



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

Facultad de Ingeniería

“Simulación Numérica de una Flama Premezclada en un Quemador Turbina de Gas a Escala de Laboratorio”

TESIS

Para obtener el título de:

Ingeniero Mecánico

Presenta:

Rito Ángeles León Felipe

Director de tesis:

Dr. William Vicente y Rodríguez



Ciudad Universitaria México D.F a 14 de mayo de 2007.



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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

Agradecimientos

A mi padre y madre por darme una vida sin falta de alguna cosa necesaria, y ahora más que nada por la enorme paciencia que me tienen. Esta tesis se los dedico con todo mi cariño, respeto y admiración. Y aunque poca veces se los digo, saben que los AMO.

A los amigos de innumerables nombres, pero de valor único que hasta hoy me he encontrado y que han influido para la persona que soy, gracias por haber confiado en mí, por su apoyo incondicional, y por ser mi conciencia y mente cuando estás no existen en mi.

A todos lo profesores buenos, que han cultivado conocimientos y experiencias para mi desarrollo como persona e ingeniero, también son buenos amigos.

Al mar por su fuerza, inmensidad y variedad de cada mañana.

Índice:	Página
1. Introducción.....	1
Objetivos.....	8
Estructura de la tesis.....	9
2. Ecuaciones de transporte.....	10
1. Introducción.....	10
2. Continuidad.....	10
3. Conservación de cantidad de movimiento.....	11
4. Conservación de especies.....	12
5. Conservación de energía total.....	14
6. Ecuación de estado y flujo difusivo.....	16
7. Ecuación diferencial homogénea y fracción de mezcla.....	20
8. Promediado de las ecuaciones.....	22
9. Función de densidad de probabilidad conjunta.....	26
10. Ecuación de transporte para la función de densidad de probabilidad conjunta.....	28
10.1 Deducción e interpretación.....	28
10.2 Modelos de mezcla.....	33
10.3 Modelo lineal Mean Square Estimation.....	35
10.4 Modelo de Curl modificado.....	36
3. Modelos de combustión.....	38
1. Introducción.....	38
2. Clasificación de los sistemas con reacción.....	41
3. Modelo Eddy Break Up.....	45
4. Función de densidad de probabilidad de forma supuesta.....	47
5. Modelos de flamelet.....	49
6. Mecanismos reducidos.....	50
7. Mecanismos químicos para el metano.....	53
7.4 Mecanismo sistemáticamente reducido de cinco pasos.....	53
8. Métodos de representación química.....	55
8.1 Método de la tabla de interpolación.....	56
8.2 Redes neuronales artificiales.....	61
8.3 Tabulación in-situ estructurada.....	63
9. Modelo de radiación.....	65
4. Método de solución.....	67
1. Introducción.....	67
2. Método de volúmenes finitos.....	68
3. Método de Monte Carlo.....	75
3.1 Discretización de la PDF.....	76
3.2 Técnica de pasos fraccionados.....	78
3.3 Pasos de evolución.....	80
3.4 Paso fraccionado de transporte.....	80
3.5 Proceso de remoción.....	83
3.6 Paso fraccionado de mezcla.....	84
3.7 Paso fraccionado de reacción química.....	86
4. Acoplamiento de los métodos de volúmenes finitos y Monte Carlo.....	86

5. Predicción de una llama premezclada de metano y aire.....	89
1. Introducción.....	89
2. Configuración Experimental.....	90
3. Detalles numéricos.....	93
4. Resultados y conclusiones.....	96
6. Conclusiones y recomendaciones para futuros trabajos.....	104
Apéndice A esquemas de discretización.....	121
1. Esquemas lineales.....	122
1.2. Diferencias desplazadas de primer orden.....	122
1.3. Diferencias centradas.....	122
1.4. Híbrido.....	123
Apéndice B Modelos de turbulencia.....	124
1. Cierres de segundo orden.....	124
2. Modelos de viscosidad turbulenta.....	128
2.1 Modelo $K - \varepsilon$	129
Apéndice C Modelización de NO_x	131
1. Rutas de formación de NO_x	131
1.1 Mecanismo de Zeldovich.....	131
1.2 Mecanismo N_2O intermedio.....	132
1.3 Mecanismo Prompt.....	133
2. Factores que influyen en la formación de NO_x	134
2.1 Combustible.....	134
2.2 Tiempo de residencia en la zona de combustión.....	135
2.3 Temperatura de combustión adiabática.....	135
2.4 Presión.....	135
<hr/> Bibliografía.....	107
<hr/>	

1

Introducción

Desde su comienzo, el hombre ha tenido la necesidad de transformar el medio en el que vive para su beneficio, muchas veces sin importar a que otra especie perjudica o elimina. Afortunadamente, esta tendencia está cambiando en nuestros días, ya que se tiene la necesidad no solo de mejorar nuestra calidad de vida, sino también el de perjudicar lo menos posible nuestro alrededor. Algunos recursos que antes se pensaban inagotables, hoy en día son casi escasos o más difíciles de adquirir, por lo cual se busca la mejora en cada proceso que hoy tenemos para llevar a cabo una actividad, sobre todo las que tienen que ver con el medio ambiente.

Uno de los procesos que daña el medio ambiente es la combustión en las turbinas de gas para la producción de energía, motivo por el cual se han implementado normas, estatutos y leyes para el control de las emisiones en estos sistemas. Adicionalmente a este control, se tiene que tomar en cuenta el alto costo del combustible y su cada vez más difícil proceso de extracción y tratamiento, motivo por el cual se tiene que seguir investigando y desarrollando procesos para un mejor aprovechamiento de la energía de estos combustibles.

Desde hace varios años, algunas compañías trabajan a profundidad en el diseño, operación y experimentación de turbinas de gas, de una escala grande en su mayoría, para desarrollar y comercializar un sistema con alta eficiencia. Los estudios se enfocan principalmente en la cámara de combustión y en el inyector de combustible para que la mezcla (aire-combustible) introducida en el quemador

Capitulo 1

sea la óptima y que el tiempo de residencia dentro de la cámara de combustión sea el suficiente para obtener de los gases productos de la combustión su máxima energía disponible. Una de estas técnicas, consiste en un quemador de combustión de premezcla pobre (Lean Premixed Combustión, LPC) con entrada de los reactantes tal que se evita la formación de un torbellino dentro de la cámara del mismo para procurar un mayor tiempo de residencia de la mezcla de gases. La combustión de premezcla pobre ha comenzado a ser una opción atractiva para producir menos contaminantes como el NO_x, que tiene repercusiones en el medio ambiente y la salud del ser humano. En la LPC, el aire y el combustible están previamente mezclados a la entrada del quemador, en concentraciones tales que la mezcla aire-combustible es pobre, con lo cual se evita las zonas de alta temperatura, asociadas a las zonas estequiométricas, donde se forma principalmente el NO_x térmico. Sin embargo, la LPC puede presentar desventajas tales como el “flash back”, con lo cual se puede producir explosiones aguas arriba del quemador. Adicionalmente, la mezcla puede estar próxima al límite de flamabilidad pobre, con lo cual se puede tener un incremento en las concentraciones de hidrocarburos inquemados y CO, debido a la inestabilidad de la llama. Esta inestabilidad es debida también a la extinción y autoencendido de la llama.

Como corolario de lo anterior, se requieren el conocimiento del flujo fluido dentro del quemador y por lo tanto de métodos que predigan adecuadamente la aerodinámica del flujo, la cinética química de las especies y su interacción con el flujo turbulento.

Métodos de predicción

En el epígrafe anterior se mencionó la necesidad de conocer la aerodinámica del flujo reactivo dentro de un quemador. El sistema a analizar es de geometría multidimensional y consta de una mezcla multicomponente de gases que esta reaccionando químicamente. El flujo, como en la mayoría de las aplicaciones

Capítulo 1

industriales, es turbulento. El sistema se puede analizar mediante dos técnicas: Ensayos experimentales en laboratorio y simulación numérica.

El trabajo experimental requiere un prototipo o un modelo físico a escala del sistema, donde se puedan hacer ensayos, cuya operación y construcción no solo significa más costo, sino además más tiempo. Por otra parte las mediciones requieren de técnicas de medidas fiables y no intrusivas, que en muchas ocasiones son difíciles de implementar en modelo o prototipo.

El costo y las escalas temporales asociadas a la experimentación están promoviendo el uso de la simulación numérica. Esta es a menudo más económica que la experimentación, y proporciona información completa y detallada de las variables relevantes del flujo.

Cuando en un flujo turbulento ocurre un proceso de combustión, como en el problema abordado en esta Tesis, el análisis numérico del problema tiene la dificultad añadida de la interacción entre la aerodinámica y la cinética química, interacción que tiene lugar en las más pequeñas escalas de flujo turbulento. A esta dificultad se suma la complejidad de la cinética química de la combustión, que involucra, incluso para los combustibles más simples, un gran número de reacciones y de especies. Por ejemplo, en la combustión del metano y aire, uno de los mecanismos más generalmente admitidos en la actualidad, el llamado mecanismo GRI 2.11, esta compuesto de 2769 reacciones y 49 especies.

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

La DNS consiste en discretizar directamente las ecuaciones instantáneas que gobiernan el movimiento del flujo reactivo, válidas tanto para flujo laminar como

Capítulo 1

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

La aproximación de la Simulación de las Grandes Escalas trata de resolver las ecuaciones para las fluctuaciones de mayor tamaño, modelando el efecto de las pequeñas fluctuaciones sobre ellas. Aunque esta técnica puede mejorar sustancialmente la predicción de la aerodinámica del flujo, sobre todo en flujos con estructuras transitorias de vorticidad que dominan los procesos, la mayor parte de las reacciones químicas asociadas a la combustión siguen sucediendo en estructuras que están por debajo de la resolución de la malla, y por lo tanto hay que modelar su efecto en las estructuras resueltas.

Otra posibilidad de simulación es la de las Ecuaciones Promediadas, extensamente utilizadas en casos prácticos de interés industrial y que consiste en promediar todas la escalas, espaciales y temporales, de las fluctuaciones turbulentas y resolver las ecuaciones de transporte en términos de variables medias del sistema. Por lo tanto en esta Tesis se utilizara esta alternativa y será explicada con mas detalle en el siguiente capítulo.

En las aproximaciones de LES y de RANS se precisan por tanto modelos que representan el transporte de la cantidad de movimiento, energía y especies

Capítulo 1

químicas por parte del campo fluctuante (la turbulencia) no resuelto. También, en ambas alternativas de simulación se precisa la representación de valores medios (RANS), o filtrados (LES), de la tasa de reacción química

En el Método RANS, utilizado en esta tesis, el transporte turbulento de cantidad de movimiento, energía o especies se modela mediante alguno de los llamados “Modelos de Turbulencia”, por ejemplo $k-\epsilon$ o Transporte de los Esfuerzos y Flujos de Reynolds.

La modelización del término de reacción química media implica a menudo la comparación entre los tiempos característicos asociados a la cinética química, t_q , y aquellos asociados a una escala del movimiento turbulento, por ejemplo la escala integral de turbulencia, t_l , o la escala kolmogorov, t_{ko} . El número de Damköhler es el relación entre estos tiempos, por ejemplo $Da_l = t_l / t_q$. (se puede análogamente definir $Da_{ko} = t_{ko} / t_q$).

Una hipótesis a menudo utilizada es la llamada “hipótesis de química rápida”, en la que se supone que $t_q \ll t_l$ o $Da_l \gg 1$. En esta situación se considera frecuentemente que la reacción química ocurre en una capa delgada, que no es afectada internamente por la turbulencia, por lo que se puede simular como una flama laminar afectada en su forma por el transporte turbulento. Esta aproximación se denomina “flamelet laminar”. Para números de Damköhler muy altos, una simplificación adicional permite considerar la reacción infinitamente rápida, e ignorar por lo tanto totalmente la tasa cinética de reacción. Entre esta clase de modelos se encuentran los modelos del tipo “lo que se mezcla reacciona” (mixed is burned), incluyendo el popular modelo Eddy Break Up (EBU). El modelo EBU supone que en la reacción química, el factor limitante es la velocidad a la que los reactantes se mezclan a nivel molecular (ayudándonos por la turbulencia). La mayor Parte de las reacciones que liberan energía en la combustión pueden considerarse, en condiciones normales, rápidas.

Capítulo 1

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

Cuando los tiempos característicos de la cinética química y los de las escalas turbulentas se solapan, el uso de funciones de densidad de probabilidad (PDFs) de los escalares termoquímicos puede ser una opción para calcular la tasa media de reacción. Algunas reacciones de formación y destrucción de contaminantes en combustión son notablemente más lentas que las principales reacciones generadoras de calor pero no con $Da_l \ll 1$. La PDF contiene toda la información estadística sobre los escalares que influyen en la reacción, y por lo tanto permite calcular el término de reacción sin ninguna aproximación.

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

Como se mencionó anteriormente, en sistemas con combustión, la cinética química involucra un gran número de reacciones y de especies. Incluir un mecanismo real de cálculos con geometría compleja (por ejemplo, multidimensional) puede requerir una gran cantidad de memoria y tiempo de cálculo, este elevado coste computacional esta asociado no sólo a las dimensiones del sistema (en términos de especies), sino por su “stiffness”, debido a la presencia de escalas temporales muy ligadas a las diversas velocidades de reacción. Por lo tanto, para cálculos prácticos es necesario recurrir a sistemas

Capitulo 1

químicos simplificados (de típicamente un número máximo de especies de 10 a 15), que, reteniendo las características más relevantes del sistema químico real, reduzcan considerablemente el tiempo de cálculo. En esta Tesis se empleará uno de estos modelos y se compararán cualitativamente sus resultados con datos experimentales disponibles.

Incluso con el uso de estos mecanismos reducidos, la resolución real del sistema de ecuaciones diferenciales que proporciona 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 y almacenar de forma eficiente las tasas de reacción en aquellos puntos del espacio termoquímico, que serán previsiblemente accedidos durante la simulación. En esta tesis se utilizarán uno de estos métodos de representación de la química.

Objetivos

El objetivo de la tesis es simular numéricamente la combustión de una llama dentro de un Quemador de Turbina de Gas a Escala de Laboratorio (LSGTC), el cual cuenta con las características principales de un quemador de turbina de gas comercial. El combustible usado en este sistema es metano, y la mezcla aire y combustible tiene una relación de equivalencia de 0.8. Esta mezcla entra al quemador con una velocidad angular, la cual le proporciona un giro a los gases. La llama opera a 1 atmósfera y tiene la ventaja de tener algunos contornos gráficos de temperatura, velocidad y concentraciones de especies químicas, medidas mediante técnicas ópticas, que permitirán validar cualitativamente el modelo numérico.

El modelo numérico es una combinación de un método de volúmenes finitos y de un método de Monte Carlo, que se utiliza para la resolución de una función de densidad de probabilidad conjunta. En esta tesis es usado un modelo de 5 pasos de reacción y 9 especies para representar la cinética química.

Este modelo ha sido usado para simular llamas en 2 dimensiones, por lo que otro de los objetivos importantes de esta Tesis es la aplicación del modelo en llamas tipo LSGTC, las cuales necesariamente son tridimensionales.

Estructura de la tesis

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

Posteriormente, en el capítulo 2, se presentan las ecuaciones instantáneas que gobiernan las condiciones del flujo. Inicialmente se muestran las ecuaciones de continuidad, cantidad de movimiento, energía y la ecuación de la especie química. Posteriormente se presenta la alternativa de ecuaciones promediadas (Reynolds o Favre Averaged Navier- Stokes Equations, RANS), y 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.

En el capítulo 3, modelos de combustión, se aborda el problema de cierre de la ecuación de transporte de la fracción másica asociado a la reacción química, así como algunas de las aproximaciones propuestas para describir la reacción química en el flujo turbulento También se presentan los mecanismos químicos reducidos para la combustión de metano que se utilizan para obtener los resultados mostrados en capítulos posteriores.

El capítulo 4 comienza con la descripción del método de volúmenes finitos, después se presenta el método de Monte Carlo. Finalmente, se trata brevemente el acoplamiento entre ambos módulos.

En el capítulo 5 se describe en detalle el fenómeno de combustión de una llama premezcla pobre en un quemador a escala laboratorio, estabilizado por medio de un giro (swirl), así como de los estudios realizados y los resultados obtenidos, en los cuales se incluyen imágenes de estos, como del aparato experimental.

Para finalizar se encuentran las conclusiones de la tesis, así como algunas recomendaciones para trabajos a futuro en este tema o relacionados.

2

ECUACIONES DE TRANSPORTE

2.1 Introducción

Existen ecuaciones que gobiernan el movimiento de un fluido que reacciona químicamente, las cuales nos permitirán realizar la simulación numérica de una llama turbulenta. En este capítulo se muestran inicialmente las ecuaciones instantáneas que gobiernan las condiciones del flujo, partiendo por la ecuación de continuidad, cantidad de movimiento, energía y por último, la ecuación de la especie química. A continuación se presenta la alternativa de ecuaciones promediadas (Reynolds o Favre Averaged Navier- Stokes Equations, RANS), que tienen exigencias razonables de cómputo en comparación con la DNS.

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 es formulada 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, por simplicidad, en forma cartesiana.

2.2 Continuidad

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

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

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

2.3 Conservación de cantidad de movimiento

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

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

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

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

Donde μ es la viscosidad molecular de la mezcla, μ_v es el coeficiente de viscosidad volumétrico y $\bar{\delta}$ es el tensor delta de Kronecker. El coeficiente de viscosidad volumétrico, μ_v , es nulo para los gases monoatómicos. Por lo general, el coeficiente de viscosidad volumétrico se desprecia [141].

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

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

2.4 Conservación de las especies

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

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

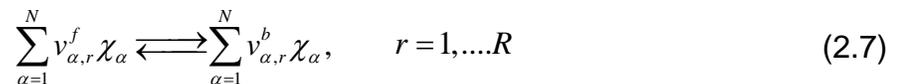
Donde m_α es la masa de la especie y m_T es la masa total de la mezcla (contenida en el mismo volumen). De acuerdo con la definición (5), la suma de todas las fracciones másicas de las especies es uno. $\sum_{\alpha=1}^N Y_\alpha = 1$.

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

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

Donde \bar{J}_α es el flujo difusivo y S_α es la tasa de formación neta de la especie α . Para satisfacer la ecuación de continuidad (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 $U_{\alpha}^o, T_{\alpha}^o$ 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:

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

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, $Ec = \bar{v}_o^2 / C_p T_o$, es un indicador de la contribución de la disipación de la energía cinética al nivel total de la entalpía. Cuando, como es el caso de los fluidos estudiados en esta Tesis, $Ec \ll 1$, el término Φ_v se puede despreciar.

El término \bar{J}_h se presenta más adelante.

El intercambio de energía por radiación (\dot{Q}_r), puede ser importante en flujos con combustión cuando las temperaturas son altas. 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 suplementadas con ecuaciones de estado que relacionen la presión, la densidad y la temperatura, y por expresiones para los flujos difusivos.

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

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

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 $C_{p_{\alpha}}$ 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 (\bar{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 (\bar{J}_{α}) se expresa según la ley de Fick, que se escribe como [141]:

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

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:

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

Donde D_α^M es el coeficiente de difusión medio de la especie α en la mezcla de especies. El coeficiente D_α^M se puede calcular a partir del coeficiente de difusión binario, $D_{\alpha\beta}$:

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

El flujo difusivo de calor, \bar{J}_h se produce por conducción de calor, por el efecto Dufour y por el flujo difusivo de la especie. Estos dos últimos efectos son usualmente despreciables en flujos con combustión ([141] y [145]); por lo tanto el término (\bar{J}_h) se expresa con la ley de Fourier:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

El número de Prandtl, Pr , Se define como:

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

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

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

2.7 Ecuación diferencial homogénea y fracción de mezcla

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

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

El número de Lewis Le , se define como:

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

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

Esta hipótesis de igual difusividad de las especies no suele ser apropiada en flujo laminar para especies ligeras, como H y H_2 , cuya menor masa les confiere una mayor difusividad. En flujo turbulento, como se presenta más adelante, el término de difusividad molecular es frecuentemente despreciable si se compara con el de transporte turbulento $\overline{v''\phi''_\alpha}$. Este flujo turbulento frecuentemente se modela como un término de difusión turbulenta con igual coeficiente de difusión para las especies y la entalpía (expresión (2.75)), por lo que la hipótesis de igual difusividad esta justificada.

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

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

Donde ϕ_z es la especie inerte o la entalpía. A la ecuación (2.37) se le denomina ecuación “homogénea”, por no tener término fuente (S_α). En las hipótesis enunciadas anteriormente para la ecuación de la entalpía, ésta no tiene términos fuente; por lo tanto en la hipótesis del número de Lewis unitario, la entalpía también responde a la ecuación diferencial homogénea (2.37).

Es posible también combinar linealmente las fracciones másicas de las especies reactivas, convenientemente pesadas con los coeficientes estequiométricos en las distintas reacciones, de forma que el término fuente de la ecuación para la variable resultante es nulo. La ecuación (2.37) por lo tanto también representa estas combinaciones resultantes, que se denominan frecuentemente funciones de acoplamiento [145].

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

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

Donde los subíndices 1 y 2 indican las dos entradas. El cociente de la expresión (2.38) se denomina fracción de mezcla (f), y por estar normalizada con las condiciones de contorno, varía entre 0 (en una entrada) y 1 (en la otra). En cualquier punto del dominio, f indica la fracción del material local que procede de la entrada 1, y (1-f) la que procede de la entrada 2, independientemente del estado de reacción del fluido local. La fracción de mezcla (2.38) también responde a la ecuación diferencial (2.37), al ser una combinación lineal de soluciones de esa ecuación.

2.8 Promediado de las ecuaciones

El flujo en los sistemas analizados en esta Tesis, como en la mayoría 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 promediado. Uno es el promediado 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 representará 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 promediados $\bar{\Phi}$ y $\tilde{\Phi}$ están definidos como:

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

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

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 promediados 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 promediado 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 promediado de Favre a las ecuaciones instantáneas de continuidad, cantidad de movimiento, energía y especies químicas, se obtiene [141]:

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

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

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

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

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

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

Las ecuaciones anteriores tienen una forma idéntica a las correspondientes ecuaciones instantáneas, con un término adicional $\overline{u_i'' \Phi''}$, que involucra las fluctuaciones de la velocidad y el escalar Φ , y que representa físicamente el transporte convectivo de Φ por movimientos turbulentos. En flujos turbulentos, el término (I) de las ecuaciones anteriores es generalmente despreciable frente al término (II). Por lo tanto, las ecuaciones (2.48), (2.49), (2.50), (2.51) y (2.52) se escriben como:

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

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

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

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

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

Si el flujo es de baja velocidad ($Ma \ll 1$) generalmente se supone que las fluctuaciones de la presión son despreciables [63]. Por lo tanto, los valores medios de la densidad y la tasa de reacción química se pueden expresar como función de una presión de referencia p_o :

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

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

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

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

El tratamiento del término $\overline{\rho v'' \phi_\alpha''}$, 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:

$$(2.60)$$

$$\begin{aligned}\bar{S}_\alpha &= S_\alpha(\bar{T}, \bar{\rho}, \bar{\phi}_1, \dots, \bar{\phi}_N) \\ \bar{\rho} &= \rho(\bar{T}, \bar{\phi}_1, \dots, \bar{\phi}_N)\end{aligned}\quad (2.61)$$

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

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

2.9 Función de densidad de probabilidad conjunta.

La función de densidad de probabilidad (Figura 2-1), $P(\underline{\psi}; \underline{x}, t)$, se define como la densidad de probabilidad del evento $\underline{\phi}(\underline{x}, t) = \underline{\psi}$ 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 $\underline{\phi}$.

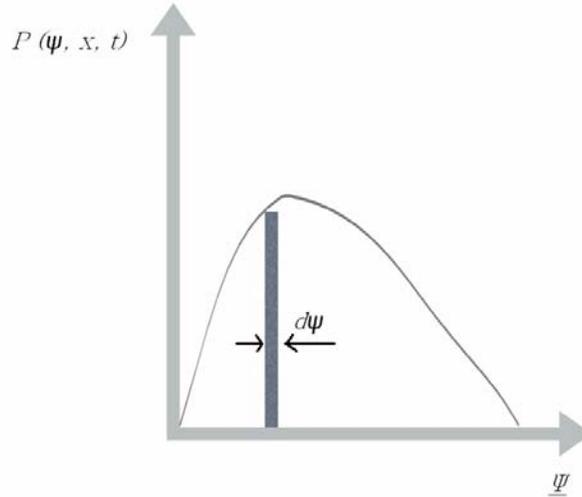


Figura 2.1. Función de densidad de probabilidad en una posición x del dominio y en un tiempo t .

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

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

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

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

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

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

Con esta propiedad, cantidades medias de la tasa de reacción o la densidad pueden ser obtenidas como:

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

Para evaluar la media de la tasa de reacción química y densidad hace falta conocer la forma de la 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 será 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

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

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

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 $P'(\underline{\psi})$ 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:

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

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

Los términos del lado izquierdo de la ecuación (2.71) representan: el transporte en el tiempo de $P(\underline{\psi})$ (a), el transporte en el espacio físico por convección (b), el transporte en el espacio de composición por reacción química (c). El término (d) de la parte derecha representa el transporte en el espacio de composición por flujos difusivos (llamado también término de mezcla molecular). El término de reacción química, (c), está cerrado y por ello no necesita modelización, lo cual es una de las ventajas del método. La ecuación (2.71), igualmente puede ser deducida a partir de la integración de la PDF conjunta de composición-velocidad, $P(\underline{V}, \phi)$, 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-expresar como:

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

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):

$$\frac{\partial}{\partial t} [\bar{\rho} \tilde{P}(\underline{\psi})] + \nabla \cdot [\bar{\rho} \tilde{\mathbf{v}} \tilde{P}(\underline{\psi})] = - \underbrace{\frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} [S_\alpha \tilde{P}(\underline{\psi})]}_{(i)} - \underbrace{\nabla \cdot [\bar{\rho} \langle \tilde{v}^n | \underline{\phi} = \underline{\psi} \rangle \tilde{P}(\underline{\psi})]}_{(ii)} - \underbrace{\frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} [\langle \nabla \cdot \bar{\mathbf{J}}_{\phi_\alpha} | \underline{\phi} = \underline{\psi} \rangle \tilde{P}(\underline{\psi})]}_{(iii)} \quad (2.74)$$

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

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

$$- \nabla \cdot [\bar{\rho} \langle \tilde{v}^n | \underline{\phi} = \underline{\psi} \rangle \tilde{P}(\underline{\psi})] = \nabla \cdot [\bar{\rho} \Gamma_{T,\phi} \nabla \tilde{P}(\underline{\psi})] \quad (2.75)$$

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

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

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

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:

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

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

La solución de la ecuación de transporte de la 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, que se usará en esta Tesis, será 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.

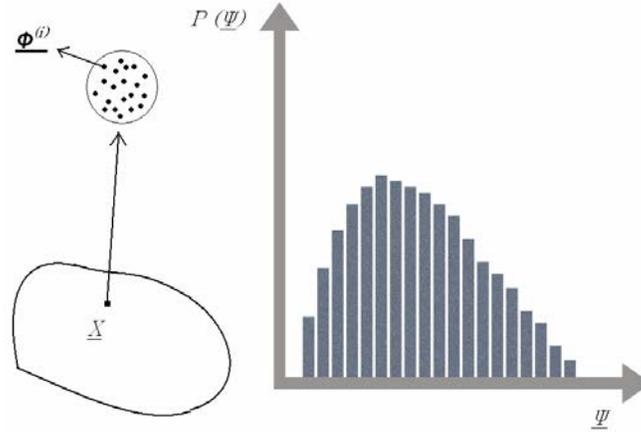


Figura 2.2. Representación discreta de la función densidad de probabilidad en una posición x del dominio y en un tiempo t .

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

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

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

2.10.2 Modelos de mezcla

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

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

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

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

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

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

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

Lo que persigue el modelo de mezcla en estas circunstancias es reproducir la evolución de la 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 realizabilidad [121].

Información más detallada sobre los modelos de mezcla se puede consultar, 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:

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

Donde H es la probabilidad de transición:

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

demás

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

Para una representación discreta de la 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]:

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

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 para obtener los resultados mostrados en capítulos posteriores. A continuación, se exponen algunos métodos para representar la química. En la última parte del capítulo se presenta el modelo de radiación con el que se 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 modelización 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:

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

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_l). El número de Damköhler es el ratio entre estos tiempos: $Da_l = t_l / t_q$. La hipótesis de química rápida implica que $t_q \ll t_l$ o $Da_l \gg 1$ y la de química lenta $t_q \gg t_l$, $Da_l \ll 1$.

Si se supone que la cinética química es infinitamente rápida ($Da_l \gg 1$), se puede considerar que la reacción ocurre en una capa delgada, que es conveccionada, alabeada, y estirada o comprimida por la turbulencia, pero cuya estructura interna no es afectada por ella. Este tipo de 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 serán discutidos en más detalle posteriormente en este capítulo.

En el otro extremo del rango de números de Damköhler ($Da_l \ll 1$) se supone que la mezcla tiene lugar de forma mucho más rápida que la reacción química, y que por tanto se puede considerar al fluido como perfectamente mezclado a nivel molecular cuando la reacción química tiene lugar. La tasa de

reacción media se puede entonces aproximar con valores medios de los escalares termoquímicos:

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

Por esta razón, esta reacción química se denomina a menudo "pseudo-laminar". En combustión, las principales reacciones liberadoras de calor son demasiado rápidas para que esta aproximación sea válida ([128] y [106]).

En la formación de contaminantes como el *CO* y *NO*, los tiempos característicos de la cinética química y de la escala integral de la turbulencia son aproximadamente del mismo orden. Por lo tanto, ninguna de las aproximaciones anteriores son válidas en el estudio de estas especies químicas. En estas circunstancias, el uso de una función de densidad de probabilidad (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 presentó la primera aproximación. La segunda alternativa se presenta brevemente en este capítulo.

En sistemas con combustión, la cinética química involucra un gran número de reacciones y de especies. Por ejemplo, en la combustión del metano y aire, el mecanismo químico real, tiene unas 279 reacciones y unas 49 especies si se incluye la formación de *NO_x*. En cálculos con geometría compleja, el uso de un

mecanismo de este tamaño es inviable por su gran coste computacional. Este coste 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 modelización, es frecuente clasificar las configuraciones con reacción química de acuerdo al estado de los reactantes cuando entran a la zona donde la reacción tiene lugar: de difusión, si los reactantes están segregados 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 será revisada con un poco de más detalle. Además del estado de los reactantes, un segundo aspecto que caracteriza un sistema con reacción química es el tipo de flujo: laminar o turbulento.

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

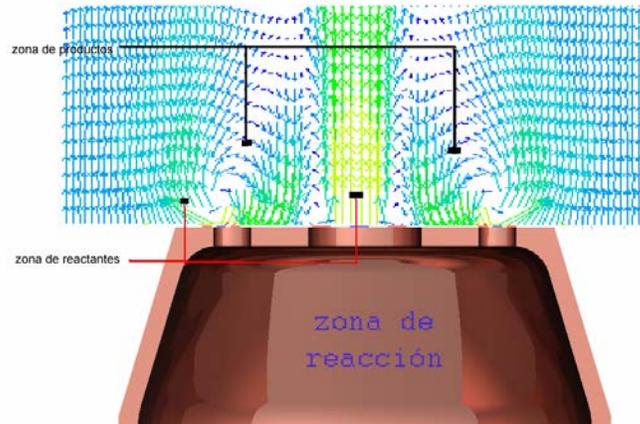


Figura 3.1. Representación esquemática de una llama premezclada.

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

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

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

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

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

En el diagrama (Figura 3-2), las líneas de 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:

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

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:

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

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:

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

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

A las zonas de llama laminar y de mezcla perfecta, les corresponden $\text{Re}_T < 1$ y $\text{Da}_I < 1$ 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" está caracterizada por $\text{Re}_T \gg 1$ (régimen turbulento), $\text{Da}_I \gg 1$ (química rápida), y $\text{Ka} < 1$ (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 $\text{Ka} = 1$, que es la frontera con la zona de reacción distribuida o de llama gruesa, el espesor de la zona de reacción es del orden de la escala de Kolmogorov.

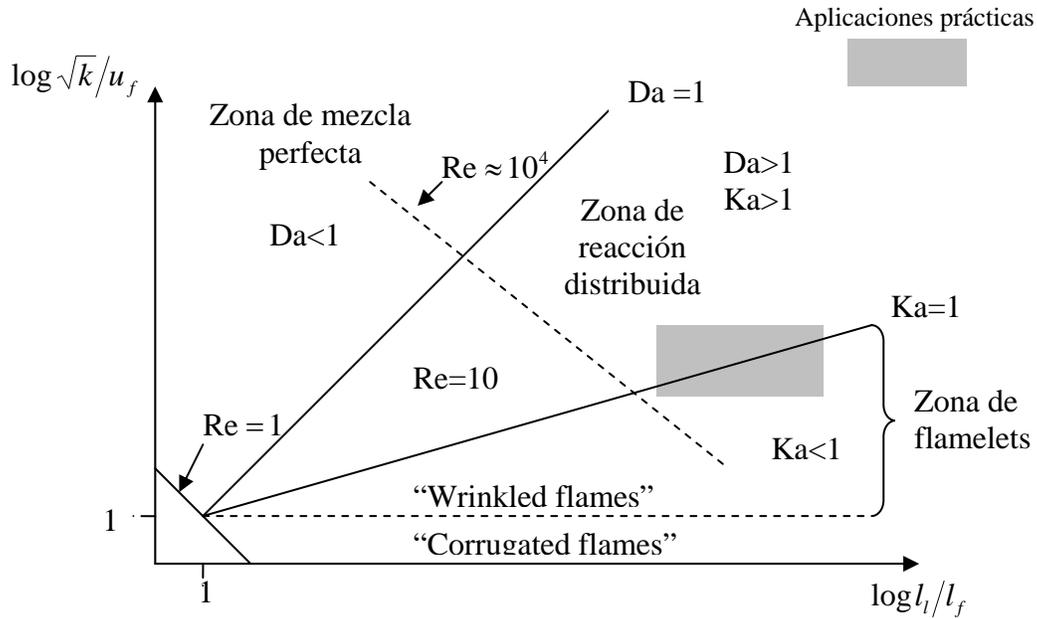


Figura 3.2. Diagrama de Borghi.

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

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

3.3 Modelo Eddy Break Up

En llamas premezcladas con química rápida, el término de reacción química, \bar{S}_α , se modela frecuentemente mediante el modelo llamado de "Eddy Break-Up" (EBU). Este modelo, propuesto inicialmente por Spalding ([130], [132]) y después modificado por varios autores, supone que el factor limitante en la tasa de reacción química no es la velocidad cinética, sino la velocidad a la que los reactantes se mezclan a nivel molecular. Esta velocidad de mezcla se puede

representar mediante un término proporcional a la velocidad de disipación de las fluctuaciones del escalar, a menudo modelada como:

$$\overline{S_c} = -C_{EBU} \bar{\rho} \frac{\bar{\varepsilon}}{\bar{\kappa}} \sqrt{\overline{Y_c''^2}} \quad (3.8)$$

Donde C_{EBU} es una constante y $\overline{Y_c''^2}$ es la varianza de Favre de la fracción másica del combustible.

Para escalares pasivos, esta varianza puede modelarse mediante una ecuación de transporte; para escalares reactivos, el término de reacción química da lugar a correlaciones no cerradas, difíciles de modelar y que en combustión turbulenta pueden ser importantes.

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:

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

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):

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

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

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

Algunas formas para la 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 las colas asociadas a intervalos no físicos del escalar (por debajo de cero y por encima de 1, en la figura) [63]:

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

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

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

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

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

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:

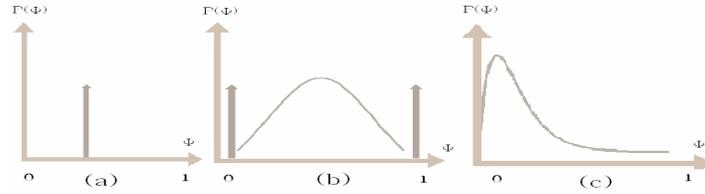


Figura 3.3. Formas para la PDF: (a) Delta de Dirac, (b) Gaussiana truncada y (c) beta

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 flamelet.

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 ($Da_t \gg 1$) y la tasa de consumo

del combustible (masa de combustible quemado por unidad de tiempo y por unidad de volumen) se expresa como:

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

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.

Estimaciones de U_F se pueden encontrar 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 modelización; algunos modelos son presentados por Duclos et al [44].

3.6 Mecanismos reducidos.

La combustión de incluso 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_x [13]. El conjunto de estas reacciones reales y especies que participan en el sistema químico se conoce como mecanismo detallado de la reacción.

La inclusión de un mecanismo detallado en cálculos de geometrías multidimensionales requiere una gran cantidad de memoria y tiempo de cálculo [121]. Estos requerimientos computacionales se deben no sólo a la dimensionalidad del sistema (en términos de especies), sino a su "stiffness", 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 "stiffness" del sistema), es práctica habitual reducir el sistema químico detallado a un número tratable de especies y ecuaciones. El mecanismo resultante se denomina "mecanismo reducido".

Este mecanismo reducido debe ser suficientemente detallado para predecir de forma correcta los fenómenos de interés al ser aplicado en una simulación. En aplicaciones que requieren simulaciones multidimensionales, las limitaciones de cálculo obligan a que el número máximo de especies que conforman estos mecanismos sea actualmente del orden de 10. Este número es, en general, suficiente para predecir las características fundamentales de la llama, tales como especies mayoritarias, temperatura o velocidad de liberación de calor; pero puede ser insuficiente para la predicción precisa de especies intermedias, ciertos contaminantes o la ignición o extinción.

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

Los mecanismos sistemáticamente reducidos se obtienen generalmente al aplicar a los llamados mecanismos "skeletal" las hipótesis de estado estacionario para algunas especies y de equilibrio parcial para reacciones particulares [53]. Los mecanismos "skeletal" se deducen a partir de un análisis del sistema completo, que

identifica la importancia de las especies y reacciones en el proceso de combustión. Las reacciones que no contribuyen de forma importante en la reacción se eliminan del mecanismo detallado, el resultado es el sistema químico "skeletal". El resultado de esta reducción sistemática no es sólo un sistema de ecuaciones más sencillo (por la eliminación de especies), sino también un sistema menos "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 modelización (por ejemplo, que esté presente determinada especie), o un análisis sistemático para identificar qué especies y reacciones son eliminadas. Los parámetros cinéticos asociados a las distintas reacciones del mecanismo propuesto son ajustados de forma que el mecanismo reducido reproduzca algunos de los comportamientos fundamentales del sistema original, como por ejemplo la velocidad de propagación del frente de reacción.

Otra aproximación que se ha desarrollado recientemente para simplificar la cinética química es el llamado método de colectores intrínsecos de baja dimensión o "Intrinsic Low Dimensional Manifolds" (ILDM) ([89] [150]). El ILDM se basa en que las reacciones más rápidas conducen rápidamente los estados de composición a superficies en el espacio de composición. La cinética química se simplifica con la suposición de que estos puntos de composición se moverán (reaccionando) a lo largo de esta superficie de baja dimensión hacia el equilibrio químico, mientras que la reacción química será despreciable fuera de ella. Con esta aproximación no se requiere un conocimiento previo de las especies que se situarán en estado estacionario, o de las reacciones que se supondrán en equilibrio parcial; solamente es necesario suponer la dimensión de este espacio químico que configura el colector

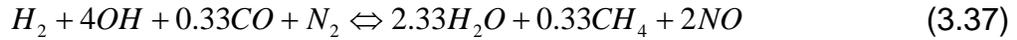
o superficie. La superficie se identifica mediante un análisis de autovectores de las ecuaciones que gobiernan la cinética química. Este método ha sido aplicado con resultados aceptables tanto en llamas laminares como turbulentas ([88], [90], [107]). A continuación se presentan los mecanismos reducidos de cinco, siete y nueve pasos de reacción para el metano.

3.7 Mecanismos químicos para el metano.

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: Zeldovrch, Prompt y N_2O . Estas rutas están descritas en más detalle en el apéndice C.

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

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

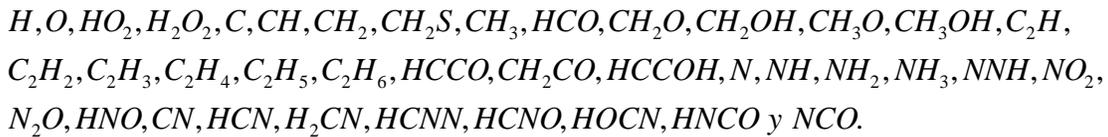
$$\begin{aligned} \omega_{R2} = & +\omega_2 + \omega_{11} - \omega_{14} + \omega_{15} + \omega_{18} + \omega_{19} + \omega_{22} + \omega_{23} + \omega_{25} + \omega_{27} + \omega_{32} \\ & + \omega_{33} + \omega_{34} + \omega_{35} + \omega_{36} + \omega_{37} + \omega_{38} + \omega_{39} + \omega_{40}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

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

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

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

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



3.8 Método de representación de la química

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

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

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 acceder durante la simulación. Así, durante la simulación del flujo, los cambios en las especies serán obtenidos de la tabla por interpolación multidimensional [61].

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

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

Átomos de C

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

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 va a simular 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.

3.8.2 Redes neuronales artificiales

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

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

$$y_i = \sum_{j=1}^n w_{ij} x_j \frac{1}{1 - e^{-x_j}} \quad (3.56)$$

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

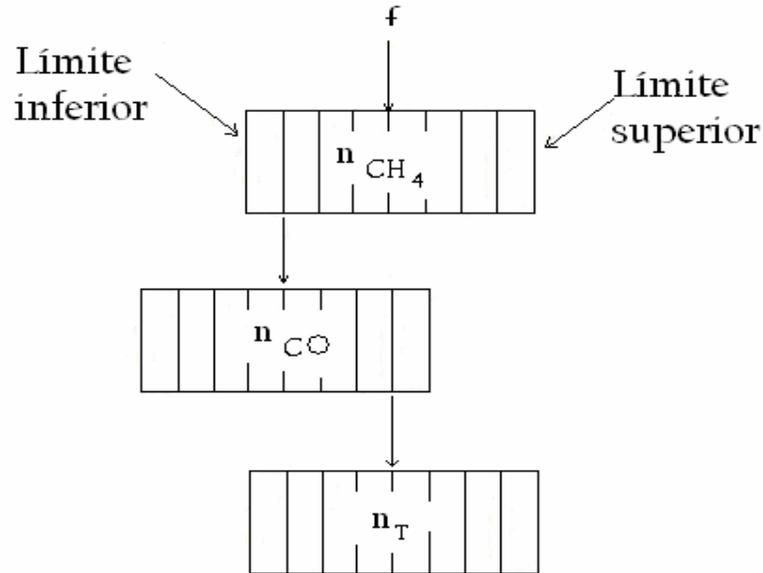


Figura 3.4 Estructura esquemática de la tabla que representa el sistema químico de cuatro pasos de reacción del metano.

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

Los pesos w_{ij} de ecuación (3.56) se ajustan a través de un proceso iterativo llamado fase de entrenamiento, en la cual un conjunto de ejemplos son presentados a la RNA. Después de esta fase de aprendizaje, la RNA puede ser usada para simular un proceso deseado, en este caso la evolución del sistema químico.

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

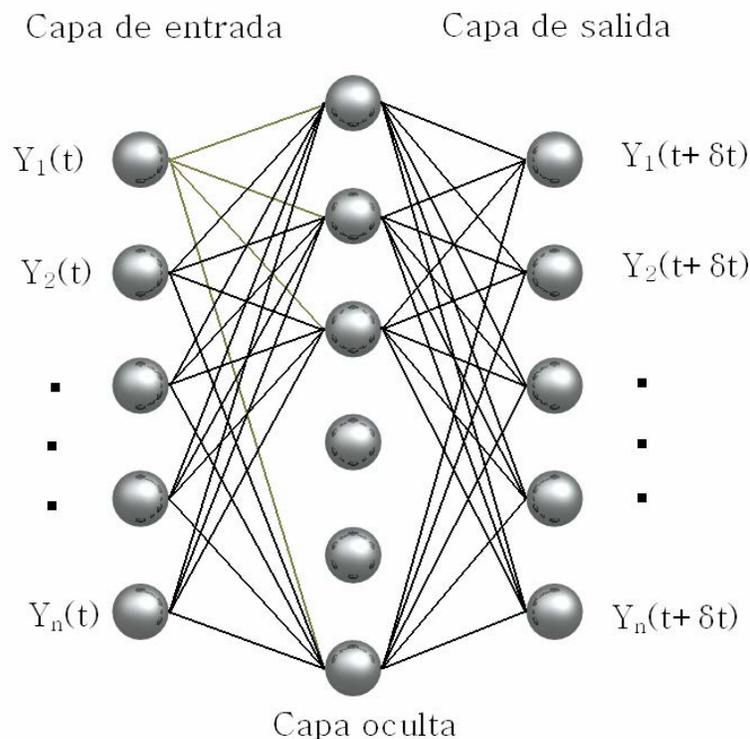


Figura 3.5 Estructura esquemática de las redes neuronales artificiales.

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

3.8.3 Tabulación *in-situ* estructurada

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

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

El espacio de composición se discretiza en celdas, cuyos vértices están definidos por los componentes de un estado termoquímico arbitrario. En el caso de que se requiera conocer el incremento de la reacción en alguna parte del dominio por vez primera, se integra el sistema de ecuaciones químico (3.44) y se almacena su valor en la tabla de composición. Cuando en la simulación se requiera posteriormente de nuevo el valor de las tasas de reacción para esa composición, en lugar de integrar el sistema de ecuaciones de la química, se accede a la tabla. En la figura 3.6 se ilustra esquemáticamente la representación del dominio mediante celdas, en las que se almacena un valor accedido durante el cálculo.

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

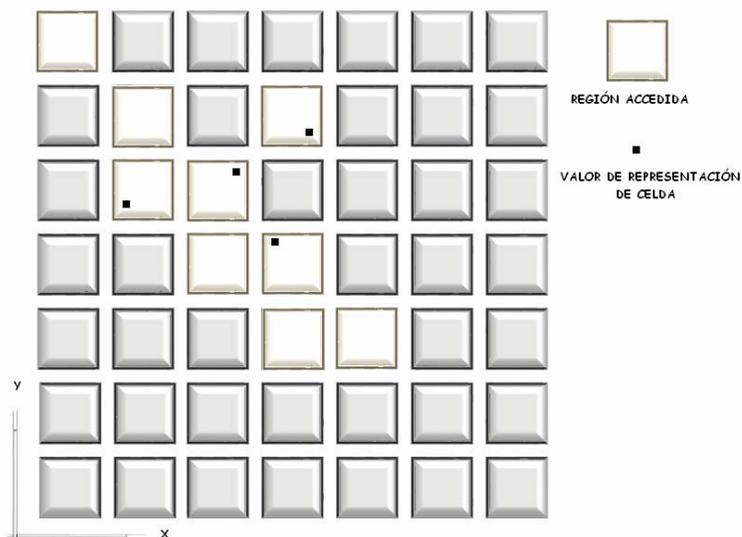


Figura 3.6. Representación esquemática de la discretización (bidimensional) del espacio de composición.

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

3.9 Modelo de radiación

Las temperaturas alcanzadas en sistemas de combustión premezclada pobre son considerablemente más bajas que las alcanzadas en sistemas de combustión convencionales. Sin embargo, son suficientemente altas para que la transferencia de calor por radiación pueda ser significativa.

Para estudiar el efecto en los resultados de las pérdidas de energía por radiación, particularmente en la formación de contaminantes como el CO y NO , se incluye en la simulación un modelo sencillo de radiación, que se describe en esta sección.

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

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

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

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

4.1 Introducción

El objetivo de este capítulo es presentar el método de solución de las ecuaciones que componen el modelo del flujo reactivo, presentadas en el capítulo 2.

La ecuación de transporte de la función de densidad de probabilidad (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 continuidad, cantidad de movimiento y estadísticas de la turbulencia. Este sistema híbrido, consta así, de dos módulos,

relacionados pero también diferenciados: uno que proporciona la aerodinámica del flujo y otro que resuelve la termoquímica.

Este capítulo comienza con la descripción del método de volúmenes finitos, que se utiliza para resolver las ecuaciones que caracterizan la aerodinámica del flujo medio. Después se presenta el método de Monte Carlo, con el cual se resuelve la ecuación de transporte de la 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 somero resumen, con el objetivo, fundamental, de servir de base para introducir más adelante la forma en la que el método de Monte Carlo se integra al cálculo.

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

En la figura 4.2 se muestra la notación de la celda y de sus vecinas. Dada una celda P , sus vecinas se notarán según las iniciales de los puntos cardinales (en inglés) en las direcciones “ x ” e “ y ” y como Low y High en la dirección z . Las caras de la celda se notan con la misma nomenclatura, pero con letras minúsculas. El tiempo también se discretiza. Las celdas en la dirección temporal se llaman intervalos temporales. La celda P en el paso temporal se nota como T .

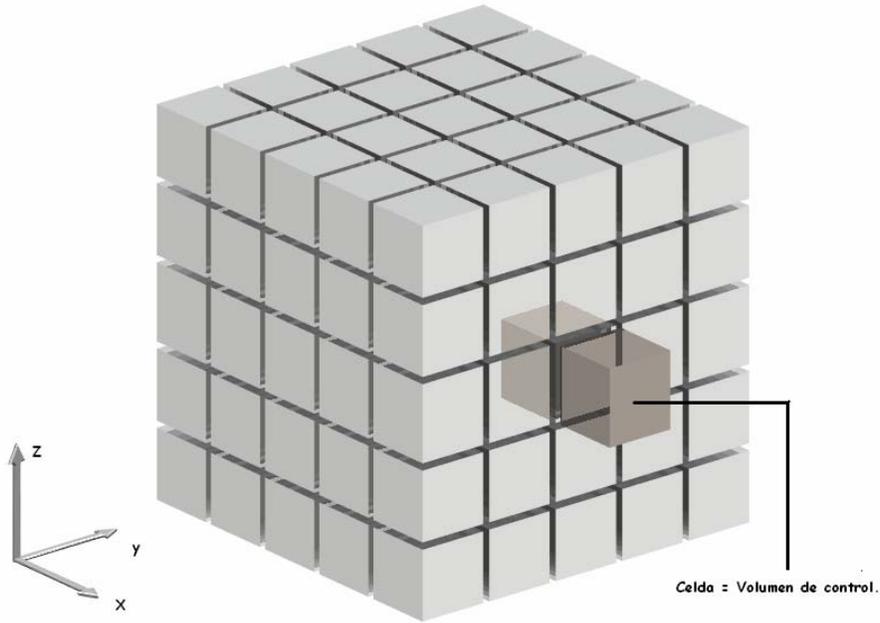


Figura 4.1 Representación del sistema discretizado en volúmenes finitos.

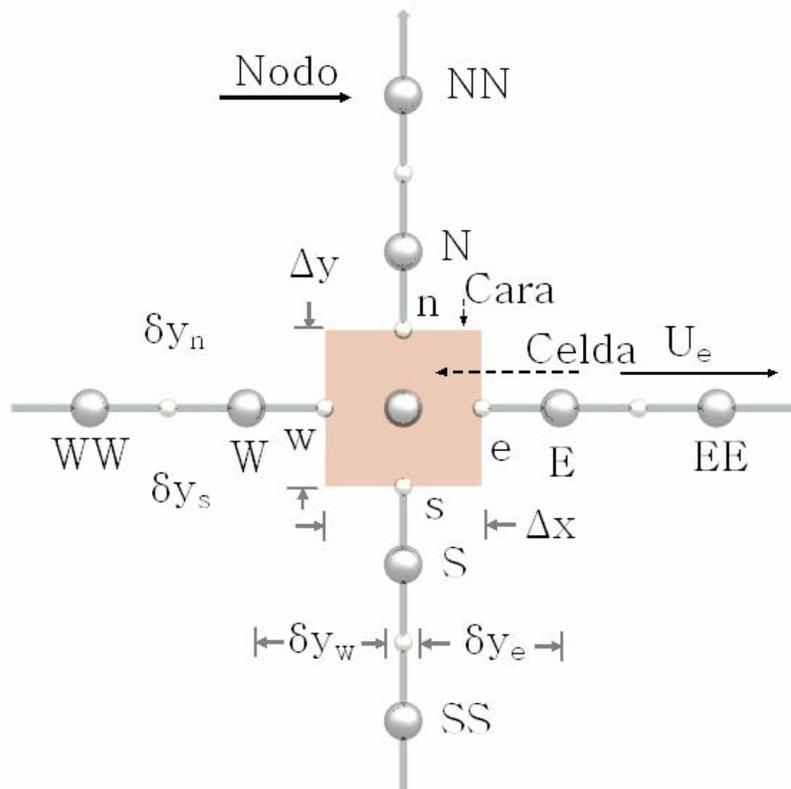


Figura 4.2 Diagrama esquemático de un volumen de control bidimensional

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

Definiendo los símbolos F , D , y Pe como:

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

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:

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

Donde Δ_i es la longitud de la cara i .

Para determinar F_i se necesita conocer $\bar{\rho}$ y \bar{v}_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, $\bar{\phi}$, en la cara de la celda. La velocidad \bar{v}_i está calculada en la cara si la malla es decalada; pero $\bar{\rho}$ y $\bar{\phi}$ 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 continuidad en una ecuación para la presión.

Entre los algoritmos iterativos que se basan en este procedimiento están los de la familia SIMPLE (Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations) ([111], [110] y [133]). El algoritmo utilizado en esta Tesis para resolver el problema de acoplamiento velocidad-presión pertenece a esta familia.

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

Para procurar o acelerar esta convergencia se utiliza un método de relajación de algunas de las variables dependientes y propiedades. Se emplean dos tipos de relajación: la inercial y la lineal. La relajación inercial se emplea para las velocidades y los parámetros de turbulencia, y aumenta la 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 Monte 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:

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

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 aplicarán de forma secuencial al conjunto de partículas utilizando una técnica de pasos fraccionados [121].

A continuación, se presenta el método de Monte Carlo.

4.3.1 Discretización de la ecuación de la PDF

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

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

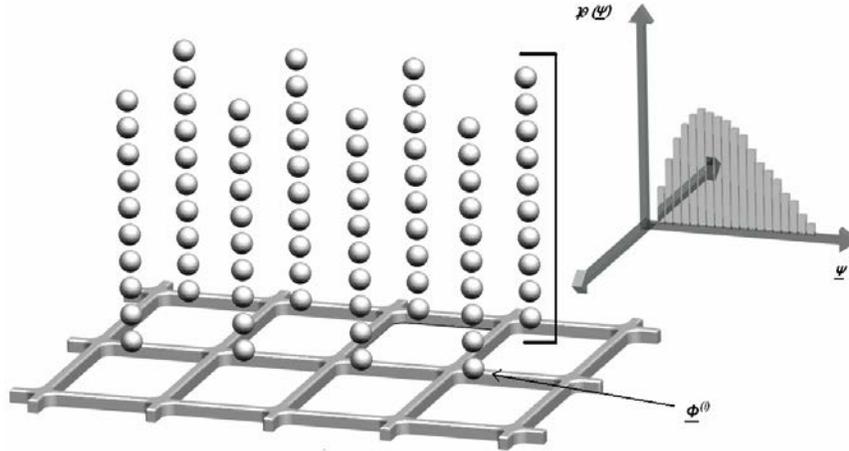


Figura 4.3 Representación esquemática de las partículas en la malla de volúmenes finitos.

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:

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

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 definen previamente los operadores identidad, transporte, reacción y mezcla como sigue:

- Identidad, $\underline{\tau}$:

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

- Transporte en cada dirección $x, y, y z, \tau_x$:

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

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

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

➤ 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:

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

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

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

Donde \tilde{P}_{T,τ_i} y $\tilde{P}_{T,S}$ son las funciones de densidad de probabilidad (en la celda P) después de aplicar los operadores 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; una justificación rigurosa de que las reglas enunciadas simulan en verdad el comportamiento de la PDF puede encontrarse en [119].

4.3.4 Paso fraccionado de transporte

El paso fraccionado de transporte simula el efecto de los términos de convección y difusión de la ecuación (4.16) en la 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 (nocial) intermedio entre t y $t + \Delta t$.

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

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

Como la 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.

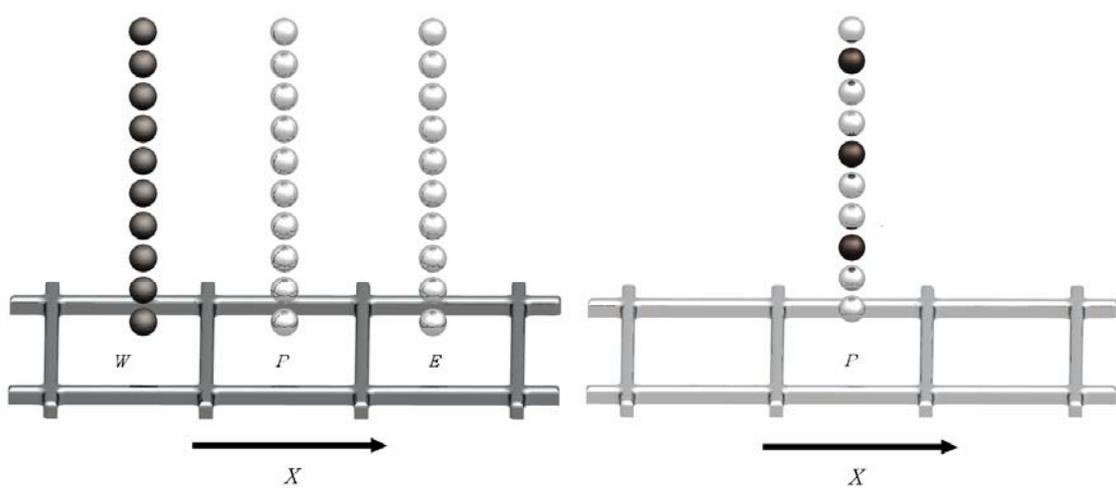
La selección de las partículas reemplazadas es aleatoria, y el reemplazamiento es sin reposición. Las partículas de los nodos adyacentes, de los cuales se obtienen los valores de reemplazo, se seleccionan también de forma aleatoria. El efecto en la PDF en la celda P del proceso de transporte en la dirección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

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

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

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



Antes del paso fraccionado Después del paso fraccionado

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

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

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

Un detalle menor, pero importante, de la implementación, es el marcado de las partículas intercambiadas para evitar que en un mismo paso fraccionado la partícula viaje más de una celda en una dirección. Puesto que la selección de aleatoria de partículas puede ser computacionalmente cara cuando en una celda quedan pocas partículas sin marcar, el procedimiento utilizado en la presente Tesis es inicialmente determinista, introduciendo la aleatoriedad mediante la remoción de la 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 denominará "remoción", y que se describe brevemente a continuación.

4.3.5 Proceso de remoción

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

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

4.3.6 Paso fraccionado de mezcla

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

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

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

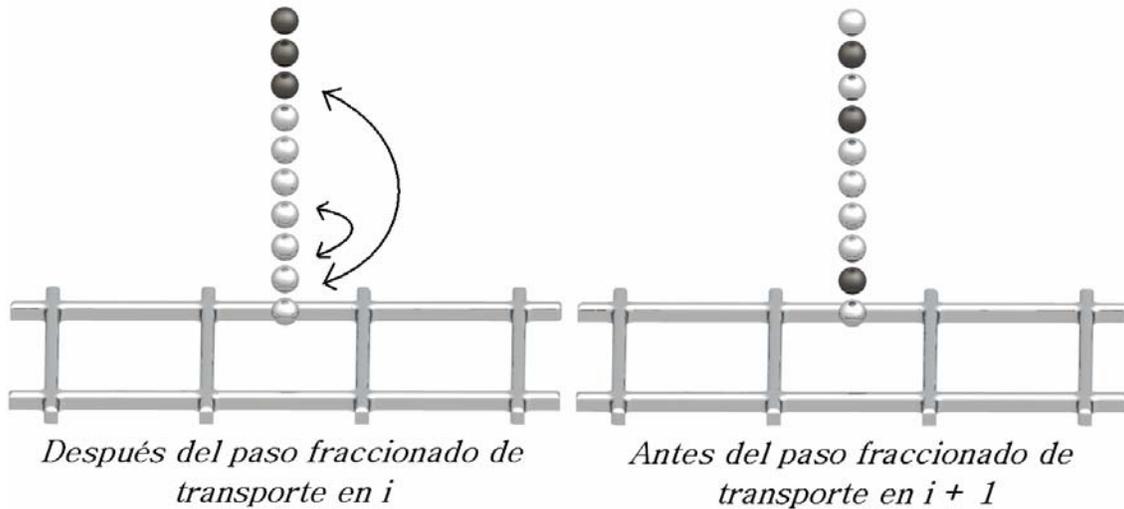


Figura 4.5 Representación del proceso de agitación en la celda P .

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:

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

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

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:

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

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

Las partículas que no se mezclan permanecen sin cambio.

4.3.7 Paso fraccionado de reacción química

El paso fraccionado de reacción química es:

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

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

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

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

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

4.4 Acoplamiento de los métodos de volúmenes finitos y Monte Carlo

En esta sección se trata el acoplamiento entre los métodos de Monte Carlo y de volúmenes finitos. Puesto que el método de Monte Carlo para resolver la ecuación de transporte de la 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_i y a_T de la ecuación en volúmenes finitos, que se usan para calcular el paso fraccionado de transporte en las direcciones x , y y z (ecuaciones (4.20), (4.21) y (4.22)).
- Los valores de \tilde{k} y ε que se usan en los modelos de mezcla LMSE (ecuación (4.35)) y Curl modificado (ecuaciones (4.36)) y (4.37)).

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

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

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

En la figura 4.6 se presenta esquemáticamente la interacción entre los método 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 aerodinámica se recalculan en el método de volúmenes finitos.

Este proceso se repite hasta alcanzar el estado estacionario.

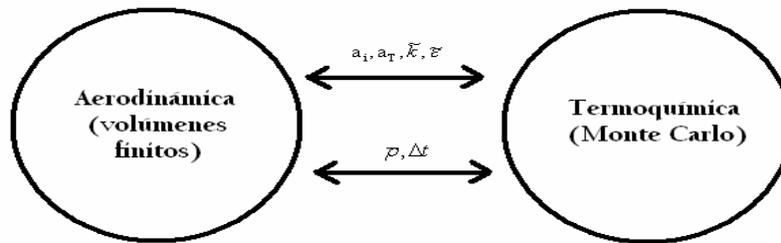


Figura 4.6 Representación esquemática del acoplamiento entre los métodos de volúmenes finitos y de Monte Carlo.

5

Predicción de una llama premezclada de metano y aire

5.1 Introducción

En este capítulo se presentan las predicciones de la simulación de una llama de metano-aire [100] con el modelo estocástico descrito en el capítulo 4. Esta llama es premezclada y la mezcla metano y aire es pobre, siendo la relación de equivalencia de 0.8. La llama está confinada, y se estabiliza mediante un sistema de alabes fijos que lo hacen girar. El número de Reynolds de flujo, Re , es 61662 (basado en el diámetro del obstáculo estabilizador y en la velocidad de inyección del fluido), y por lo tanto el flujo es turbulento.

El capítulo comienza con la representación del aparato experimental, configuración experimental y detalles numéricos que se utilizan para simular esta llama. A continuación, se muestran algunos resultados calculados que muestran la configuración general de la llama, y comparaciones con datos experimentales de la velocidad y la temperatura. En general, los resultados obtenidos muestran un comportamiento similar para la velocidad.

5.2 Configuración Experimental

La representación esquemática de la configuración experimental del quemador se muestra en la figura 5.1 (a). De arriba hacia abajo, primero se tiene la cámara de combustión (b) que tiene una longitud de 490 [mm], es de metal y tiene un acceso óptico (ventana de cuarzo) para visualizar la llama y hacer mediciones ópticas de las características casi axisimétricas del quemador.

Dentro del quemador, se tiene el inyector de premezcla pobre (c) con un diámetro de 36 [mm], el cual se localiza en el centro del quemador y se muestra esquemáticamente en la figura 5.2.

Este dispositivo le va a producir el giro a la mezcla de aire y combustible, por lo que más adelante se presentará con un mayor detalle este inyector.

A continuando se localiza el tubo aire-combustible con una longitud de 840 [mm], que como su nombre lo dice es el medio por donde se suministra el aire-combustible al inyector. En el exterior del quemador se tiene el soporte principal de una longitud de 980 [mm], el cual sostiene toda la estructura, desde la cámara de combustión, el inyector de premezcla, hasta el tubo de aire combustible. Por último, donde se suministra el aire-combustible al sistema, se tiene la entrada de aire-combustible. Mediante un sistema anexo y con la longitud de esta entrada, se asegura que la mezcla aire combustible está bien mezclada.

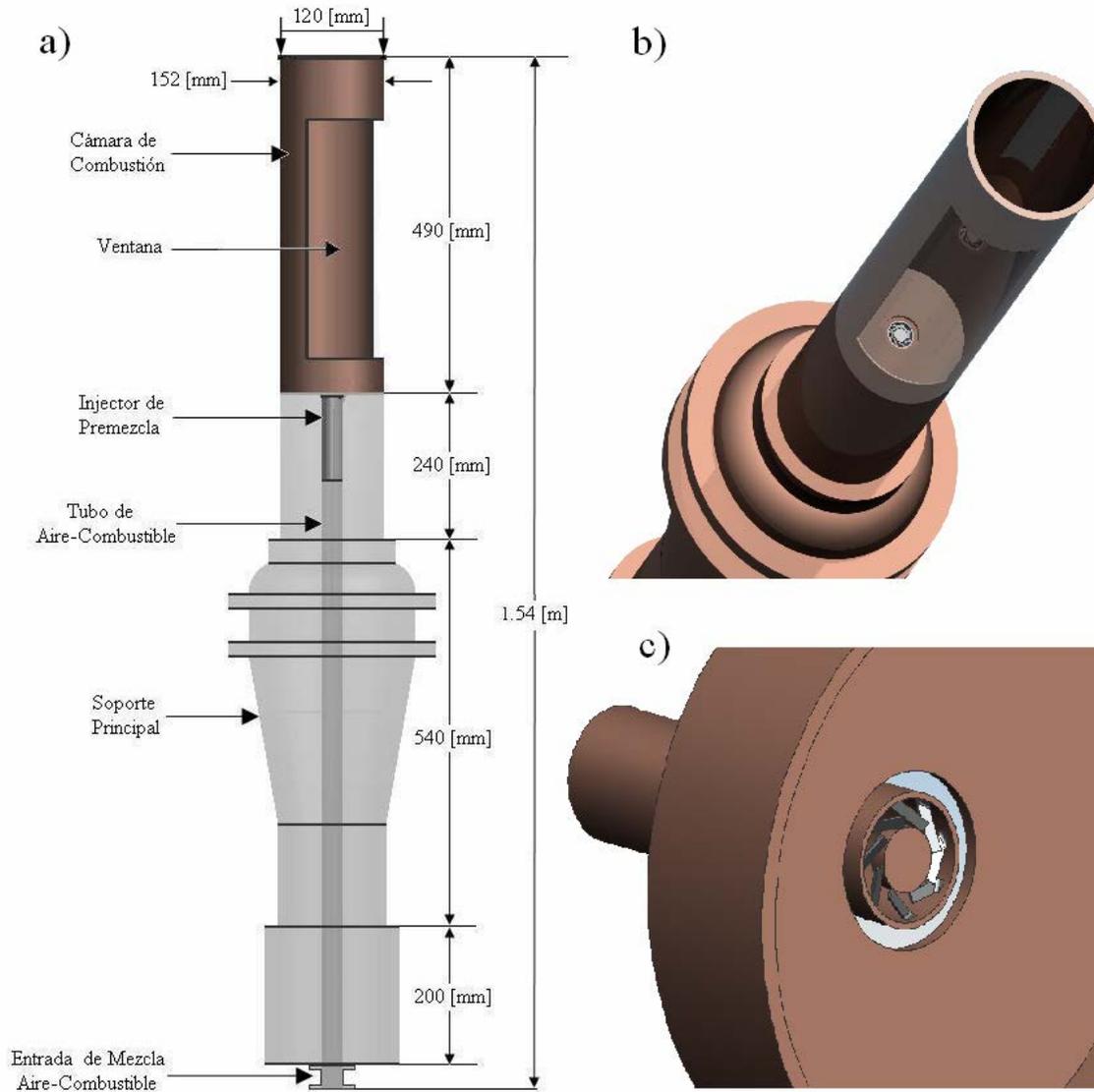


Figura 5.1 Quemado de premezcla pobre. (a) Representación en una dimensión del quemador a escala de premezcla pobre, (b) Cámara de combustión en tres dimensiones, (c) Configuración de alabes en el quemador.

Regresando a la presentación del inyector de la mezcla aire y combustible, éste se muestra con mayor detalle en la figura 5.2. Este dispositivo fue diseñado para conectarse directamente con el tubo de aire-combustible, y con un diseño tal que se previene un retroceso de la llama dentro del tubo de aire-combustible. Este inyector está formado por una serie de álabes (Figura 5.2a), y en este caso 8. El ángulo para estos álabes es de 30 grados con respecto a la vertical (Figura 5.2b).

El aire y el combustible son premezclados externamente a la cámara de combustión y la mezcla se alimenta en el tubo del combustible. En este estudio el flujo volumétrico de aire usado es de 500 litros estándares por minuto [slpm], referido a 1 atm., 70 [F] (21.1 [C]). La relación de equivalencia es de 0.8.

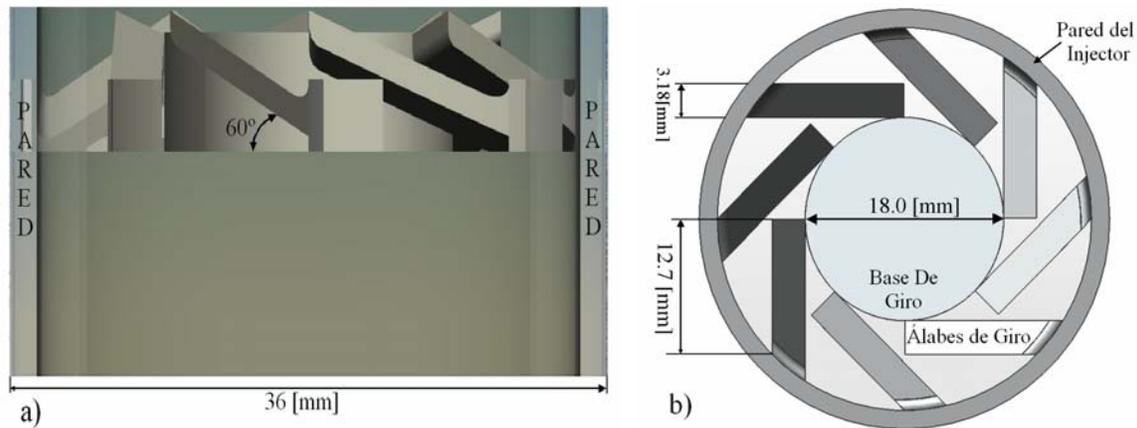


Figura 5.2 Representación del inyector de premezcla pobre. (a) Vista lateral de álabes en el inyector, (b) vista superior.

El comportamiento vorticoso, que resulta del sistema de estabilización se ilustra en la figura 5.3. La mezcla aire y combustible premezclada es rotada rápidamente conforme pasa a través del inyector. El flujo vorticoso genera un vortice central fuerte (Figura 5.3 a), y por lo menos 2 zonas importantes de recirculación (b), una de ellas en la zona central, y la otra en la zona lateral.

La zona de recirculación central causa un cambio en la velocidad del flujo en la parte central del quemador, la cual proporciona una región de estancamiento que permite estabilizar la llama. Dependiendo del nivel del giro y estequiometría de la llama, alguna de esas zonas de estas zonas de recirculación proporcionará la fuente principal de estabilización de la llama.

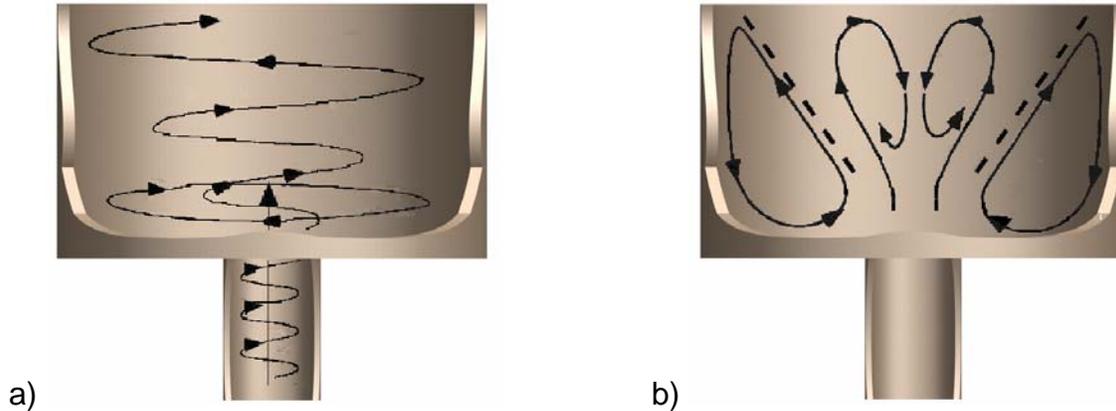


Figura 5.3. Representación del comportamiento del flujo vorticoso. (a) Vórtice central, (b) zonas de recirculación

5.3 Detalles numéricos

La presente llama de metano y aire se simula con el modelo estocástico descrito en el capítulo 4. La simulación de la llama se hace en tres dimensiones (coordenadas cilíndrico-polares). El dominio de cálculo se discretiza con una malla de **28 x 60 x 10 celdas** de dirección radial (r) y axial (z) y angular (θ) respectivamente. Con fines de ahorro en memoria y tiempo de cálculo, el dominio de la simulación empieza en la base del inyector de premezcla, y se extiende hasta **650 milímetros en la cámara de combustión** en la dirección axial. En la dirección radial el dominio de cálculo se extiende hasta la pared de la cámara de combustión a **76 milímetros**. En la figura 5.5 se presenta el dominio que se usa en la simulación. También, con fines de ahorro en memoria y tiempo de cálculo es supuesta una condición de simetría, por lo que solo es simulado la mitad del quemador. En la entrada de mezcla del dominio, las condiciones de velocidad, energía cinética turbulenta y tasa de disipación de la energía cinética turbulenta de la mezcla se asignan a partir de una simulación del flujo **en frío** aguas arriba.

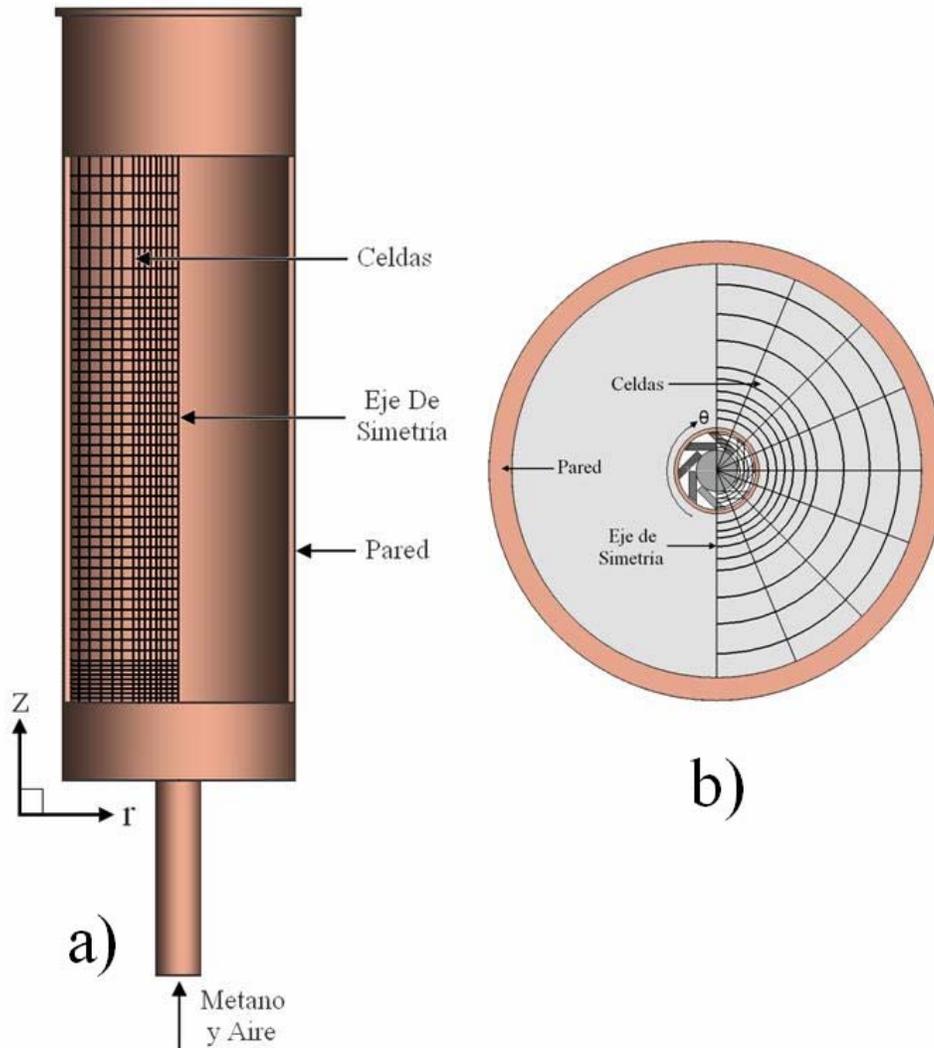


Figura 5.4 Representación de la malla en el quemador. a) Vista frontal, b) vista superior

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

En el módulo de Monte Carlo, la reacción química se modela con el mecanismo de **5 pasos** de Mallampalli et al [94], sistemáticamente reducido a partir del mecanismo detallado GRI 2.11 [13]. Suponiendo que hay pérdidas de calor y que

las especies tienen igual difusividad, la FDP del estado termoquímico de la mezcla se puede determinar unívocamente por 6 escalares (9 especies químicas + la temperatura 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).

La FDP es por tanto:

$$P(n_{\text{CH}_4}, n_{\text{CO}}, n_{\text{OH}}, n_{\text{H}_2\text{O}}, n_{\text{NO}}, T) \quad (5.4)$$

donde los escalares independientes de la FDP, n_α , toman la modalidad de la especie α y T es la temperatura. La representación de la química se hace con la técnica de las tablas de interpolación. Las tablas de interpolación se construyen para pasos temporales de reacción de 1×10^{-15} s y 3.0×10^{-5} s. Para construir cada tabla, el espacio de composición se discretiza linealmente en 15 regiones para cada uno de los escalares independientes anteriores.

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

En cada celda del dominio, la FDP se simula con 100 partículas de Monte Carlo. Con estas condiciones se tiene aproximadamente un tiempo de cálculo de 7 días en una estación de trabajo SUN-MICROSYSTEMS simulando 6000 pasos temporales.

Los resultados obtenidos se presentarán a continuación.

5.4 Resultados y discusiones

En esta sección se presentan los resultados que se obtuvieron para la configuración de la llama de metano con giro. Para algunos parámetros se presentan comparaciones cualitativas con datos experimentales, comparaciones cualitativas aun no son posibles debido a que para esta llama no se tienen mediciones gráficas tanto de velocidades como de temperaturas y especies químicas.

La figura 5.5 se muestra la velocidad en la dirección axial (Z). El pico axial máximo de velocidad es fácilmente evidente cerca de la salida del inyector, así como las regiones de alta velocidad que confinan el vórtice central de la recirculación creado por el flujo que gira. La velocidad axial decae rápidamente sobre el inyector debido en parte a la disipación en la capa cortante y los efectos de estancamiento de la reacción de la combustión. Ese flujo que es dominado por zonas de recirculación lo cual es claramente evidente en regiones de velocidad axial positiva que es confinada por los contornos de velocidad nula. Las divisiones de los flujos a lo largo de las paredes en porciones de gas móvil aguas arriba y aguas abajo es confirmado por los contornos situados entre la zona central grande de recirculación y la zona exterior más pequeña de recirculación. Puede verse que la velocidad axial es la más alta en el punto medio entre las zonas de la recirculación y después decae hacia fuera en ambas direcciones como parte de los movimientos del flujo aguas arriba y la otra parte está configurada abajo dentro de la región de la velocidad axial negativa próxima a la pared.

Comparaciones entre predicciones y datos numéricos de perfiles de velocidad axial, los primeros muestran un comportamiento parecido al experimental, solo que en el caso simulado, el dominio de simulación es más largo del presentado por el experimental.

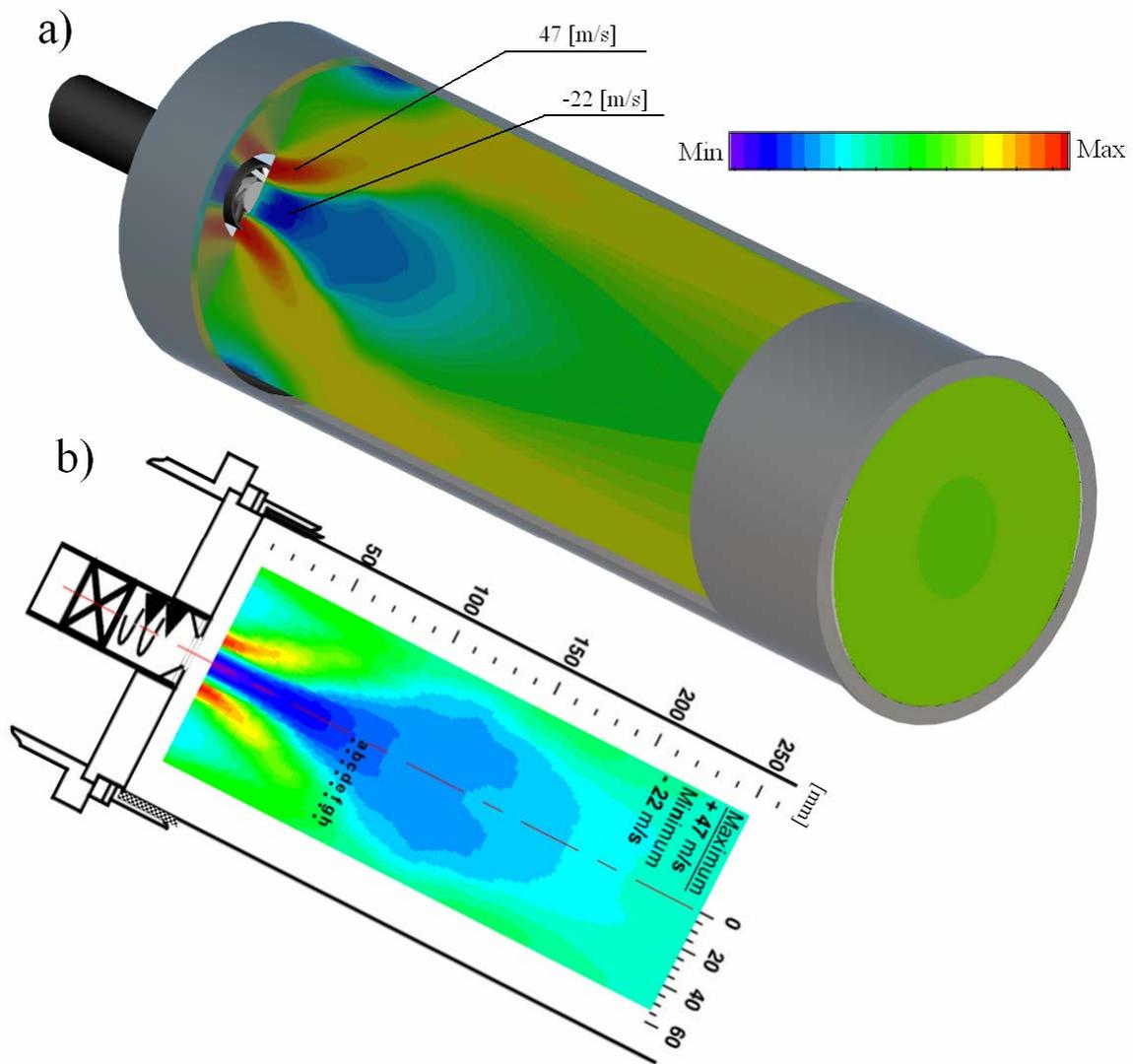


Figura 5.5 Contornos de velocidad en la dirección axial (Z). a) Simulación Numérica. b) Datos Experimentales.

La figura 5.6 muestra el contorno de temperatura. La mayor temperatura (1636.3 [K]) se observa en casi toda la cámara y representa todo el combustible consumido por los gases productos de la combustión, esto se da un poco distante de donde se suministra el combustible a la cámara de combustión porque en esa zona el combustible entra fresco y poco a poco va reaccionando y aumentando su temperatura, hasta que el combustible proporciona completamente su energía. Lo

mismo que en la figura anterior se observa muy claramente la zona de recirculación lateral por donde el combustible es suministrado y poco a poco como va reaccionado y aumentando su temperatura.

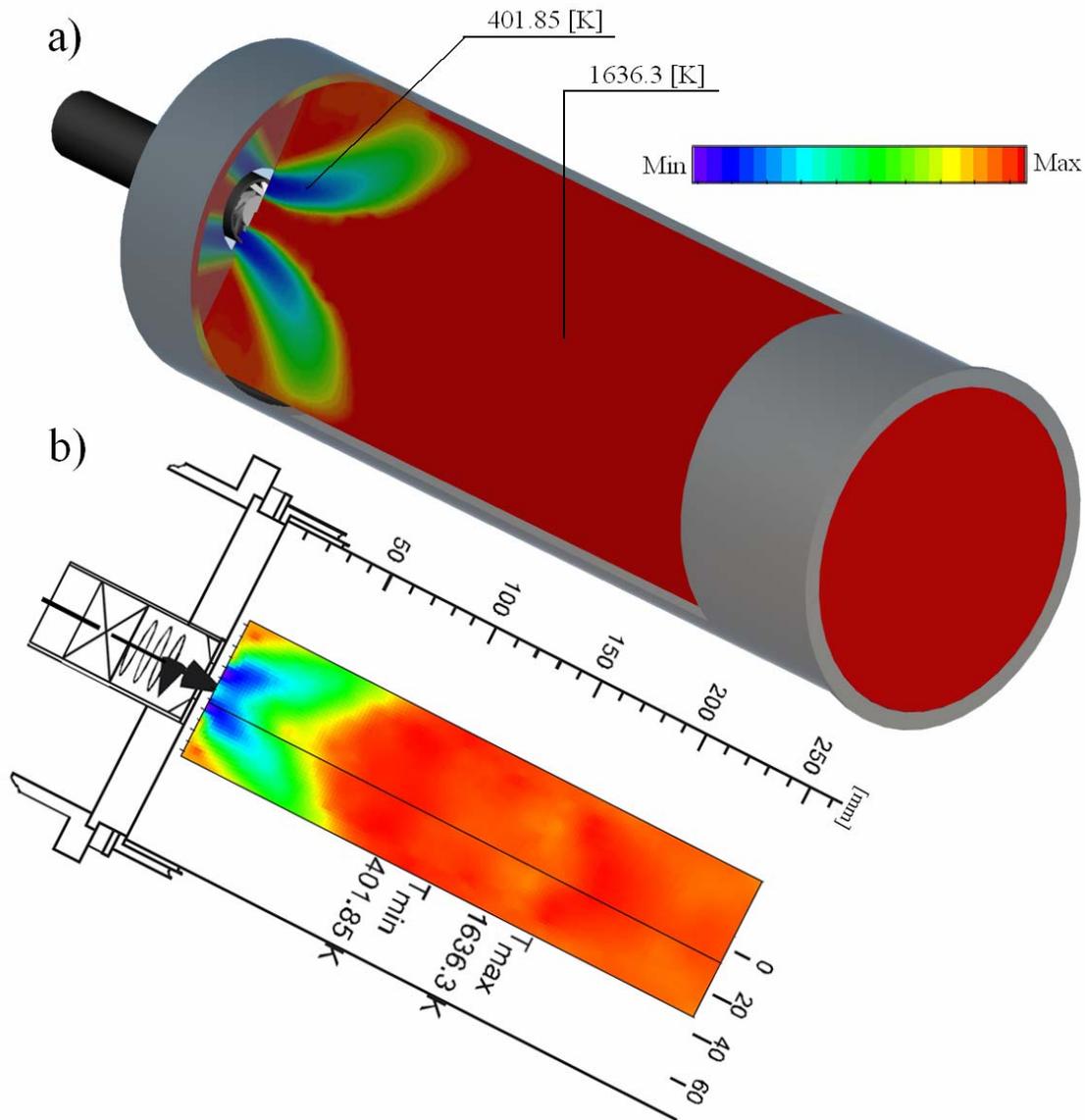


Figura 5.6 contorno de temperaturas. a) Simulación numérica, b) Datos experimentales

Los perfiles de la energía cinética turbulenta se muestran en la figura 5.7. Los mayores niveles de turbulencia se presentan en la capa cortante de la zona de recirculación central, lo cual indica que esta zona contribuye mayoritariamente a estabilizar la llama. Esta zona de alta energía cinética turbulenta termina donde finaliza la zona de recirculación central.

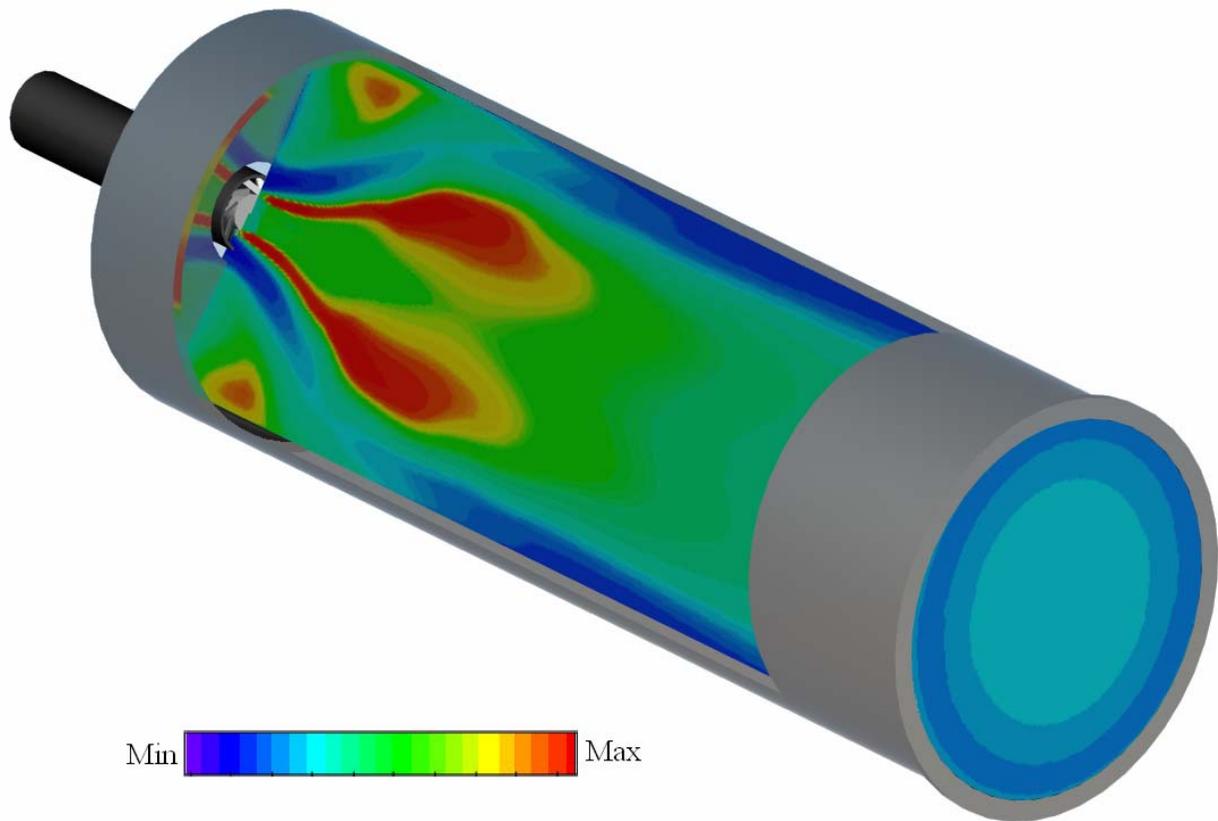


Figura 5.7 Contornos de energía cinética turbulenta

La figura 5.8 muestra los contornos de combustible en la cámara de combustión. La mayor concentración de aire-combustible es a la entrada de la cámara de combustión y conforme se va quemando, producto de la reacción con los gases productos de la combustión de las zonas de recirculación, los niveles van disminuyendo hasta alcanzar valores de equilibrio (aproximadamente cero). Es importante recalcar que en esta imagen se observa que la mezcla aire-combustible es prácticamente quemada en las proximidades de de la salida, lo cual muestra una de las ventajas de la estabilización de la llama por giro en el flujo.

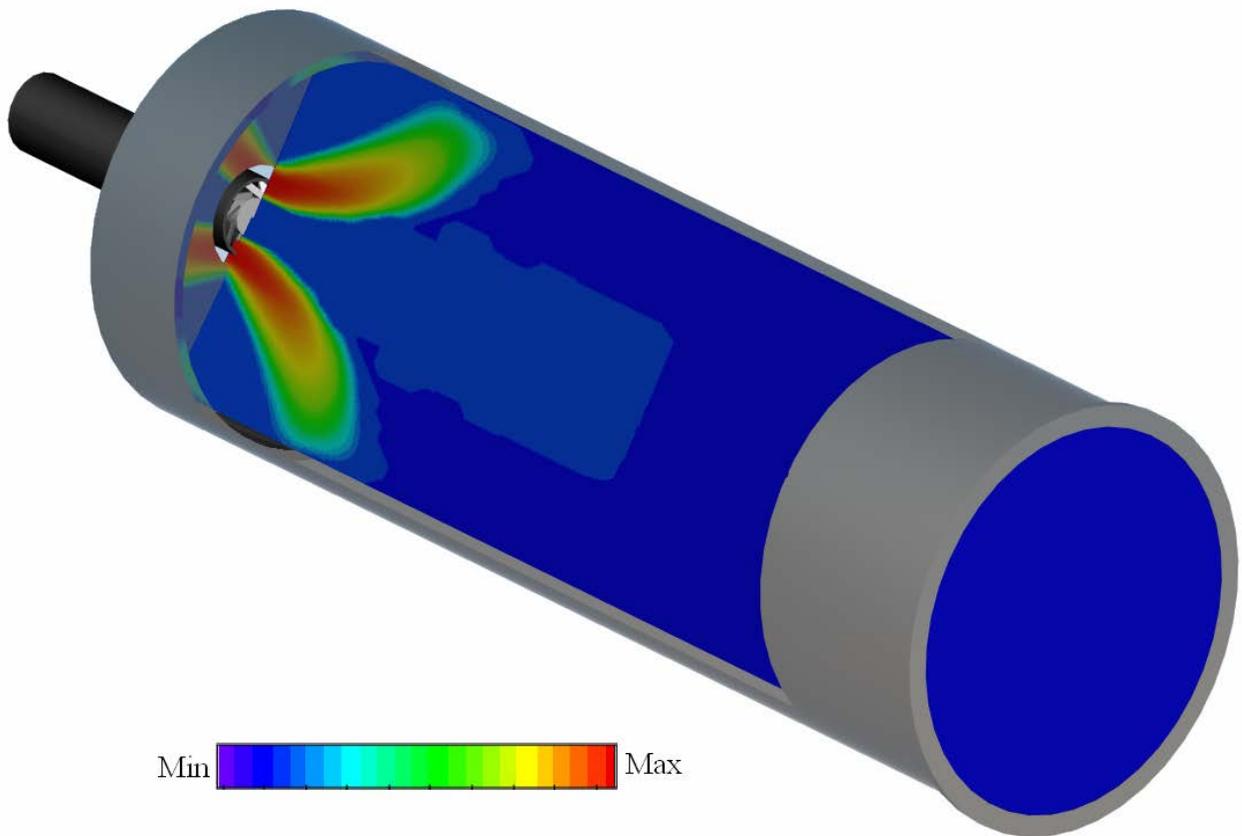


Figura 5.8 Contorno de combustible en la cámara de combustión.

La figura 5.9 muestra los contornos de la fracción de mezcla. Este escalar es conservativo, es decir no reacciona, motivo por el cual es constante en todo el quemador. Este escalar es un indicador de presencia de combustible y/o presencia de productos.

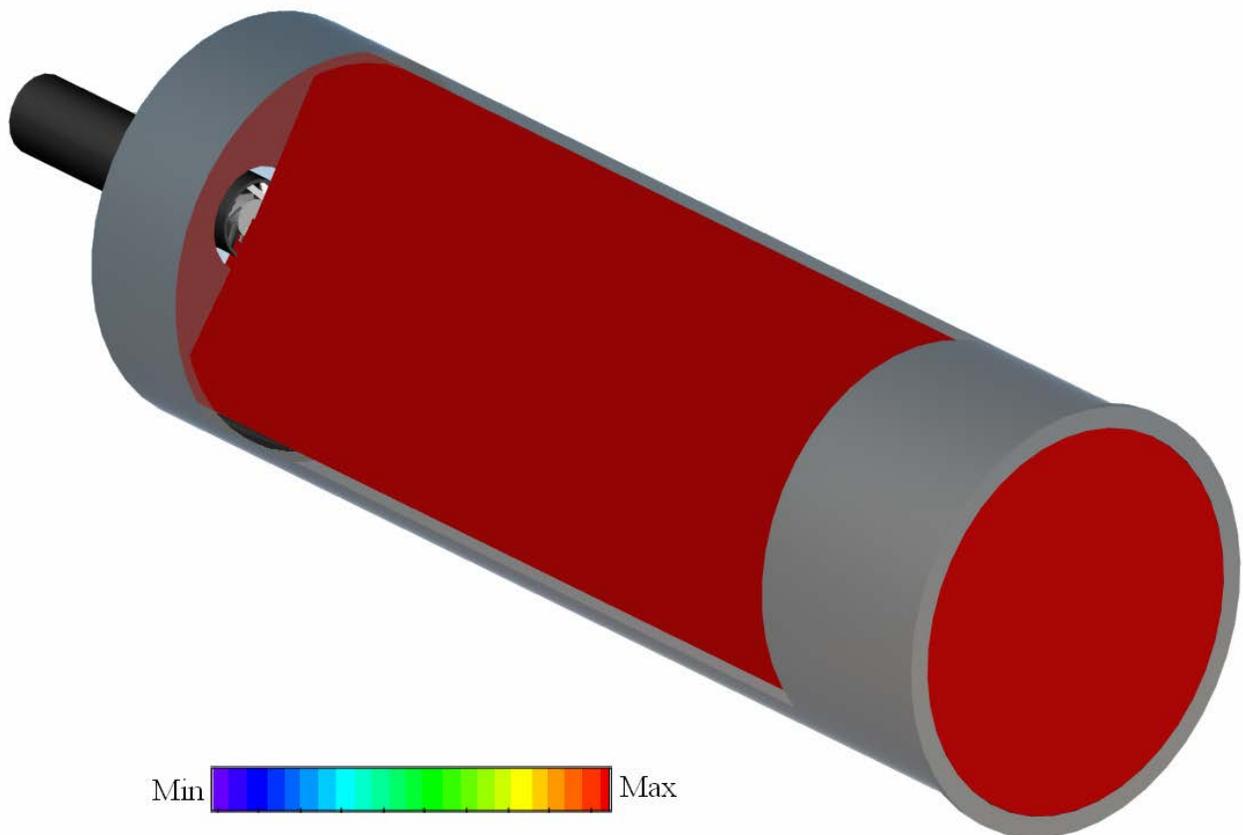


Figura 5.9 Contornos de fracción de mezcla

Los contornos de la fracción másica de oxígeno se muestran en la figura 5.10. Los mayores niveles de oxígeno se encuentran en la entrada del quemador, pero conforme va reaccionando el combustible con el oxidante, los niveles de este último van disminuyendo, hasta alcanzar niveles prácticamente de cero (aproximadamente niveles de equilibrio).

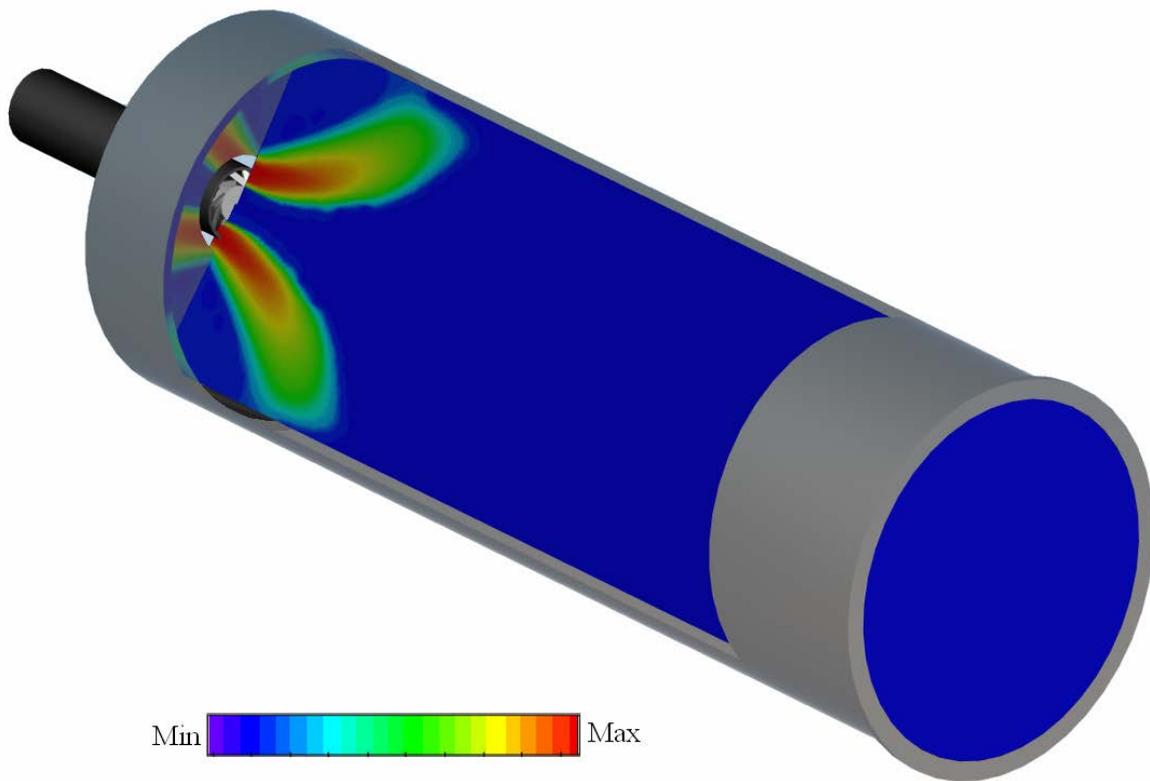


Figura 5.10 Contornos de fracción másica de oxígeno.

En la figura 5.12 se muestran los contornos del CO₂ en el quemador. Conforme va reaccionando los carbonos del combustible con el oxígeno estos se van transformando en CO₂. Después de la zona de recirculación central, los carbonos se han transformado completamente en CO₂, motivo por el cual, en esta zona los niveles de CO₂ son máximos y uniformes, lo que también produce que los niveles de temperatura sean máximos.

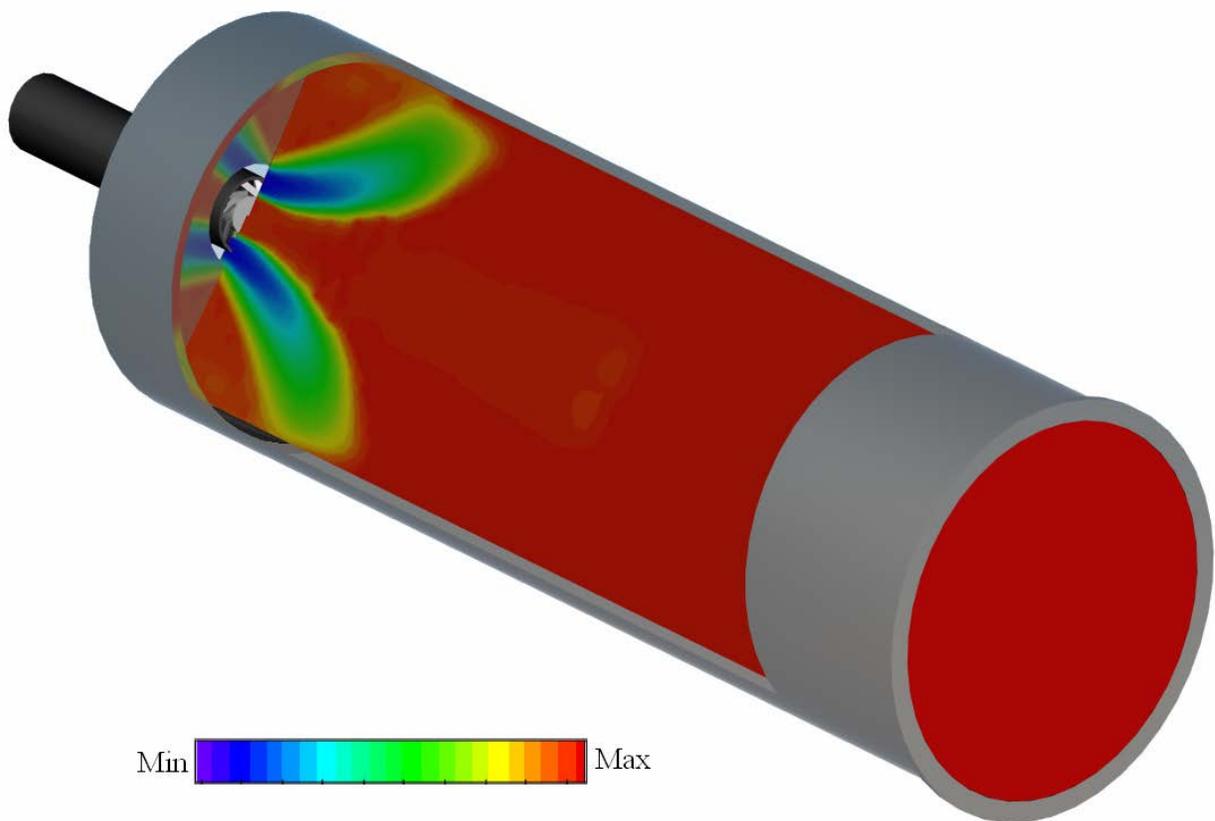


Figura 5.12 Contornos de los productos resultados de la combustión

6

Conclusiones

En esta tesis se estudió el efecto de incluir una corriente de aire adyacente en una flama premezclada. El incluir este flujo de aire tiene como objetivo el disminuir la temperatura de la flama y consecuentemente disminuir la concentración de NO, al haber menos producción de NO térmico. 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 aclarar 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. En base a este se puede concluir que:

- La velocidad de entrada del flujo de aire aunada a la composición de la mezcla de combustible son importantes por que influyen directamente en la disminución de contaminares como CO y NO_x. Observamos en las

Conclusiones

- simulaciones 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 hace uso de una mezcla pobre de combustible y una velocidad de flujo de aire alta, la concentración de NO es 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 logro una disminución de 80%. La técnica LPC aunada con la incorporación de un flujo de aire adyacente es optima para poder disminuir la concentración de NO producto de la combustión en un quemador que utiliza combustible libre de nitrógeno (CH₄).

Adicionalmente se puede concluir lo siguiente:

- La concentración de CO₂ disminuyo 21% respecto a la simulación sin flujo de aire y en con una mezcla rica se disminuyo alrededor del 26%.
- El H₂O disminuyo 26% con una velocidad de flujo adyacente de 10[m/s], cuando se realizaron los cambios en la composición de la mezcla no se presento una disminución, y si un aumento del 94% para la mezcla estequiométrica.
- El O₂ presenta 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 son de cero, excepto para mezcla

pobre. Lo que indica que todo el oxígeno es 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 es de 5000 ppm y más de 15000 para una mezcla estequiométrica y mezcla rica respectivamente.
- La concentración de OH se mantiene para las simulaciones con flujo de aire; para diferente composición de mezcla la concentración se incrementa a 1400 ppm y 3000 ppm para una mezcla estequiométrica y rica respectivamente.

Recomendaciones para trabajos futuros.

Dado el efecto en la aerodinámica en la formación de especies químicas se recomienda simular el flujo en 3 dimensiones. 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 usan en la discretización de término convectivo de la ecuación general (4.1) introducida en el capítulo 4.

En la formulación de la ecuación discretizada (4.1), se requiere conocer la densidad ρ y la variable escalar, ϕ , en la cara de la celda. Estas variables se calculan en el nodo de la celda, por lo que es necesario interpolar entre celdas para conocer su valor en la cara. Este cálculo de ϕ y ρ en la cara de la celda da lugar a los llamados esquemas de discretización. La determinación de los valores de estas variables en la cara es importante para la precisión y convergencia de la solución numérica.

A continuación, se presentan los esquemas de discretización lineales que se usan en esta tesis. Estos esquemas se describirán en base al sistema de celdas que se ilustra en la figura 1. Como ejemplo, se obtendrá el valor de ϕ en la cara e de la celda P. La velocidad en la cara e se considerará, sin pérdida de generalidad, positiva ($u_e > 0$).

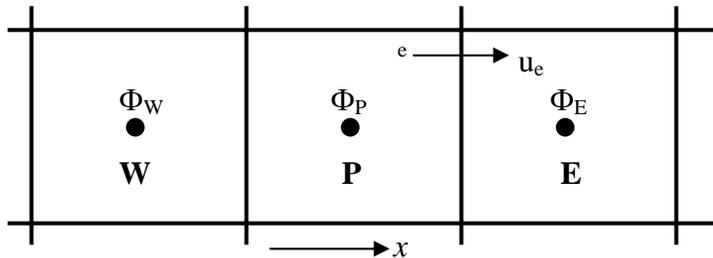


Figura 1: Diagrama esquemático de celdas.

1 Esquemas lineales

1.2 Diferencias desplazadas de primer orden

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

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

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

1.3 Diferencias centradas

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

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

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

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

1.4 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 presentará 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]:

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

Los términos del lado derecho de la ecuación (1) representan: El efecto del gradiente de presión media (o), 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 (o), (b), (c), y (e) están presentes correlaciones desconocidas, y por tanto requieren modelización.

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

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

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 modelización, la correlación entre gradientes de presión fluctuante y fluctuaciones de velocidad, (b), frecuentemente se divide en una parte redistributiva y una parte isotropa [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 isotrópica se divide en dos términos, uno de transporte por presión y otro de dilatación por presión:

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

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

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

El término ϵ es la correlación de la disipación viscosa:

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

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

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

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

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

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.

Modelos para este término se han propuesto 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:

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

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

$$\frac{\partial}{\partial t} (\overline{\rho u_i'' u''}_j}) + \frac{\partial}{\partial x_k} (\overline{\rho \tilde{u}_k'' u_i'' u_j''}) = - \frac{\partial}{\partial x_k} (C_{ijk}) - \overline{\rho} \left(\overline{u_i'' u''}_k \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_k} + \overline{u_j'' u''}_k \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_k} \right) \quad (12)$$

$$-\frac{2}{3}\bar{\rho} \epsilon \delta_{ij} + II_{ij}$$

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

Modelo	MG	ML	MJ
$C_{\epsilon 1}$	1.4	1.44	1.40
$C_{\epsilon 2}$	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

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:

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

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:

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

Donde S_{C_T} es el número de Schmidt/Prandtl turbulento. La viscosidad turbulenta ν_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-ε

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

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

Donde C_μ es una constante determinada experimentalmente. Los valores de \tilde{k} y ϵ 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]:

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

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:

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

Donde:

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

Aplicando hipótesis similares a las utilizadas para la ecuación de \tilde{k} (18), la ecuación para la disipación de la energía cinética turbulenta, ϵ , se obtiene a partir de la ecuación (10) [123]:

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

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

APÉNDICE C

Modelización 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 Prompt. Las reacciones de estas rutas se caracterizan por tener en general tasas de reacción más lentas que las principales reacciones que liberan calor.

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



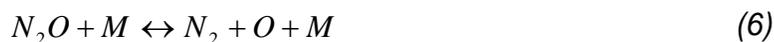
El paso de reacción que controla la velocidad de formación de *NO* es la reacción (1). Debido a la relativa alta energía de activación (E_r) de la reacción (1), la formación de *NO* por este mecanismo es muy dependiente de la temperatura. Este mecanismo es muy sensible a las fluctuaciones de temperatura [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]:

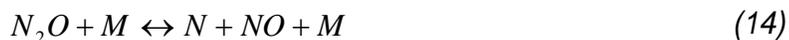


Donde $O(^1D)$ denota el átomo de *O* excitado electrónicamente. Por su dependencia con la temperatura, esta ruta frecuentemente se denomina mecanismo "térmico" [141].

1.2 Mecanismo N_2O intermedio

En el mecanismo N_2O intermedio, el *NO* se forma a partir del N_2 vía la especie intermedia N_2O . 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 Prompt

El mecanismo Prompt (o súbito) fue identificado por Fenimore [47]. En esta ruta, los radicales hidrocarburos el frente de llama, *CHi*, atacan el N₂ del aire para dar lugar *HCN* y otras especies cianadas, como el *HCNO*, y a átomos TV, 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 Prompt no es tan dependiente de la temperatura como el de Zeldovich debido a las relativamente bajas energías de activación de las tasas de reacción. En la combustión de premezcla pobre a altas presiones, la contribución de este mecanismo en la formación de NO_x puede ser despreciable. Sin embargo, a presiones próximas a 1 atm, la contribución de esta ruta puede llegar a ser significativa [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

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 combustión adiabática

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

En la combustión de CH_4 -aire y de H_2 -aire, el NO_x presenta una dependencia mínima con la temperatura de combustión 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, aun cuando el efecto de la presión en la formación de los NO_x pueda ser relativamente bajo, 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*

- [13] Combustion Institute, editor, *24th Symposium (International) on Combustion*, pages 503-510, Pittsburgh, 1992.
- [14] C. T. Bowman, R. K. Hanson, D. F. Davidson, J. W. C. Gardiner, V. Lissianski, G. P. Smith, D. M. Golden, M. Frenklach, H. Wang, and M.V. Lissianski. GRI-Mech 2.11. <http://www.gri.org>, 1995.
- [15] D. Bradley. Laminar Flamelet Modeling of Recirculating Premixed Methane and Propane-Air Combustion. *Combustion and Flame*, 71:109122, 1988.
- [16] K.Ñ. C. Bray. *Proc. R. Soc. Lond. A*, 431:315-335, 1990.
- [17] 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.
- [18] 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.
- [19] S. M. Cannon. *Modeling of Lean Premixed Gaseous Turbulent Combustion*. PhD thesis, Brigham Young University, USA, 1997.
- [20] S. M. Cannon, B. S. Brewster, and L. D. Smoot. Chemical Kinetic Modeling of a Bluff-Body Lean Premixed Combustor. 1998.
- [21] 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.
- [22] 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.
- [23] J. Y. Chen. A General Procedure for Constructing Reduced Mechanisms with Given Independent Reactions. *Combustion Science and Technology*, 57:89-94, 1988.
- [24] J. Y. Chen. Stochastic Modeling of Partially Stirred Reactors. *Combustion Science and Technology*, 2:63-94, 1997.

- [25] 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.
- [26] J. Y. Chen, W. Kollmann, and R. W. Dibble. PDF modeling of Turbulent No-Premixed Methane Jet. *Combustion Science and Technology*, 64:315346, 1989.
- [27] 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.
- [28] 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.
- [29] F. C. Christo, A. R. Masri, and E. M. Nebot. *Combustion and Flame*, 106:406, 1996.
- [30] 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.
- [31] 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.
- [32] H. Cohen, G. F. C. Rogers, and H.I.H. Saravanamutto. *Gas Turbine Theory*. Longman Group Limited. 1996.
- [33] 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.
- [34] S. M. Correa. A Review of NO_x Formation Under Gas Turbine Combustion Conditions. *Combustion Science and Technology*, 87:329-362, 1992.
- [35] S. M. Correa. Carbon Monoxide Emissions in Lean Premixed Combustion. *Journal of Propulsion and Power*, 8:1144-1151, 1992.
- [36] S. M. Correa. Turbulence-Chemistry Interactions in the Intermediate Regime of Premixed Combustion. *Combustion and Flame*, 93:41, 1993.

- [37] R. L. Curl. Dispersed Phase Mixing: 1. Theory and effects in Simple Reactors. *A. I. Ch. E. Journal*, 9(2):175-181, 1963.
- [38] 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.
- [39] B. J. Daly and F. H. Harlow. Transport Equations in Turbulence. *Physics of Fluids*, 13(11):2634-2649, 1970.
- [40] 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.
- [41] C. Dopazo. Probability Density Function Approach for a Turbulent Axisymmetric Heated Jet Centerline Evolution. *Physics of Fluids*, 18(4):397-404, 1975.
- [42] C. Dopazo. Relaxation of Initial Probability Density Functions in the Turbulent Convection of Scalar Fields. *Physics of Fluids*, 22(1):20-30, 1979.
- [43] C. Dopazo. Recent developments in PDF methods, pages 375-474. Academic press. 1994
- [44] 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.
- [45] 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.
- [46] [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. ' , '
- [47] A. Favre. *Problems of Hydrodynamics and Continuum Mechanics*. SIAM, , 1969.
- [48] 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.
- [49] H. H. Ferziger and M. Peric. *Computational Methods for Fluid Dynamics*. Springer-Verlag. 1996.
-
-

- [50] Centre for the Analysis and Dissemination of Demonstrated Energy Technologies. <http://194.178.172.86/home.htm>, March 2000.
- [51] 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.
- [52] M. M. Gibson and B. A. Younis. Calculation of Swirling Jets with a Reynolds Stress Closure. *Physics of Fluids*, 29:38, 1986.
- [53] 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.
- [54] 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
- [55] D. C. Haworth and T. J. Mungal. *Journal of Fluid Mechanics*, 244:405-436, 1992.
- [56] S. Haykin. *Neuronal Networks: A Comprehensive Foundation*. Macmillan College Publishing Company, New York, 1994.
- [57] 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
- [58] A. C. Hindmarsh. ODEPACK, *A Systematized Collection of ODE Solvers*, pages 55-64. Scientific Computing, North-Holland, Amsterdam, 1983.
- [59] 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.
- [60] 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.
- [61] 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.

- [62] J. Janicka and W. Kollmann. The Calculation of Mean Radical Concentration in Turbulent-Diffusion Flames. *Combustion and Flame*, 44:319-316, 1982.
- [63] 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.
- [64] 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.
- [65] W. P. Jones. *Turbulence Modeling and Numerical Solutions Methods for Variable Density and Combustion Flows*, pages 306-374. Academic Press.1994.
- [66] W. P. Jones and M. Kakhi. *Mathematical Modeling of Turbulent Flames*, volume 306 of *Series E. Applied Sciences*, Kluwer Academic Publishers, pages 411-492. 1996.
- [67] W. P. Jones and B. E. Launder. The Prediction of Laminarisation with a Two-Equation Model of Turbulence. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 15:301-314, 1972.
- [68] W. P. Jones and R. P. Lindstedt. Global Reaction Schemes for Hydrocarbon Combustion. *Combustion and Flame*, 73:233-249, 1988.
- [69] W. P. Jones and P. Musonge. Closure of the Reynolds Stress and Scalar Flux Equations. *Physics of Fluids*, 31(12):3589-3604, 1988.
- [70] N. D. Joshi, M. J. Epstein, S. Durlak, S. Marakovits, and P. E. Sabla. Development of a Fuel Air Premixer for Aero-Derivative Dry Low Emissions Combustor. ASME Paper No. 94-GT-253, 1994.
- [71] M. Kakhi. *The Transported Probability Density Function Approach for Predicting Turbulent Combustion Flows*. PhD thesis, Imperial College of Science Technology and Medicine, London, 1994.
- [72] C. Kennel, F. Mauss, and N. Peters. Reduced Kinetic Mechanisms for Premixed Propane-Air Flames. In N. Peters and B. Rogg, editors, *Reduced Kinetic for Applications in Combustion Systems*, Lecture Notes in Physics, m 15, pages 123-141. Springer- Verlag, 1993.
- [73] A. R. Kerstein. One-Dimensional Turbulence: Model Formulation and Application to Homogeneous Turbulence, Shear Flows, and Buoyant Stratified Flows. *Journal of Fluid Mechanics*, 392:277-334, 1999.
-
-

- [74] A.R. Kerstein. Linear-Eddy Modelling of Turbulent Transport. Part 6. Microstructure of Diffusive Scalar Mixing Fields. *Journal of Fluid Mechanics*, 231:361-394, 1991.
- [75] A.R. Kerstein and T.D. Dreeben. Prediction of Turbulent Free Shear Flow Statistics Using a Simple Stochastic Model. *Physics of Fluids*, 12(2):418-424, 2000.
- [76] B. Koren. *A Robust Upwind Discretisation Method for Advection Diffusion and Source Terms*, page 117. Vieweg, Braunschweig, 1985.
- [77] C. K. G. Lam and K. Bremhorst. A Modified Form of the k - ϵ model for Prediction Wall Turbulence. *ASME Journal of Fluid Engineering*, 113:456, 1981.
- [78] 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.
- [79] B. E. Launder, M. A. Leschziner, and M. Sindir. The umist/ucd computations for the afosr-ittm-stanfords conference on complex turbulent flows. Technical Report TFD/82/1, UMIST, July 1982.
- [80] B. E. Launder and D. B. Spalding. *Lectures in Mathematical Models of Turbulence*. Academic Press, 1972.
- [81] C. K. Law. A Compilation of Experimental Data on Laminar Burning Velocities. In N. Peters and B. Rogg, editors, *Reduced Kinetic for Applications in Combustion Systems*, Lecture Notes in Physics, m 15, pages 13-26. Springer- Verlag, 1993. .
- [82] B. Van Leer. *Upwind Difference Methods for Aerodynamic Problems Governed by the Euler Equations*, volume 22 of Am. Math. Soc., pages 327-336. 1985. .
- [83] B. P. Leonard. A Stable and Accurate Convective Modeling Procedure Based on Cuadratic Upstream Interpolation. *Comp. Methods Appl. Mech. Eng.*, 19:59, 1979.
- [84] G. Leonard and J. Stegmaier. Development of an Aeroderivative Gas Turbine Dry Low Emissions Combustion System. *ASME-Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 116:542-546, 1994.
- [85] R. P. Lindstedt and E. M. Váos. Modeling of Premixed Flames with Second Moment Methods. *Combustion and Flame*, 116:461-485, 1999.
-
-

- [86] F. C. Lockwood and A. S. Naguib. *Combustion and Flame*, 24:104, 1955.
- [87] J. C. Ludwing, H. Q. Qin, and D. B. Spalding. The PHOENICS Reference Manual. Technical Report CHAM TR/200, CHAM Ltd, London, 1989.
- [88] J. L Lumley. Pressure-Strain Correlation. *Physics of Fluids*, 18(6):750, 1975.
- [89] U. Maas-and S. B. Pope. Implementation of Simplified Chemical Kinetics Based on Intrinsic Low-Dimensional Manifolds. In The Combustion Institute, editor, *24th Symposium (International) on Combustion*, pages 103-112, Pittsburgh, 1992.
- [90] U. Maas and S. B. Pope. Simplifying Chemical Kinetics: Intrinsic Low-Dimensional Manifolds in Composition Spae. *Combustion and Flame*, 88:239-264, 1992.
- [91] U. Maas and S. B. Pope. Laminar Flame Calculations Using Simplified Chemical Kinetics Based on Intrinsic Low-Dimensional Manifolds. In The Combustion Institute, editor; *25th Symposium (International) on Combustion*, pages 1349-1356, Pittsburgh, 1994.
- [92] S. Magnussen and Hjertager. On Mathematical Models of Turbulent Combustion with Special Emphasis on Soot Formation and Combustion. In The Combustion Institute, editor, *16th Symposium (International) on Combustion*, pages 719-729, Pittsburgh, 1977.
- [93] E. Maistret, E. Darabiha, T. Poinso, D. Veynante, F. Lacas, S. Candel, and E. Esposito. In *Third International Conference on Numerical Combustion*, pages 177-188, 1989.
- [94] H. P. Mallampalli, T. H. Fletcher H.P., and J. Y. Chen. Evaluation of CH₄/NO_x Global Mechanisms Used for Modeling Lean Premixed Turbulent Combustion of Natural Gas. In *Fall Meeting of the Western States Section of the Combustion Institute*, University of Southern California Los Angeles, CA., October 28-29, 1996.
- [95] 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.
- [96] P. C. Malte and D. T. Pratt. The Role of Energy-Releasing Kinetics in NO_x Formation: Fuel-Lean Jet Stirred CO-Air Combustion. *Combustion Science and Technology*, 9:221-231, 1974.
-
-

- [97] 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.
- [98] M. G. Michaud, P. R. Westmoreland, and A. S. Feitelberg. Chemical Mechanisms of NO_x Formation for Gas Turbine Conditions. In The Combustion Institute, editor, *24th Symposium (International) on Combustion*, Pittsburgh, 1992.
- [99] J. A. Miller and C. T. Bowman. Mechanism and Modeling of Nitrogen Chemistry in Combustion. *Progress in Energy and Combustion Science*, 15:287-338, 1989.
- [100] P. Moin and K. Mahesh. Direct Numerical Simulation: a Tool in Turbulence Research. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 30:539-578, 1998.
- [101] S. P. Nandula, R. W. Pitz, R. S. Barlow, and G. J. Fiechtner. Rayleigh-Raman-LIF Measurements in a Turbulent Lean Premixed Combustor. In *34th Aerospace Sciences Meeting Exhibit*, Reno, NV, 15-18 January 1996.
- [102] D. G. Nicol, P. C. Malte, A. J. Hamer, R. J. Roby, and R. C. Steele. Development of a Five-Step Global Methane Oxidation-NO Formation Mechanism for Lean-Premixed Gas Turbine Combustion. *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 121:272-280, 1999.
- [103] D. G. Nicol, R. C. Steele, N. M. Marinov, and P. C. Malte. The Importance of Nitrous Oxide Pathway to NO_x in Lean Premixed Combustion. In *The ASME International Gas Turbine, and Aeroengine Congress and Exposition*, Cincinnati, Ohio, 1993.
- [104] D. G. Nicol, R. C. Steele, N. M. Marinov, and P. C. Malte. The Importance of the Nitrous Oxide Pathway to NO_x in Lean Premixed Combustion. *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 117:100-111, 1995.
- [105] L. Vali no and C. Dopazo. Quasistationary probability density functions in the turbulent mixing of a scalar field. *Physical Reviews Letters*, 72(22):3518-3521) 1994.
- [106] B. Ñoll. Evaluation of a Bounded High-Resolution Scheme for Combustor Flow Computations. *AIAA Journal*, 30(1):64-69, 1992.
-
-

- [107] A. T. Norris and A. T. Hsu. Comparison of PDF and Moment Closure Methods in the Modeling of Turbulent Reacting Flows. In SAE and ASEE ASME, editor, *30th Joint Propulsion Conference-AIAA*, Indianapolis, Indiana, June 27-29 1994.
- [108] A. T. Norris and S. B. Pope. Modeling of extinction in turbulent diffusion flames by the velocity-dissipation-composition pdf method. *Combustion and Flame*, 100:211-220, 1995.
- [109] J. C. Pan, W. J. Schmoll and D. R. Ballal. Turbulent Combustion Properties Behind a Confined Conical Stabilizer. *ASME-Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 114:33-38, 1992.
- [110] J. C. Pan, M. D. Vangsness, S. P. Heneghan, W. J. Schmoll, and D. R. Ballal. Laser Diagnostic Studies of Confined Turbulent Premixed Flames Stabilized by Conical Bluff Bodies: Data Set. Technical Report UDRTR-91-102, University of Dayton, July 1991.
- [111] S. V. Patankar. Numerical Heat Transfer and Fluid Flow. Series in Computational Methods in Mechanics and Thermal Science. Hemisphere Publishing Corporation, January 1980.
- [112] S. V. Patankar and D. B. Spalding. A Calculation Procedure for Heat, Mass and Momentum Transfer in Three Dimensional Parabolic Flows. *Int. J. Heat and Mass Transfer*, 15:1787-1806, 1972.
- [113] N. Peters. Numerical Simulation of Combustion Phenomena. Lecture Notes in Physics, 241, page 90. Springer-Verlag, Berlin, 1985.
- [114] N. Peters. Laminar Flamelets Concepts in Turbulent Combustion. In The Combustion Institute, editor, *21th Symposium (International) on Combustion*, pages 1231-1250, Pittsburgh, 1986,:
- [115] D. G. Pfuderer, A. A. Neuber, G. Früchtel, E. P. Hassel, and J. Janicka. Turbulence Modulation in Jet Diffusion Flames: Modeling and Experiments. *Combustion and Flame*, 106:301-317, 1996.
- [116] W. Polifke, K. Döbbeling, T. Sattelmayer, and D. G. Nicol P. C. Malte. A NO_x Prediction Scheme for Lean-Premixed Gas Turbine Combustion Based on Detailed Chemical Kinetics. *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 118:765-772, October. 1996.

- [117] S. B. Pope. *Combustion and Flame*, 27:299, 1976.
- [118] S. B. Pope. Transport Equation for Joint Probability Density Function of Velocity and Scalar in Turbulent Flow. *Physics of Fluids*, 24(4):588-596, 1976. .
- [119] S. B. Pope. The Statistical Theory of Turbulent Flames. *Phil. Trans. R. Soc.*, pages 291-529, 1979.
- [120] S. B. Pope. A Monte Carlo Method for the PDF Equations of Turbulent Reactive Flow. *Combustion Science and Technology*, 25:159-174, 1981.
- [121] S. B. Pope. Transport Equation for Joint Probability Density Function of Velocity and Scalar in Turbulent Flow. *Physics of fluids*, 24(4):588-596, 1981.
- [122] S. B. Pope. PDF Methods for Turbulent-Reactive Flows. *Progress Energy Combustion Science*, 11:119-192, 1985.
- [123] S. B. Pope. Computationally Efficient Implementation of Combustion Chemistry "in-situ" Adaptive Tabulation. *Combustion Theory Modeling*, 1:41-63, 1997.
- [124] W. Rodi. *Turbulence Models and their Application in Hydraulics*. International Association for Hydraulics Research, ISBN 902127002-1. Delf, Holland, 1984.
- [125] P. L. Roe. Finite- Volume Methods for the Compressible Navier-Stokes Equations. In *Proceedings 5th Int. Conf. Numerical Methods in Laminar and Turbulent Flow*, volume V, pages 2088-2101, Montreal, 1987.
- [126] T. Rutar and P. C. Malte. Experimental Measurements of NO_x and CO in a Jet-Stirred Reactor at Pressures of 3.0, 4.7 and 6.5 Atm and 'Variable Residence Times. In *"Fall Meeting of the Western States Section of the Combustion Institute, Paper No. WSS/CI 9SF-S*, University of Washington, Seattle, Washington, October 26-27 1998.
- [127] T. Rutar, D. G. Nicol, J. C. Y. Lee and P. C. Malte. NO_x Behavior in Lean Premixed Combustion. In The Combustion Institute, editor, *27th Symposium (International) on Combustion*, Poster No. W2A01, Pittsburgh, 1998.
- [128] R. Siegel and J. R. Howell. *Thermal Radiation Heat Transfer*, McGraw-Hill, Washington, 2nd edition, 1981.
- [129] L.D. Smoot and P. J. Smith. *Coal Combustion and Gasification*. Plenum Press, New York, 1985.

- [130] T. S. Snyder, T. J. Rosfjord, J. B. McVey, A. S. Hu, and B. C. Schlein. Emission and Performance of a Lean-Premixed Gas Fuel Injection System for Aeroderivative Gas Turbine Engines. *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 118:38-45, 1996.
- [131] D. B. Spalding. Mixing and Chemical Reaction in Steady, Confined Turbulent Flames. In Institute of Combustion, editor, *13th Symposium (International) on Combustion*, pages 649-657, Pittsburgh, 1971.
- [132] D. B. Spalding. A Novel Finite-Difference Formulation for Differential Expressions Involving Both First and Second Derivatives. *Int. Journal Num. Methods Engineering*, 4:551, 1972.
- [133] D. B. Spalding. Development of the Eddy-Breakup Model of Turbulent Combustion. In The Combustion Institute, editor, *16th Symposium (International) on combustion*, page 1657, Pittsburgh, 1976.
- [134] D. B. Spalding. Mathematical Modeling of Fluid Dynamics, Heat Transfer and Mass Transfer Processes, Technical Report HTS/8011, Imperial College of Science Technology and Medicine, 1980.
- [135] D. B. Spalding. A General-Purpose Computer Program for Multidimensional One and Two-Phase Flows. In *IMACS Meeting*, Lehigh University, Pennsylvania, 1981.
- [136] R. C. Steele, A. C. Jarrett, P. C. Malte, J. H. Tonouchi, and D. G. Nicol. Variables Affecting NO_x Formation in Lean-Premixed Combustion. *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 119:102-107, 1997.
- [137] R. C. Steele, P. C. Malte, D. G. Nicol, and J. C. Kramlich. NO_x and N₂O in Lean Premixed Jet Stirred Flames. *Combustion and Flame*, 100, 1995.
- [138] P. K. Sweby. High Resolution Schemes Using Flux Limiters for Hyperbolic Conservation Laws. *SIAM Journal on Mathematical Analysis*, 21:995-1011, 1984.
- [139] S. Tavoularis and S. Corrsin. Experiments in Nearly Homogeneous Turbulent Shear Flow with a Uniform Mean Temperature Gradient, Part 1. *Journal of Fluid Mechanics*, 104:311-347, 1981.
- [140] H. Tennekes and J. L. Lumley. *A First Course in Turbulence*. MIT Press. 1977.
- [141] D. Veynante, F. Lacas, and S. Candel. In *Proceedings of the Marble Symposium*, pages 237-256, 1988.

- [142] J. Warnatz, U. Mass, and R. W. Dibble. *Combustion*. Springer. 1996.
- [143] N. P. Waterson. Development of Bounded Higher-Order Convection Scheme for General Industrial Applications. Technical Report 1994-33, Von Karman Institute, Belgium, 1994.
- [144] N. P. Waterson and H. Deconinck. *A Unified Approach to the Design and Application of Bounded Higher-Order Convection Schemes*. CFD Lectures Series 1995-21, Von Karman Institute for Fluid Dynamics. Rhode-Sain-Genese, Belgium, 1995.
- [145] C. K. Westbrook and F. L. Dryer. Chemical Kinetic Modeling of Hydrocarbon Combustion. *Progress Energy Combustion Science*, 10(1), 1984.
- [146] F. A. Williams. *Combustion Theory*. Second edition, the Benjamin/Cummings Publishing Company. 1985.
- [147] L. Xie, S. Hayashi, and K. Hirose. NO_x Formation in Turbulent Lean Premixed Combustion with Minimum Heat Losses. In The Combustion Institute, editor, *26th Symposium (International) on Combustion*, Pittsburgh, 1996.
- [148] V. Yakhot and S. A. Orszag. Renormalization Group Analysis of Turbulence. 1. Basic Theory. *Journal of Scientific Computing*, 1(1):3-51, 1986.
- [149] V. Yakhot, S. A. Orszag, S. Thangam, T. B. Gatski, and C. G. Speziale. Development of Turbulence Models for Shear Flows by a Double Expansion Technique. *Physics of Fluids A*, 4(7), 1992.
- [150] V. Yakhot and L. M. Smith. The Renormalization Group, the E-expansion and Derivation of Turbulence Models. *Journal of Scientific Computing*, 7(1), 1992.
- [151] B. Yang and S. B. Pope. An Investigation of the Accuracy of Manifolds Methods and Splittind Schemes in the Computational Implementation of Combustion Chemistry. *Combustion and Flame*, 112:16-32, 1998.
- [152] 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.
- [153]

- [154] Stevan Nemoda, Vukman Bakić, Simeon Oka. Laboratory for Thermal and Energy Research, *Experimental and numerical investigation of gaseous fuel combustion in swirl chamber*, 2005.
- [155] G. Cabot, D. Bauchelles, B. Taupin, A. Boukhalfa. Saint Etienne du Rouvray. *Experimental study of lean premixed turbulent combustion in a scale gas turbine chamber*. France, 2004.
- [156] 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.
- [157] William Vicente, Martin Salinas, Esteban Barrios. *PDF modelling of CO and NO formation in lean premixed methane flames*. Instituto de ingeniería UNAM, 2003.