.19. Esta concentración disminuye de forma gradual para las simulaciones con velocidad de 1.77 m/s, 3.54 m/s y 6 m/s de forma similar a un valor de 0.046 a la salida del quemador. Para la simulación con una velocidad de 10 m/s la pendiente es más pronunciada por lo que esta concentración disminuyó de forma mas rápida que los casos anteriores, solo que para esta simulación el valor mínimo que se registra es de 0.07 para $L/D = 2.2$ y aumenta a un valor de 0.11 a la salida del quemador. Esta concentración en los niveles de oxígeno para este caso, se debe al arrastre del aire circundante.

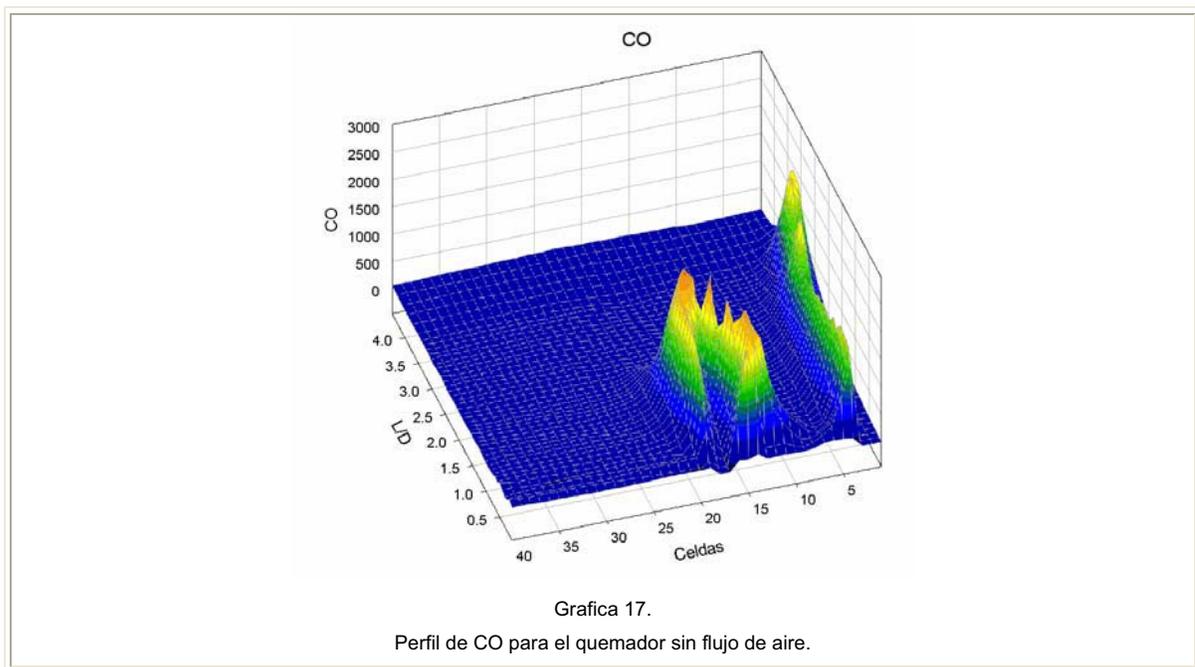
Para las simulaciones en las cuales se modificó la relación de combustible, gráfica 16, se obtuvieron los siguientes resultados; para un valor Φ (Mezcla pobre) la concentración inicial es de 0.195 el cual disminuye gradualmente a un valor de 0.05 para $L/D = 3.2$; la simulación Φ_1 (mezcla estequiometrica) tiene una concentración inicial de 0.19 y también disminuye de forma gradual hasta un valor de 0.005 para un valor $L/D = 3.6$ este valor es diferente de cero debido al efecto del aire circundante. La mezcla rica Φ_2 tiene una concentración inicial de 0.18 y ésta disminuye a un valor de 0 para $L/D = 2.8$ esto se debe al excedente de combustible.



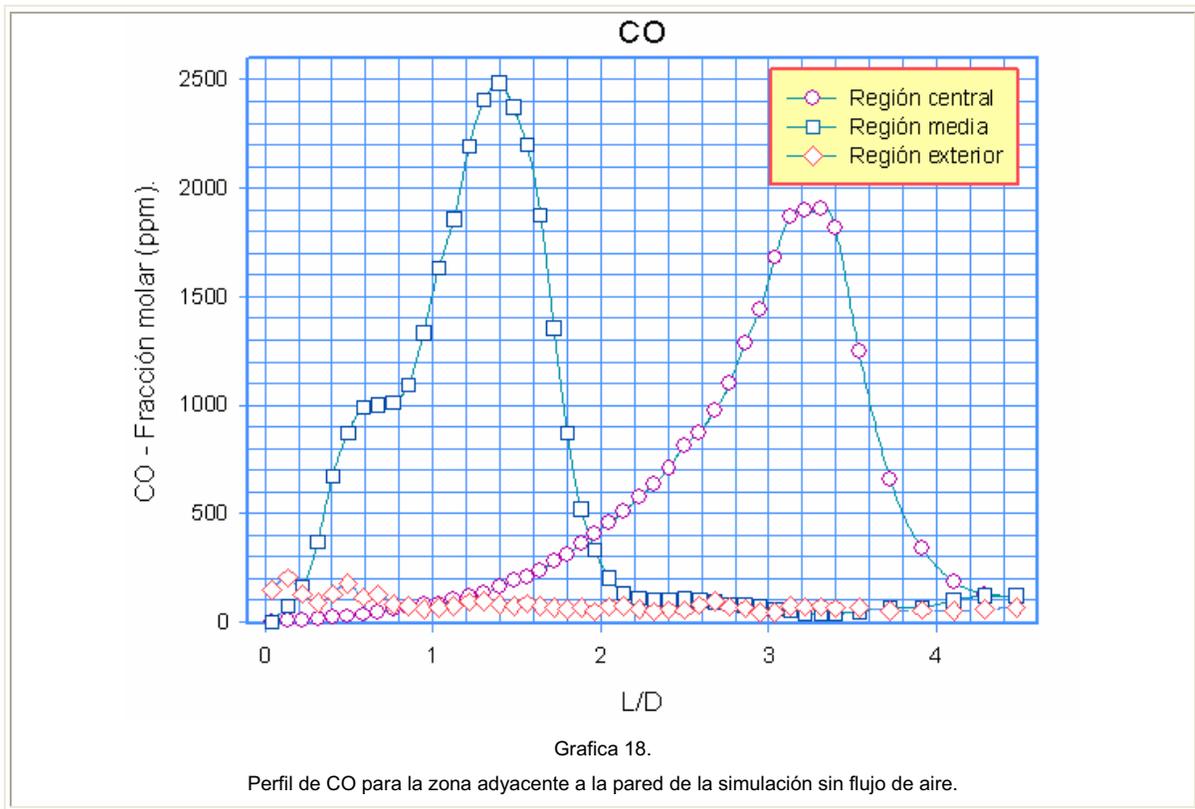
5.4 Concentraciones de especies minoritarias.

5.4.1 CO.

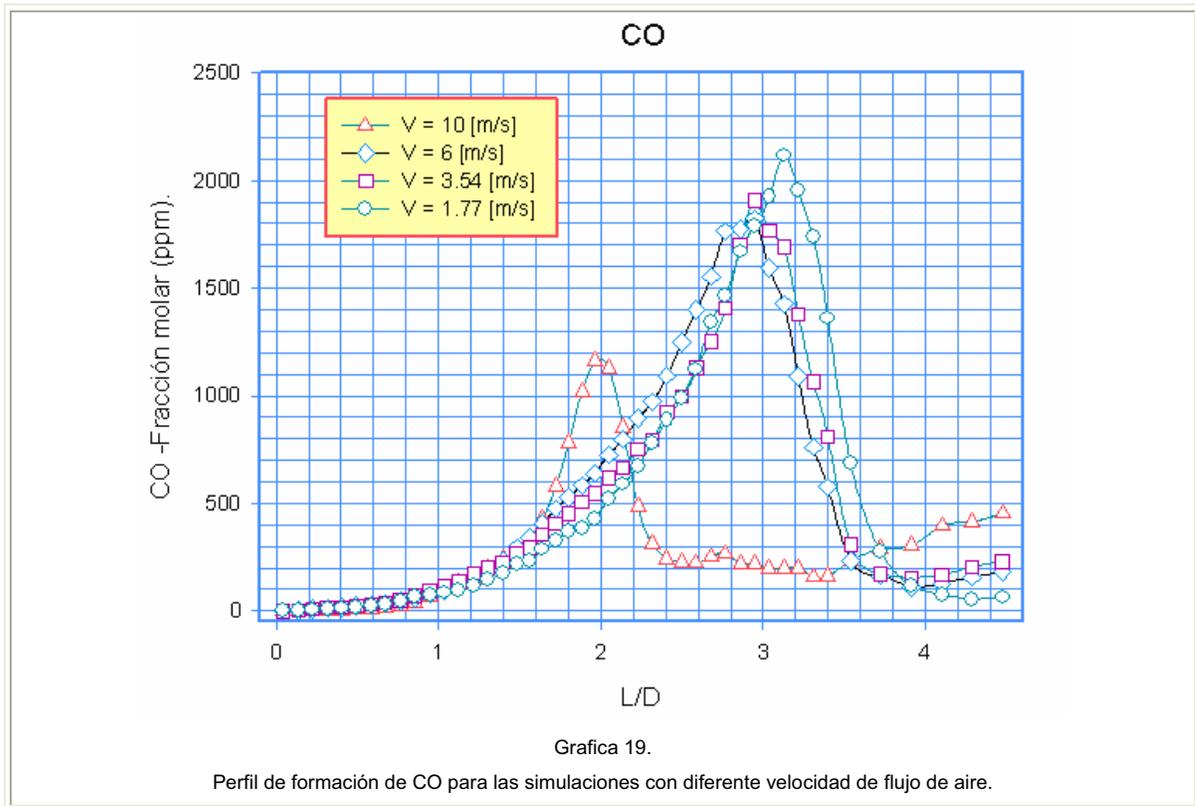
La gráfica 17 presenta el perfil de CO para todo el dominio de la simulación del quemador sin flujo de aire lateral. El CO se formó mayoritariamente en la frontera entre los combustibles fríos y los gases calientes productos de la combustión. Las concentraciones mayoritarias de CO se registran en esta zona, la máxima tiene un valor de 2700 ppm aproximadamente y alcanza un valor de equilibrio de 100 [ppm] después de esta zona de reacción.



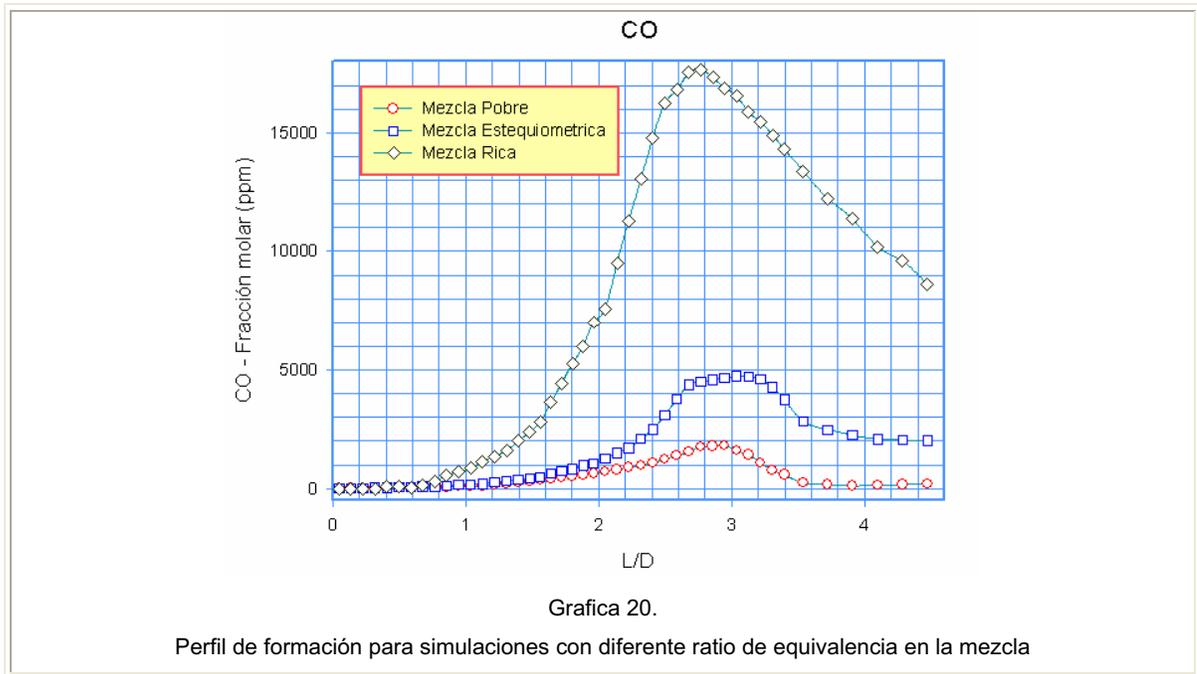
En la gráfica 18 se presentan gráficas para diferentes posiciones axiales. El primero, en la zona central de la cámara de combustión, la segunda para la segunda zona de entrada e combustible y la tercera, la posición axial para la zona adyacente a la pared de quemador. En las dos primeras curvas observamos las máximas concentraciones y en la última grafica una concentración baja.



La gráfica 19 muestra el perfil de CO para las simulaciones con flujo de aire lateral, para simulaciones de 1.77 m/s a 6 m/s las graficas son muy semejantes, solo que al aumentar la velocidad del flujo de aire la máxima concentración disminuyó y se desplazó a la izquierda. Conforme la velocidad del flujo del aire se eleva, la zona de máxima concentración de CO, que es un indicador de la zona de reacción, empieza en una longitud más cerca de la boquilla por donde entra la mezcla de aire y combustible. Los valores máximos de CO corresponden para el caso de velocidad de 1.77 m/s, que presenta un valor de temperatura ligeramente mayor, la cual produce que parte del CO se transforme en CO₂. Los valores de concentración máximos son de aproximadamente 2200 ppm para el caso de flujo de aire lateral con velocidad de 1.77 m/s a 1200 ppm aproximadamente para el caso de la velocidad de flujo de aire de 10 m/s. Para una velocidad mayor a 10 m/s se pueda tener una concentración menor de CO, pero con una velocidad mayor se puede extinguir la flama. En la salida del quemador, aproximadamente todo el CO se ha oxidado para producir CO₂.

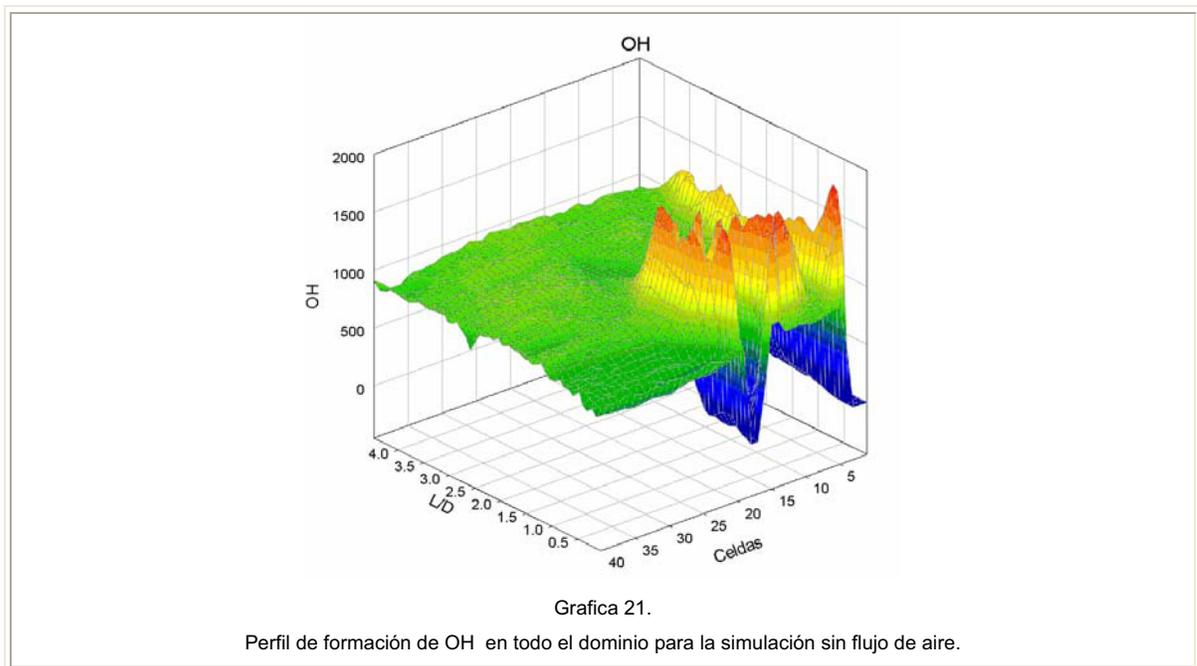


La influencia de la relación aire y combustible sobre esta especie química, CO_2 , se muestran en la Gráfica 20. La simulación con mezcla pobre Φ tiene una concentración de 1600 ppm aproximadamente, para la simulación Φ_1 la concentración de CO fue de 4900 ppm aproximadamente para $L/D = 3$, para la simulación con mezcla rica se tuvo una concentración máxima de CO que fue de 17800 ppm aproximadamente. Este aumento en la concentración de CO de esta especie química se debe a la falta de oxidante en el caso de mezcla rica, y a la alta temperatura en el caso de mezcla estequiométrica.

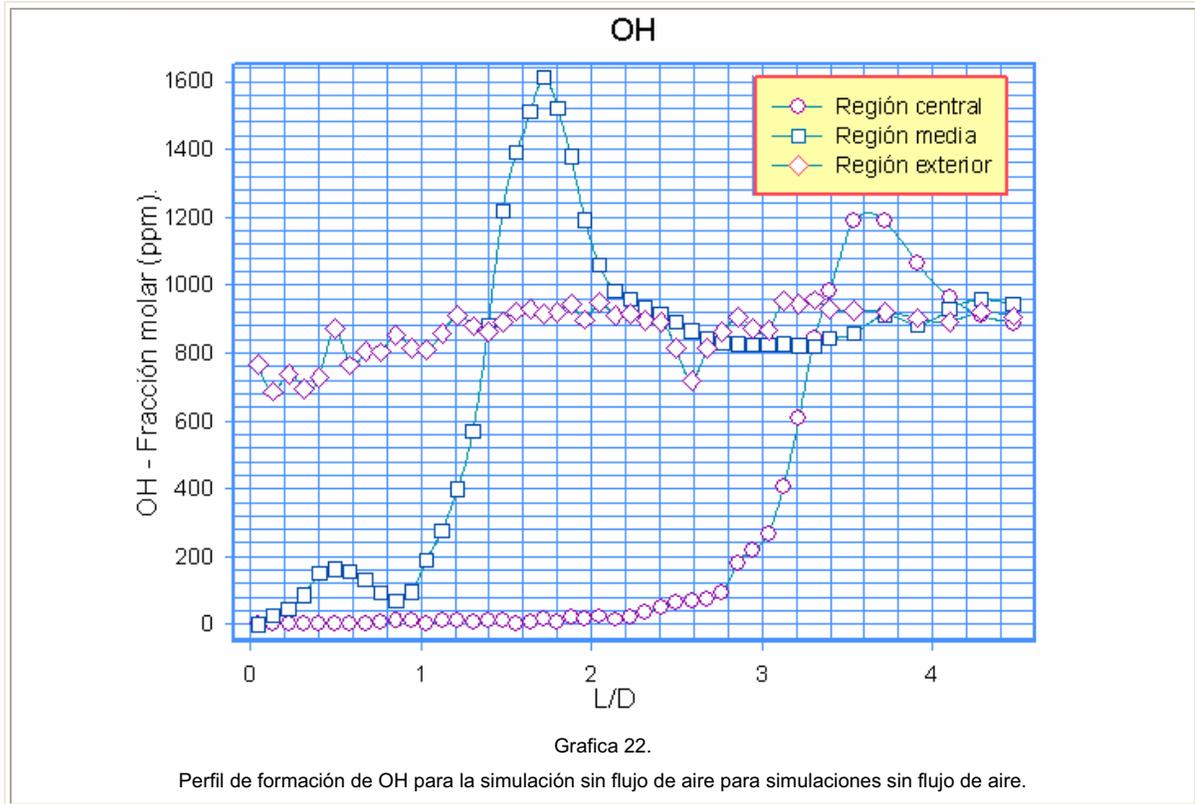


5.4.2 OH.

La gráfica 21 muestra el perfil de OH dentro de la cámara de combustión para el quemador sin flujo de aire lateral en todo el dominio de la simulación. La máxima concentración se presenta en la zona de reacción de combustible fresco y los gases producto de la combustión. El valor máximo registrado para esta zona es de 1700 ppm aproximadamente, posteriormente alcanza su valor de equilibrio, el cual es de 700 ppm.



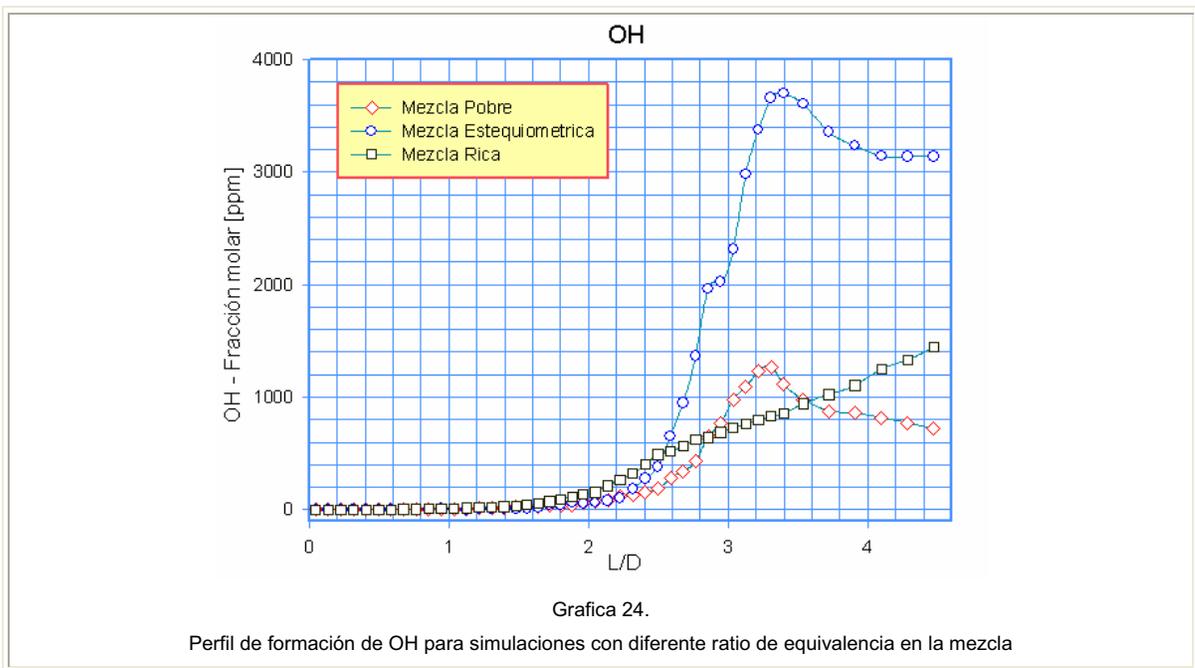
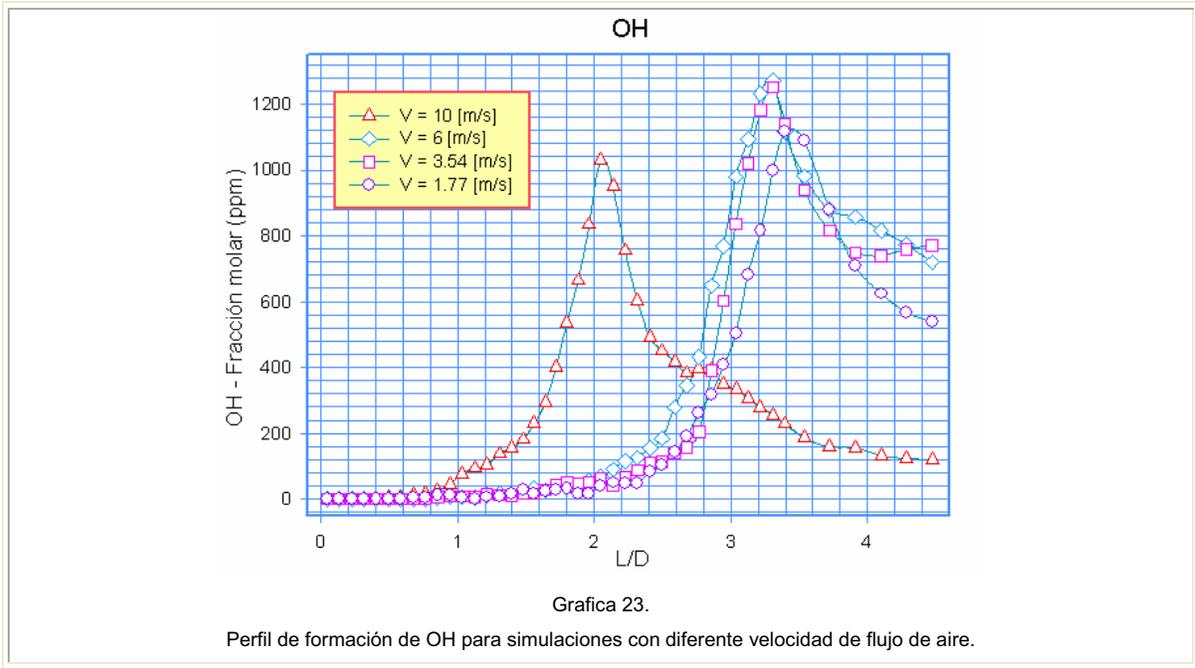
La gráfica 22 muestra tres gráficas para diferentes perfiles axiales, las dos primeras muestran la región central, en el cual se observó cómo se lleva a cabo la reacción de combustión, y la tercera, la zona adyacente a la pared del quemador en donde se presentan los efectos de la zona de recirculación.



El efecto del flujo de aire lateral se muestra en la gráfica 23. La simulación con 1.77 m/s tiene una concentración máxima de 1100 ppm y a la salida del quemador tiene una concentración de 580 ppm. Las simulaciones con 3.54 m/s y 6 m/s presentaron una concentración de 1300 ppm para un valor L/D de 3.2, el cual disminuye hacia la salida del quemador a un valor de 800 [ppm] aproximadamente. En el caso del quemador con una velocidad de aire lateral de 10 m/s la concentración alcanzó un valor medio máximo de 1020 ppm aproximadamente y su valor pico se localizó en una posición axial menor a las de los casos de menor velocidad.

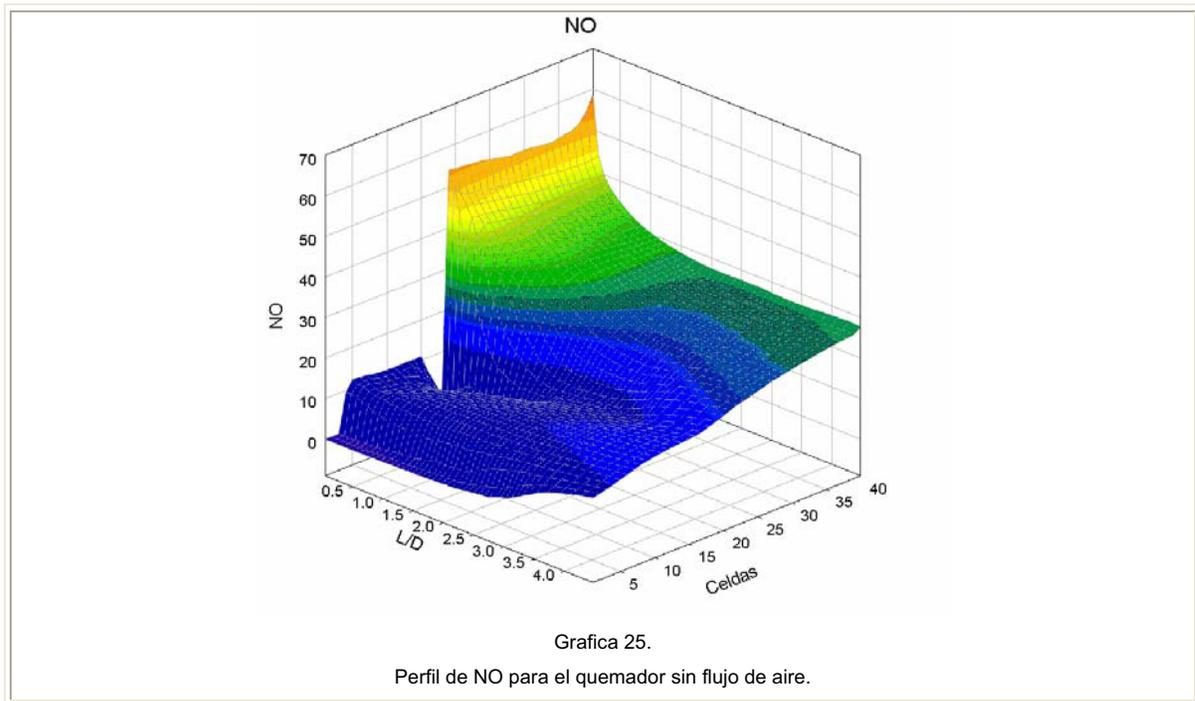
La figura 24 presenta el perfil de OH para la segunda serie de simulaciones, en las cuales se modificó la tasa de equivalencia de la mezcla de metano y aire que entra por la boquilla. La simulación con una relación de combustible Φ tuvo una concentración de 1100 ppm aproximadamente y a la salida del quemador la concentración es de 900 ppm aproximadamente. La simulación con una mezcla estequiométrica tuvo una concentración

de 3700 ppm para $L/D = 3.4$ y 3200 ppm a la salida del quemador. Mientras que para la simulación con mezcla rica la concentración máxima fue de aproximadamente 1400 ppm y se presenta a la salida del quemador.

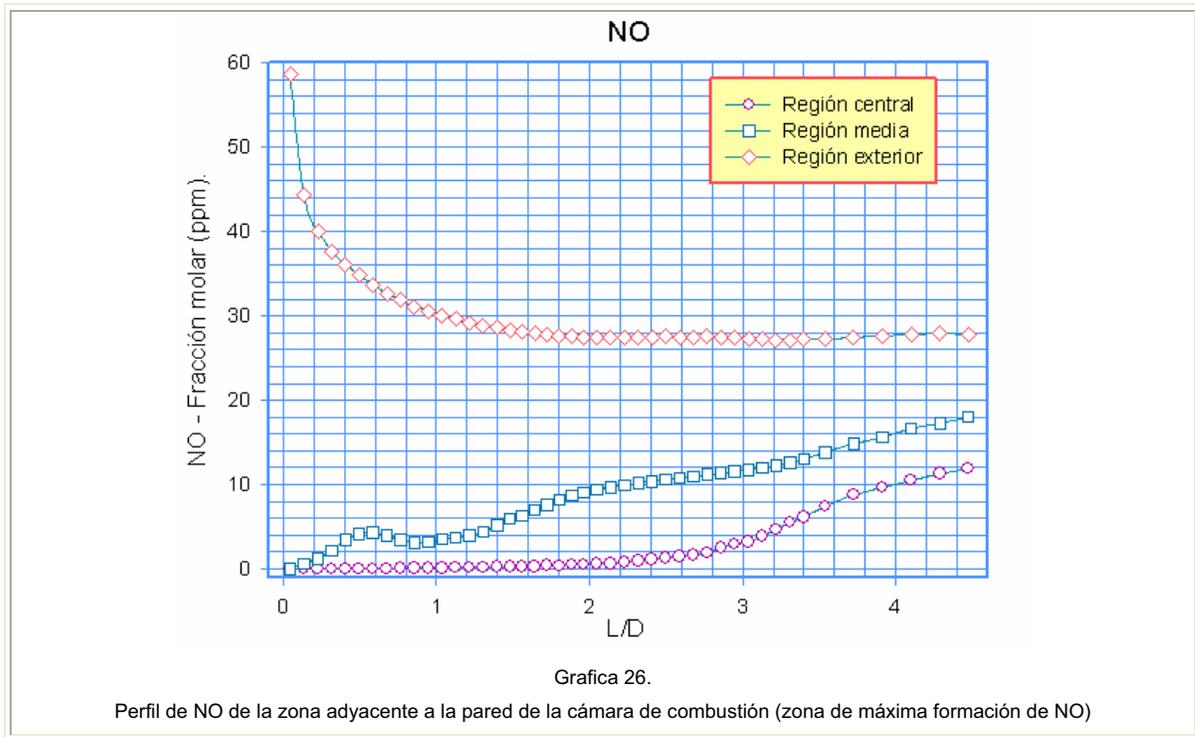


5.4.3 NO.

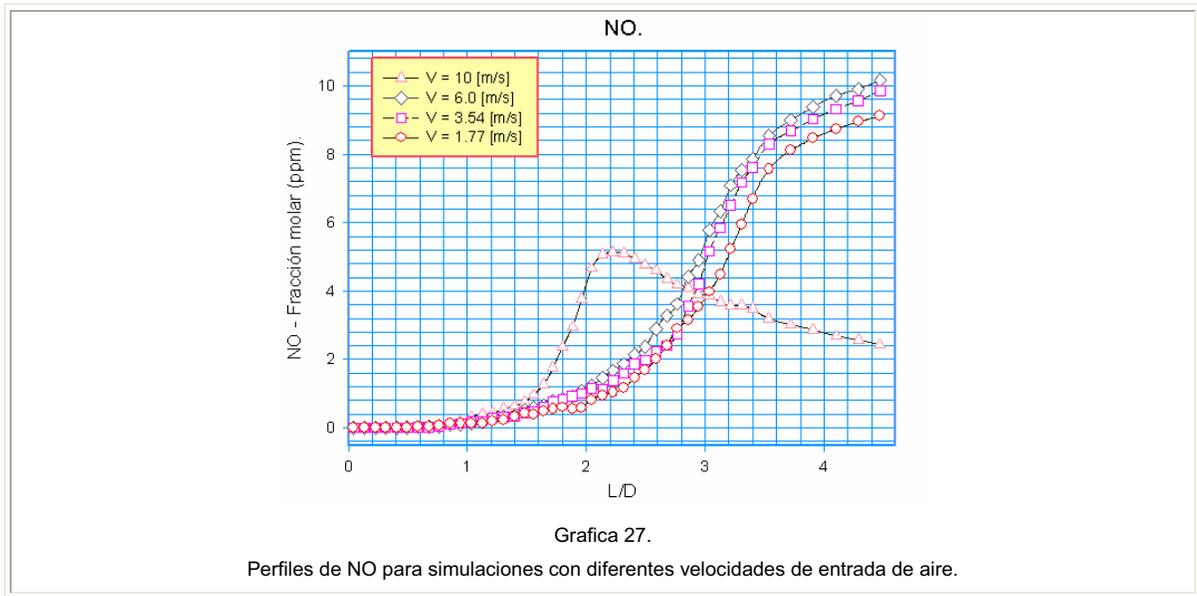
En la gráfica 25 se muestra los contornos de NO para todo el dominio del quemador sin flujo de aire.



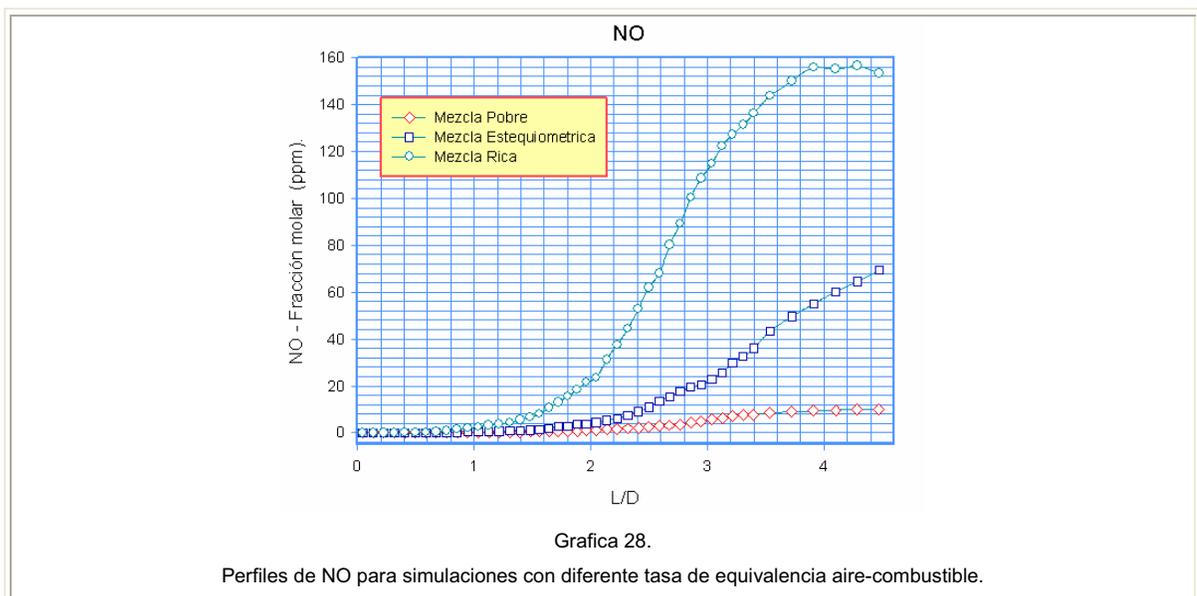
En la gráfica 26 se observan los perfiles para 3 diferentes estaciones radiales, que son: la zona central, la zona media de la cámara de combustión, y la zona adyacente a la pared de la cámara de combustión. En la zona central se tuvo concentraciones de NO de aproximadamente 15 ppm, y este valor se incrementó hasta 20 ppm en la salida del quemador. Las máximas concentraciones para este quemador se localizaron en la zona de recirculación adyacente a la pared de la cámara de combustión, que tuvo aproximadamente 60 ppm, disminuyendo a 30 ppm aproximadamente en la salida. Esto se debe a que en esa zona de recirculación se tiene una mayor cantidad de radicales libres, que favorecieron la producción de NO.



La influencia del flujo de aire en las concentraciones de NO se presentan en la gráfica 27. En esta figura los perfiles de NO son a lo largo del quemador para la estación próxima al eje central. Los perfiles de NO son semejantes a los de la temperatura, por la influencia que la misma presenta sobre las tasas de reacción de NO. Para velocidades entre 6m/s y 1.77 m/s las predicciones muestran concentraciones máximas de aproximadamente 12 ppm y se presentó en la salida de la cámara de combustión. Si la velocidad se incrementa a 10 m/s, la concentración máxima que se alcanza es de 5.5 ppm aproximadamente para una posición $L/D = 2$, que corresponde a la máxima temperatura alcanzada para este caso. Posteriormente esta concentración disminuyó a un valor de aproximadamente 2.2 ppm en la salida. Al igual que en el caso de las temperaturas, este comportamiento se debe principalmente a la mayor influencia que tiene el flujo de aire lateral, para velocidades mayores. No obstante, las concentraciones de NO con velocidades del flujo lateral más bajas permitió alcanzar concentraciones de aproximadamente el 80 % menores que las de la llama sin flujo lateral.



En la gráfica 28 se presentan los perfiles de NO a lo largo del quemador para las simulaciones en las que se modificó la tasa de aire-combustible del flujo en la boquilla del quemador. La simulación con mezcla pobre presentó una concentración máxima de aproximadamente 12 ppm, al aumentar la relación de combustible a $\Phi = 1$ (mezcla estequiometrica) la concentración de NO máxima fue de 70 ppm aproximadamente, lo cual representa un aumento del 16.6% en la concentración de NO respecto a la simulación sin flujo de aire que registró una concentración máxima de 60 ppm, debido principalmente al incremento en la temperatura de la llama.



6

6.1 Conclusiones

En esta tesis se estudió el efecto de incluir una corriente de aire adyacente en una flama premezclada. El incluir un flujo de aire tiene como objetivo el disminuir la temperatura de la flama y consecuentemente disminuir la concentración de NO. El modelo utilizado para esta tesis es un modelo estocástico de combustión, el cual es una combinación de los métodos de Dinámica de Fluidos Computacional y de Monte Carlo para la solución de la función de densidad de probabilidad conjunta (PDF).

Se realizaron diferentes simulaciones en las cuales se modificó la velocidad de salida del aire y se cambió la tasa de equivalencia del combustible de tal forma que se comparó el efecto de la composición de la mezcla en términos de su relación aire combustible. Estos resultados se compararon con el caso en el cual no se incluyó el flujo de aire. Cabe aclararse que estos resultados no fueron comparados con datos experimentales, sin embargo el modelo estocástico usado ya ha sido validado en otros casos de premezcla pobre. Con base en los resultados obtenidos se puede concluir:

- La velocidad de entrada del flujo de aire aunada a la composición de la mezcla de combustible son importantes porque influyen directamente en la disminución de contaminantes como CO y NO_x. En las simulaciones, se observó que una mayor velocidad del flujo de aire enfría de forma más eficiente la cámara de combustión y con ello se disminuyen las concentraciones altas de NO que se presentan en el quemador sin flujo de aire. Por otra parte, cuando se usó una mezcla pobre de combustible y una velocidad de flujo de aire alta, la concentración de NO fue menor.

Los niveles de NO fueron disminuidos como se esperaba, un 90% para la simulación con velocidad de flujo de aire adyacente de 10 m/s y un tasa de equivalencia de $\Phi = 0.42719$. Para las simulaciones restantes con flujo de aire, se logró una disminución de 80%. La técnica LPC aunada con la incorporación de un flujo de aire adyacente es óptima para poder disminuir la concentración de NO producto de la combustión en un quemador que utiliza combustible libre de nitrógeno (CH_4).

Adicionalmente, se puede concluir lo siguiente:

- La concentración de CO_2 disminuyó 21% respecto a la simulación sin flujo de aire y en con una mezcla rica se disminuyó alrededor del 26%.
- El H_2O disminuyó 26% con una velocidad de flujo adyacente de 10[m/s], cuando se realizaron los cambios en la composición de la mezcla no se presentó una disminución, y si un aumento del 94% para la mezcla estequiométrica.
- El O_2 presentó una mayor concentración a la salida del quemador que tiene una mayor velocidad de entrada de flujo de aire. Para las simulaciones con diferente composición de mezcla los valores a la salida de la cámara de combustión fue de cero, excepto para mezcla pobre. Lo que indica que todo el oxígeno fue consumido en el proceso de combustión.
- El CO disminuye aproximadamente 52% respecto a la simulación sin flujo de aire, mientras que para las simulaciones con diferente composición de mezcla la concentración fue de 5000 ppm y más de 15000 para una mezcla estequiométrica y mezcla rica respectivamente.
- La concentración de OH se mantuvo para las simulaciones con flujo de aire para diferente composición de mezcla la concentración se incrementó a 1400 ppm y 3000 ppm para una mezcla estequiométrica y rica respectivamente.

Recomendaciones para trabajos futuros.

Dado el efecto en la aerodinámica sobre la formación de especies químicas, se recomienda para trabajos futuros:

- Simular el flujo en 3 dimensiones.
- Realizar un análisis para evaluar el deterioro en la eficiencia térmica de la combustión, ocasionado por el enfriamiento causado por el flujo de aire adyacente.

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”

En este apéndice se presentan los esquemas lineales que se usaron en la discretización del 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 describen en base al sistema de celdas que se ilustra en la figura 1. Como ejemplo, se obtiene el valor de ϕ en la cara e de la celda P. La velocidad en la cara “e” se considerará, sin pérdida de generalidad, positiva ($u_e > 0$).

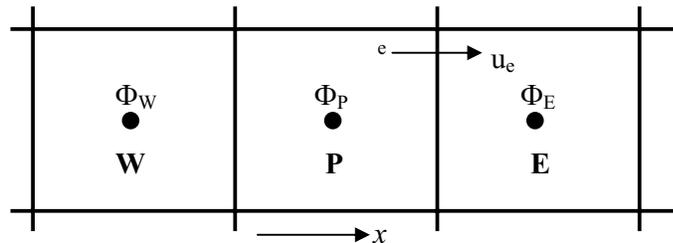


Figura 1: Diagrama esquemático de celdas.

1 Esquemas lineales

Diferencias desplazadas de primer orden

Con este esquema “e” propone 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.

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 ejemplo flujos con número de Reynolds altos, el esquema presenta oscilaciones numéricas.

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 esta denominado por los procesos de convección $Pe > 2$.

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

APÉNDICE B

Modelos de turbulencia.

En este apéndice se introducen, de forma concisa, los diversos modelos de turbulencia utilizados en el curso de esta Tesis. Los modelos se clasifican en dos categorías: Modelos de tipo "difusividad turbulenta", esencialmente variantes del modelo conocido como $k - \epsilon$. Cierres de segundo orden, en la forma de modelos de transporte de los esfuerzos de Reynolds.

En primer lugar, se presenta la ecuación exacta para los esfuerzos de Reynolds, seguida por los cierres de segundo orden que constituyen el transporte de esfuerzos de Reynolds utilizado en este trabajo. A continuación se presenta el modelo de turbulencia $k - \epsilon$ estándar, y las variantes RNG, Chen-Kim, y Hanjalic y Launder.

1 Cierres de segundo orden

La ecuación de transporte exacta para los esfuerzos de Reynolds ($\overline{u_i'' u_j''}$) es [63]:

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

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 modelación.

Si se hace uso de la definición (44) del capítulo 2, el término que expresa el efecto del gradiente de presión media, (o), 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 ([63] y [114]):

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

Donde $k = \kappa = 1/2 \overline{u_i'' u_i''}$ es la energía cinética turbulenta y ϵ es su tasa de disipación. La contribución de este término es muy pequeña y frecuentemente se desprecia ([65] y [77]).

Con fines de modelación, la correlación entre gradientes de presión fluctuante y fluctuaciones de velocidad, (b), frecuentemente se divide en una parte redistributiva y una parte isótropa [87]:

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

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

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

En flujos de baja velocidad, $Ma \ll 1$, el término (II) de la ecuación (5) generalmente se desprecia [7]. 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 el cierre de tipo gradiente [38]:

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

El término ϵ es la correlación de la disipación viscosa:

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

Si se supone isotropía local, el término ϵ_{ij} se puede escribir en función de la disipación de energía cinética turbulenta ϵ como [63]:

$$\epsilon_{ij} = \frac{2}{3} \tilde{\epsilon} \delta_{ij} \quad (9)$$

La tasa de disipación de la energía cinética turbulenta, $\tilde{\epsilon}$, se calcula de la siguiente ecuación de transporte, deducida por procedimientos similares a los utilizados en el caso de densidad constante [631]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{\epsilon}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{\epsilon} u_j) = & \underbrace{-C_{\epsilon 1} \bar{\rho} \frac{\tilde{\epsilon}}{k} \overline{u_k'' u_j''} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_j}}_{(A)} - \underbrace{C_{\epsilon 2} \bar{\rho} \frac{\tilde{\epsilon}^2}{k}}_{(B)} + \underbrace{C_{\epsilon 3} \frac{\tilde{\epsilon}}{k} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j}}_{(C)} \\ & + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_j} \left(C_{\epsilon 4} \bar{\rho} \frac{\tilde{k}}{\tilde{\epsilon}} \overline{u_j'' u_k''} \frac{\partial \tilde{\epsilon}}{\partial x_j} \right)}_{(D)} \end{aligned} \quad (10)$$

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

Se han propuesto modelos para este término por ejemplo por Launder et al [5] (modelo ML), Gibson y Younis [51] (modelo MG) y Jones y Musonge [68] (modelo MJ). Denotando al término redistributivo como 11^\wedge , los modelos se escriben como:

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

Donde $P_{ij} = -(\overline{u_i''u''} \partial \widetilde{u}_j / \partial x_k + \overline{u_j''u''} \partial \widetilde{u}_i / \partial x_k)$ Las constantes de las ecuaciones (7), (10) y (11) se presentan en la tabla 1. Sustituyendo las ecuaciones (6), (9) y (11) en la ecuación de los esfuerzos de Reynolds (1) se tiene:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\overline{\rho u_i''u_j''}) + \frac{\partial}{\partial x_k} (\overline{\rho \widetilde{u}_k'' u_i'' u_j''}) = -\frac{\partial}{\partial x_k} (C_{ijk}) - \overline{\rho} \left(\overline{u_i''u''} \frac{\partial \widetilde{u}_j}{\partial x_k} + \overline{u_j''u''} \frac{\partial \widetilde{u}_i}{\partial x_k} \right) - \frac{2}{3} \overline{\rho} \cong \delta_{ij} + II_{ij} \quad (12)$$

Modelo	MG	ML	MJ
C_{e1}	1.4	1.44	1.40
C_{e2}	1.8	1.90	1.90
C_{ϵ}	0.15	0.15	0.18
C_S	0.22	0.21	0.22
C_1	3.0	1.5	3.0
C_2	0.30	-0.582	-0.44
C_3	-	0.764	0.46
C_4	-	-0.182	-0.23

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

2 Modelos de viscosidad turbulenta

Un método alternativo para determinar los esfuerzos de Reynolds, $\overline{u_i''u_j''}$, son 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:

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

Donde $v_T = (\mu_T / \bar{\rho})$ es la viscosidad turbulenta. A diferencia de la viscosidad molecular ($v = \mu / \rho$) v_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:

$$\overline{\rho u_i \phi''} = -\bar{\rho} \frac{v_T}{S_{C_T}} \frac{\partial \tilde{\phi}_\alpha}{\partial x_i} \quad (14)$$

Donde S_{C_T} es el número de Schmidt/Prandtl turbulento. La viscosidad turbulenta v_T puede calcularse de distintas formas, dando lugar a una plétora de modelos con un número variable de ecuaciones diferenciales. Los más populares de estos modelos son, probablemente, los de la familia del modelo $k-\epsilon$. Las variantes utilizadas en este trabajo se presentan a continuación.

2.1 Modelo $k - \epsilon$

En este modelo, v_T se define como [66]:

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

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

La ecuación para la energía cinética turbulenta, \tilde{k} , se obtiene de la ecuación (11. haciendo $i = j$, aplicando la hipótesis de isotropía local, y dividiendo entre [66]:

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

Los esfuerzos de Reynolds, $\overline{u_i''u_j''}$ se expresan de acuerdo con la ecuación (13). El término (a) se aproxima como [79]:

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

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

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

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, $\overline{\epsilon}$, se obtiene a partir de la ecuación (10) [123]:

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

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

Apéndice C

Modelación de NO_x .

Los flujos reactivos que se simulan en esta Tesis son premezclados y pobres de combustible (tasa de equivalencia menor que uno). La técnica de combustión de premezcla pobre permite reducir las emisiones de NO_x durante la combustión, por las relativamente bajas temperaturas de 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) ([34] y [2]), que también son contaminantes.

Los NO_x se producen en combustibles sin contenido en nitrógeno, por los mecanismos de Zeldovich, N_2O intermedio y Espontaneo. 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 . Después, se exponen algunos de los factores que afectan la producción de NO_x en llamas de premezcla pobre y principalmente para la combustión de metano-aire.

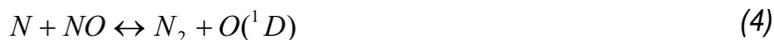
1 Rutas de formación del NO ,

1.1 Mecanismo de Zeldovich

El mecanismo de Zeldovich comprende las siguientes reacciones [98]:



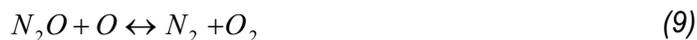
El paso de reacción que controla la velocidad de formación de NO es la reacción (1). Debido a la relativa alta energía de activación (E_a) de la reacción (1), la formación de NO por este mecanismo es muy dependiente de la temperatura. Este mecanismo es muy sensible a las fluctuaciones de temperatura [33] y produce NO principalmente a temperaturas mayores que 1800 K [98]. Las siguientes reacciones adicionales se incluyen a este mecanismo por Michaud et al [97]:



Donde $O(^1D)$ denota el átomo de O excitado electrónicamente. Por su dependencia con la temperatura, esta ruta frecuentemente se denomina mecanismo "térmico" [141].

1.2 Mecanismo N₂O intermedio

En el mecanismo N₂O intermedio, el NO se forma a partir del N₂ vía la especie intermedia N₂O. Esta ruta tiene las siguientes reacciones [95]:



Las reacciones (8) y (15) pertenecen al mecanismo de Michaud et al [97]. En esta ruta, las reacciones de inicio son (7) y (8).

En la combustión de premezcla pobre, el NO se forman principalmente por la reacción (9) en altas presiones, y también por la reacción (12) en presiones próximas a 1 atm ([135] y [115]). En condiciones de premezcla pobre esta ruta puede contribuir significativamente en la formación de los NO_x total ([103], [146] y [136]).

1.3 Mecanismo del NO Espontáneo

El mecanismo Espontáneo (o súbito) fue identificado por Fenimore [47]. En esta ruta, los radicales hidrocarburos el frente de llama, CH_i , atacan el N_2 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 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) [103]. El mecanismo Espontaneo 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 [115].

2 Factores que influyen en la formación de NO_x

En la combustión de premezcla pobre, las variables que afectan usualmente a la formación de NO_x son: el tipo combustible; el tiempo de residencia en la zona de combustión, T_{res} ; la temperatura de llama adiabática, T_{adia} , y la presión, p . La temperatura de llama adiabática depende de la tasa de equivalencia de la mezcla; si la tasa de equivalencia es menor que uno, la temperatura de llama adiabática se incrementa con la tasa de equivalencia. A continuación, se presentan la influencia de estos factores principalmente para la combustión de metano-aire.

2.1 Combustible

Los resultados de la combustión del metano, etano y propano muestran que la producción de NO_x depende significativamente del tipo de hidrocarburo. Para las mismas condiciones, la combustión del metano ha demostrado producir niveles más bajos de NO_x que el etano y propano ([126] y [135]).

En llamas con temperatura de combustión adiabática menores que 1700 K, el efecto del tipo de combustible de la premezcla en la formación de NO_x es mínimo ([135] y [146]).

2.2 Tiempo de residencia en la zona de combustión

El tiempo de residencia influye de manera significativa en la formación de NO_x . En la combustión del metano, los niveles de NO_x tienden a aumentar cuando se incrementa el tiempo de residencia ([135] y [129]). Sin embargo, Rutar et al [125] (metano, $p=3-6.5$ atm, $T_{res}=0.5-4.0$ s y $s=0.6-0.7$) reportaron que el comportamiento de los NO_x cambia con el tiempo de residencia. El NO_x decrece, alcanza un valor mínimo y después aumenta conforme el tiempo de residencia se incrementa. La mínima concentración que alcanza el NO_x tiende a cambiar hacia valores de tiempo menores conforme la presión baja.

Para temperaturas de combustión adiabática menores que 1700 K, el NO_x presenta una dependencia pequeña con el tiempo de residencia ([129] y [146]).

2.3 Temperatura de flama adiabática

La temperatura de combustión tiene el efecto más significativo en la formación de los NO_x . Existen resultados experimentales ([47], [135], [146], [151], [129]) muestran que las emisiones de NO_x se incrementan aproximadamente de forma exponencial con la temperatura de flama adiabática.

En la combustión de CH_4 -aire y de H_2 -aire, el NO_x presenta una dependencia mínima con la temperatura de flama adiabática para temperaturas menores que 1700 K ([146] y [151]).

2.4 Presión

En la combustión del metano, para un rango de presión entre 1 y 10 atm, el efecto de la presión en los NO_x es despreciable o ligeramente negativo ([135] y [103]). (Una

dependencia similar es reportada por Joshi et al [69] para presiones entre 5 y 30 atm.) Para presiones cercanas a 30 atm, Nicol et al [103], reportaron una dependencia de los NO_x de aproximadamente la raíz cuadrada de la presión. Recientemente, Rutar et al [125] muestran que la dependencia de los NO_x con la presión es función del tiempo de residencia.

En la combustión del metano, aún cuando el efecto de la presión en la formación de los NO_x pueda ser relativamente baja, la contribución relativa de cada uno los mecanismos varía con la presión. Para presiones cercanas a 1 atm, los tres mecanismos contribuyen en la formación de los NO_x y ninguno se puede despreciar ([136], [32], [115] y [103]). En altas presiones, por ejemplo 14 Atm [103], la ruta de N_2O intermedio tiende a contribuir de forma significativa en los NO_x totales.

Bibliografía

- [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 MV. 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*, 71:109122, 1988.
- [15] K.Ñ. C. Bray. Proc. R. Soc. Lond. A, 431:315-335, 1990.
- [16] P.Ñ. 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. Larrouturou, 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.Ñ. 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 Non-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 an Extended k - ε Turbulence Closure Model. Technical Report CR-179204, NASA, 1987.
- [28] F. C. Christo, A. R. Masri, and E. M. Neftci. *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 Phoenics. *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

Bibliografia.

- [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] A. Favre. *Problems of Hydrodynamics and Continuum Mechanics*. SIAM, , 1969.
- [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] H. H. Ferziger and M. Peric. *Computational Methods for Fluid Dynamics*. Springer-Verlag. 1996.
- [49] Centre for the Analysis and Dissemination of Demonstrated Energy Technologies. <http://194.178.172.86/home.htm>, March 2000.
- [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] M. M. Gibson and B. A. Younis. Calculation 'of Swirling Jets with a Reynolds Stress Closure. *Physics of Fluids*, 29:38, 1986.
- [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] P. Glarborg, N. 1. Lilleheie, S. Byggstoyl, 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. o
- [54] D. C. Haworth and T. J. Mungal. *Journal of Fluid Mechanics*, 244:405-436, 1992.
- [55] S. Haykin. *Neuronal Networks: A Comprehensive Foundation*. Macmillan College Publishing Company, New York, 1994.
- [56] M. V. Heitor, A. M. K. P. Taylor, and J. H. Whitelaw. The Interaction of Turbulence and Pressure Gradients in a Baffle-Stabilized Premixed Flame. *Journal of Fluid Mechanics*, 181:387-413, 1987
- [57] A. C. Hindmarsh. ODEPACK, *A Systematized Collection of ODE Solvers*, pages 55-64. Scientific Computing, North-Holland, Amsterdam, 1983.

- [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] 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] 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] J. Janicka and W. Kollmann. The Calculation of Mean Radical Concentration in Turbulent-Diffusion Flames. *Combustion and Flame*, 44:319-316, 1982.
- [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] W. P. Jones. Models for Turbulent Flows with Variable Density and Combustion. In W. Kollmann, editor, *Prediction Methods for Turbulent Flows*, Lecture Series 1979-2. Von Karman Institute for Fluid Dynamics. Rhode Saint Genese Belgium, January 1979.
- [64] W. P. Jones. *Turbulence Modeling and Numerical Solutions Methods for Variable Density and Combustion Flows*, pages 306-374. Academic Press.1994.
- [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.
- [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.
- [67] W. P. Jones and R. P. Lindstedt. Global Reaction Schemes for Hydrocarbon Combustion. *Combustion and Flame*, 73:233-249, 1988.
- [68] W. P. Jones and P. Musonge. Closure of the Reynolds Stress and Scalar Flux Equations. *Physics of Fluids*, 31(12):3589-3604, 1988.
- [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.
- [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.

- [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.
- [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.
- [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.
- [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.
- [75] B. Koren. *A Robust Upwind Discretisation Method for Advection Diffusion and Source Terms*, page 117. Vieweg, Braunschweig, 1985.
- [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.
- [77] T. Landefeld, 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.
- [78] B. E. Launder, M. A. Leschziner, and M. Sindir. The umist/ucd computations for the afosr-ittm-stanfors conference on complex turbulent flows. Technical Report TFD/82/1, UMIST, July 1982.
- [79] B. E. Launder and D. B. Spalding. *Lectures in Mathematical Models of Turbulence*. Academic Press, 1972.
- [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. .
- [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. .
- [82] B. P. Leonard. A Stable and Accurate Convective Modeling Procedure Based on Quadratic Upstream Interpolation. *Comp. Methods Appl. Mech. Eng.*, 19:59, 1979.
- [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.
- [84] R. P. Lindstedt and E. M. Váos. Modeling of Premixed Flames with Second Moment Methods. *Combustion and Flame*, 116:461-485, 1999.
- [85] F. C. Lockwood and A. S. Naguib. *Combustion and Flame*, 24:104, 1955.
-
-

- [86] J. C. Ludwing, H. Q. Qin, and D. B. Spalding. The PHOENICS Reference Manual. Technical Report CHAM TR/200, CHAM Ltd, London, 1989.
- [87] J. L Lumley. Pressure-Strain Correlation. *Physics of Fluids*, 18(6):750, 1975.
- [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.
- [89] U. Maas and S. B. Pope. Simplifying Chemical Kinetics: Intrinsic Low-Dimensional Manifolds in Composition Spaae. *Combustion and Flame*, 88:239-264, 1992.
- [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.
- [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.
- [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.
- [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.
- [94] H. P. Mallampalli, T. H. Fleteher 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.
- [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.
- [96] J. B. McVey, F. C. Padget, T. J. Rosfjord; A. S. Hu, A. A. Peracchio, B. Sehlein, and D. R. Tegel. Evaluation of Low-NO_x Combustor Concepts for Aeroderivative Gas Turbine Engines. *ASME-Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 115:581-587, 1993.
- [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.

- [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.
- [99] P. Moin and K. Mahesh. Direct Numerical Simulation: a Tool in Turbulence Research. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 30:539-578, 1998.
- [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.
- [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.
- [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.
- [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.
- [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.
- [105] B. Ñoll. Evaluation of a Bounded High-Resolution Scheme for Combustor Flow Computations. *AIAA Journal*, 30(1):64-69, 1992.
- [106] A. T. Norris and A. T. Hsu. Comparison of PDF and Moment Closure Methods in the Modeling of Turbulent Reacting Flows. In SAE and ASME, editor, *30th Joint Propulsion Conference-AIAA*, Indianapolis, Indiana, June 27-29 1994.
- [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.
- [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.
- [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.

- [110] S. V. Patankar. Numerical Heat Transfer and Fluid Flow. Series in Computational Methods in Mechanics and Thermal Science. Hemisphere Publishing Corporation, January 1980.
- [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.
- [112] N. Peters. Numerical Simulation of Combustion Phenomena. Lecture Notes in Physics, 241, page 90. Springer-Verlag, Berlin, 1985.
- [113] N. Peters. Laminar Flamelets Concepts in Turbulent Combustion. In The Combustion Institute, editor, *21th Symposium (International) on Combustion*, pages 1231-1250, Pittsburgh, 1986,:
- [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.
- [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.
- [116] S. B. Pope. *Combustion and Flame*, 27:299, 1976.
- [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. .
- [118] S. B. Pope. The Statistical Theory of Turbulent Flames. *Phil. Trans. R. Soc.*, pages 291-529, 1979.
- [119] S. B. Pope. A Monte Carlo Method for the PDF Equations of Turbulent Reactive Flow. *Combustion Science and Technology*, 25:159-174, 1981.
- [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.
- [121] S. B. Pope. PDF Methods for Turbulent-Reactive Flows. *Progress Energy Combustion Science*, 11:119-192, 1985.
- [122] S. B. Pope. Computationally Efficient Implementation of Combustion Chemistry "in-situ" Adaptive Tabulation. *Combustion Theory Modeling*, 1:41-63, 1997.
- [123] W. Rodi. *Turbulence Models and their Application in Hydraulics*. International Association for Hydraulics Research, ISBN 902127002-1. Delf, Holland, 1984.
- [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.

- [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.
- [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.
- [127] R. Siegel and J. R. Howell. *Thermal Radiation Heat Transfer*, McGraw-Hill, Washington, 2nd edition, 1981.
- [128] L.D. Smoot and P. J. Smith. *Coal Combustion and Gasification*. Plenum Press, New York, 1985.
- [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.
- [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.
- [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.
- [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.
- [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.
- [134] D. B. Spalding. A General-Purpose Computer Program for Multidimensional One and Two-Phase Flows. In *IMACS Meeting*, Lehigh University, Pennsylvania, 1981.
- [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.
- [136] R. C. Steele, P. C. Malte, D. G. Nicol, and J. C. Kramlich. NO_x and N_2O in Lean Premixed Jet Stirred Flames. *Combustion and Flame*, 100, 1995.
- [137] P. K. Sweby. High Resolution Schemes Using Flux Limiters for Hyperbolic Conservation Laws. *SIAM Journal on Mathematical Analysis*, 21:995-1011, 1984.

- [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.
- [139] H. Tennekes and J. L. Lumley. *A First Course in Turbulence*. MIT Press. 1977.
- [140] D. Veynante, F. Lacas, and S. Candel. In *Proceedings of the Marble Symposium*, pages 237-256, 1988.
- [141] J. Warnatz, U. Mass, and R. W. Dibble. *Combustion*. Springer. 1996.
- [142] N. P. Waterson. Development of Bounded Higher-Order Convection Scheme for General Industrial Applications. Technical Report 1994-33, Von Karman Institute, Belgium, 1994.
- [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.
- [144] C. K. Westbrook and F. L. Dryer. Chemical Kinetic Modeling of Hydrocarbon Combustion. *Progress Energy Combustion Science*, 10(1), 1984.
- [145] F. A. Williams. *Combustion Theory*. Second edition, the Benjamin/Cummings Publishing Company. 1985.
- [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.
- [147] V. Yakhot and S. A. Orszag. Renormalization Group Analysis of Turbulence. 1. Basic Theory. *Journal of Scientific Computing*, 1(1):3-51, 1986.
- [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.
- [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.
- [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.
- [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.

- [152] Stevan Nemoda, Vukman Bakić, Simeon Oka. Laboratory for Thermal and Energy Research, *Experimental and numerical investigation of gaseous fuel combustion in swirl chamber*, 2005.
- [153] G. Cabot, D. Bauchelles, B. Taupin, A. Boukhalifa. Saint Etienne du Rouvray. *Experimental study of lean premixed turbulent combustion in a scale gas turbine chamber*. France, 2004.
- [154] K. LYLE, L. K. TSENG, J. P. GORE, N. M. LAURENDEAU. *A Study of Pollutant Emission Characteristics of Partially Premixed Turbulent Jet Flames*. Purdue University. 1999.
- [155] William Vicente, Martin Salinas, Esteban Barrios. *PDF modelling of CO and NO formation in lean premixed methane flames*. Instituto de ingenieria UNAM, 2003.