



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA  
DE MÉXICO

FACULTAD DE INGENIERIA

DIVISIÓN DE INGENIERÍA  
MECÁNICA E INDUSTRIAL

Análisis Numérico del Efecto del Tipo de Combustible  
en la Llama de un Quemador Elevado  
dentro de un Flujo Cruzado

TESIS

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE  
INGENIERO MECÁNICO

PRESENTA:

JULIÁN HURTADO SÁNCHEZ

Director: Dr. William Vicente y Rodríguez



MÉXICO, D. F.

2007



Universidad Nacional  
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

**Biblioteca Central**



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

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

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

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

## Agradecimientos

*Siempre estaré agradecido con mi mamá y abuelitos, quienes a lo largo de mi vida me han guiado para que siga el camino correcto, pues siempre me han dado su amor, han visto por mí, me han apoyado y aconsejado. En verdad los admiro y los quiero y le agradezco a Dios, el que me los haya dado como padres, así como por mi hermano, Raúl, del que he aprendido varias cosas y al que admiro por su esfuerzo constante por salir adelante y que sé, así será.*

*También quiero mencionar y agradecer el gran apoyo y comprensión por parte de mi director de tesis, el Dr. William Vicente y Rodríguez, porque es de los pocos profesores que realmente se interesan por sus alumnos, no sólo como tales sino también como personas y es de las pocas personas que saben que el valor de un individuo no depende de las cosas materiales que se lleguen a acumular.*

*Además, les doy las gracias sinceramente a todos los que influyeron directa o indirectamente, para que yo pudiera culminar este trabajo.*

*Le agradezco a mi Universidad, la UNAM, por haberme formado profesionalmente, desde la preparatoria. Es un gran orgullo haber estudiado en la que para mí, es la mejor universidad del mundo.*

*Y se agradece a la Dirección General del Personal Académico por el apoyo recibido mediante el proyecto PAPIIT-IN-109106-3.*

**Gracias Pris.**

# Índice

## 1. INTRODUCCIÓN

1.1. <i>Objetivo de la tesis</i> .....	6
1.2. <i>Motivación social y ambiental</i> .....	6
1.3. <i>Estructura de la tesis</i> .....	9

## 2. ECUACIONES DE TRANSPORTE

2.1. <i>Introducción</i> .....	11
2.2. <i>Continuidad</i> .....	12
2.3. <i>Conservación de la cantidad de movimiento</i> .....	12
2.4. <i>Conservación de la energía total</i> .....	13
2.5. <i>Conservación de las especies químicas</i> .....	14
2.6. <i>Ecuación de estado y flujo difusivo</i> .....	16
2.7. <i>Ecuación diferencial homogénea y fracción de mezcla</i> .....	19
2.8. <i>Promediado de las ecuaciones</i> .....	21
2.9. <i>Modelo de combustión</i> .....	25
2.10. <i>Modelo de radiación de calor</i> .....	30
2.11. <i>Modelo de flotación</i> .....	31
2.12. <i>Condiciones iniciales</i> .....	31

## 3. MÉTODO DE SOLUCION

3.1. <i>Método de volúmenes finitos</i> .....	33
---	----

## **4. PREDICCIÓN NUMÉRICA DE LA LLAMA EN FLUJO CRUZADO**

4.1. Introducción.....	40
4.2. Configuración experimental.....	40
4.3. Detalles numéricos.....	42
4.4. Resultados y discusión.....	44
4.4.1. Resultados del caso base. Análisis y comparación con datos experimentales.....	45
4.4.1.1. Longitud de la llama.....	47
4.4.1.2. Ángulo de la llama.....	50
4.4.2. Análisis del efecto del tipo de combustible (metano, etano y propano).....	51
4.4.2.1. Longitud de la llama.....	51
4.4.2.2. Ángulo de la llama.....	52

## **5. CONCLUSIONES**

Conclusiones.....	54
-------------------	----

## **APÉNDICES**

### **A. MODELOS DE TURBULENCIA**

A.1 Cierres de segundo orden.....	57
A.2 Modelos de viscosidad turbulenta.....	61
A.3 Modelo $k - \varepsilon$ .....	62

**B. ESQUEMAS DE DISCRETIZACIÓN**

<i>B.1 Esquemas lineales.....</i>	<i>66</i>
<i>    B.1.1 Diferencias desplazadas de primer orden.....</i>	<i>66</i>
<i>    B.1.2 Diferencias centradas.....</i>	<i>66</i>
<i>    B.1.3 Híbrido.....</i>	<i>67</i>

**C. ARCHIVO DE DATOS DE ENTRADA Q1**

<i>    Archivo de datos de entrada Q1.....</i>	<i>68</i>
--	-----------

**D. ARCHIVO GROUND**

<i>    D.1 Cálculo de la temperatura.....</i>	<i>76</i>
<i>    D.2 Cálculo de la densidad.....</i>	<i>77</i>
<i>    D.3 Efecto de la gravedad.....</i>	<i>78</i>
<i>    D.4 Niveles de Radiación.....</i>	<i>79</i>

<b><i>BIBLIOGRAFÍA.....</i></b>	<b><i>81</i></b>
---------------------------------	------------------

# **Capítulo 1**

## **Introducción**

### **1.1 Objetivo de la tesis**

Se estudiará el comportamiento de una llama difusiva de un quemador elevado, localizado dentro de un flujo cruzado de aire, mediante la predicción numérica de sus parámetros aerodinámicos, longitud y ángulo de deflexión.

Con ello, se busca determinar la influencia que tiene el tipo de combustible en tales parámetros. Los combustibles que se usan son el metano, el etano y el propano, que son los principales componentes del flujo de gases que se tienen en los quemadores industriales.

### **1.2 Motivación Social y Ambiental**

En las distintas ramas de la industria, se emplean quemadores o mecheros elevados para eliminar los gases combustibles no deseados, o aquellos cuya recuperación, económicamente, no es rentable. Éstos son producto de la evaporación de combustibles en tanques de almacenamiento, o son gases residuales provenientes de diferentes procesos.

Por razones de seguridad, estos gases son descargados a la atmósfera para evitar su acumulación, que eventualmente puede ser tóxica o explosiva. Empero, el riesgo para el

entorno puede ser igualmente grande. Por estas razones, los gases deben ser quemados antes de ser descargados al medio ambiente. Este proceso se cumple con el uso de mecheros industriales.

Sin embargo, debido a las condiciones climatológicas a las que son expuestas las llamas producidas, la naturaleza de la combustión de gases en estas circunstancias es aleatoria. Entre las principales contingencias está el viento cruzado, que puede ser la razón de la inestabilidad y enfriamiento de la llama, lo que a su vez es causa de eventos indeseables, que van desde la combustión incompleta hasta la extinción de la llama. Existen sistemas de seguridad para prevenir la extinción de las llamas en los mecheros, como es el uso de pilotos de gas o chispas eléctricas, no obstante, las emisiones son muy malas bajo condiciones extremas como ésta.

La combustión incompleta que puede desarrollarse bajo las condiciones de viento cruzado es la causa de emisiones de hidrocarburos sin quemar, los cuales, participan junto con los  $\text{NO}_x$  en la formación de ozono ( $\text{O}_3$ ), después de las reacciones que se dan en la atmósfera bajo condiciones de radiación solar directa. Asimismo, se producen partículas sólidas de carbón, las cuales también son perjudiciales para la salud tanto de la fauna como de la flora. Otro motivo por el cual debe evitarse la combustión incompleta es que produce altos niveles de CO, que es un contaminante tan peligroso, como los mismos hidrocarburos sin quemar.

Por las circunstancias bajo las cuales estos gases son manejados, las llamas que se producen en estos mecheros son, generalmente, del tipo difusivas o premezcladas con bajas concentraciones de aire; en ambos casos la estabilidad de la flama es importante. Las llamas difusivas son aquellas, en las cuales el combustible y el oxidante están separados en la entrada del quemador. En las llamas no difusivas o premezcladas, estos componentes están previamente mezclados a la entrada del quemador.

Existen aún muchas cuestiones sin resolver en lo que respecta al diseño y operación de los mecheros, algunas de las cuales incluyen la capacidad de predecir con exactitud la longitud y trayectoria de la flama, la eficiencia de la combustión y la toxicidad de las emisiones, dado el gran volumen de gas quemado; parámetros de diseño sumamente importantes para los sistemas de quemadores y la infraestructura que los rodea. De modo

que todas estas interrogantes, hacen a este problema de interés en el cuidado de la salud humana y del medio ambiente.

La razón principal para estar interesados en el tamaño y la forma de la llama, es el diseño seguro y eficiente de los sitios de los quemadores. Los excesivos niveles de radiación térmica de la llama hacia la superficie del suelo y hacia las estructuras circundantes e incluso que se entren en contacto, son consideraciones importantes en desarrollo de un diseño seguro. Este interés necesita ser balanceado con los altos costos de la estructura del quemador y en las grandes extensiones de tierra circundantes al quemador, las cuales deben quedar aisladas.

Por lo anterior, el diseño seguro de un quemador, como el abordado en este trabajo, es necesario conocer las características del flujo del fluido y también la interacción del flujo con la cinética química de la reacción. Así pues, se requiere establecer un método, que permita predecir confiablemente la dependencia del tamaño y trayectoria de la llama a partir, en este caso, de la composición del gas combustible y la velocidad del flujo cruzado. Adicionalmente se podrán conocer parámetros como la eficiencia de la combustión de tal manera que se puedan prevenir accidentes y reducir las emisiones dañinas al medio ambiente.

Debido a la dificultad que se presenta al tratar de medir en campo la calidad de las emisiones en estos quemadores industriales, la información publicada se concentra principalmente en experimentos de laboratorio ([4], [15] y [21]), ya que las condiciones climatológicas bajo las que funcionan normalmente los mecheros, dificultan la recolección de muestras de los gases de combustión de manera realista. Por este motivo, los estudios se restringen, principalmente, a experimentos de laboratorio, o a simulación numérica de configuraciones sencillas [5].

El estudio experimental en laboratorio, requiere de un prototipo o de un modelo físico a escala del sistema en cuestión, cuya construcción puede requerir de materiales muy caros, además de que puede requerir un periodo muy grande de tiempo para desarrollarlo. Además, su mantenimiento puede demorar mucho y resultar costoso económicamente. Más aparte, para realizar las mediciones se requieren de métodos fiables no intrusivos, lo que en varias ocasiones es imposible de conseguir en su totalidad.

Por otro lado, los avances actuales en materia de informática, han permitido que el empleo de simulación numérica haya reducido costos, tanto computacionales como en tiempo. Es por ello que este medio, en ocasiones, puede ser más económico que el experimental y en él, se tiene hoy en día una herramienta muy poderosa para este tipo de estudios, pues los resultados obtenidos por este camino, para las principales variables o parámetros, son cada vez más confiables, pues aumenta su exactitud al caso real; sin embargo, en la actualidad su uso es mayormente complementario.

Cabe mencionar, que si en un flujo turbulento se tiene involucrado, además, un proceso de combustión, el análisis numérico de este evento posee la complejidad añadida por la cinética química de la combustión, pues involucra un gran número de reacciones así como de especies, aún para los combustibles más simples.

### **1.3 Estructura de la Tesis**

Posterior a este primer capítulo, en el capítulo 2 se presentan las ecuaciones instantáneas que gobiernan el movimiento del flujo reactivo y a continuación la deducción de las ecuaciones promediadas que se resolverán mediante un método de volúmenes finitos. Estas ecuaciones son: de continuidad, de cantidad de movimiento, de la energía total, de conservación de las especies químicas, así como la ecuación para la fracción de mezcla, que es una propiedad conservada. Por último se presentan los modelos de combustión, radiación y flotación, que permiten el cierre de las anteriores ecuaciones.

La introducción al método de solución por volúmenes finitos se hace en el capítulo 3, el cuál permite resolver las ecuaciones de transporte que describen el flujo reactivo.

En el capítulo 4 se presenta la configuración experimental de la llama simulada, así como los detalles numéricos que se utilizan en el modelo para simular numéricamente este sistema. A continuación, se muestran las predicciones para un caso base y su comparación con datos experimentales. Finalmente, se expone la influencia que los combustibles, metano, etano y propano, tienen en la longitud y trayectoria de una llama.

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

Por último, se incluyen cuatro apéndices. En el apéndice A, se presentan los modelos de turbulencia; los esquemas de discretización se introducen en el apéndice B; en el apéndice C, el archivo de datos de entrada, Q1; por último, el apéndice D contiene la subrutina Ground.

## **Capítulo 2**

### ***Ecuaciones de transporte***

#### **2.1 *Introducción***

En este capítulo se abordan primeramente, las ecuaciones instantáneas de transporte que gobiernan el flujo que se ha estudiado numéricamente en esta tesis. Dicho flujo es turbulento y es una mezcla multicomponente de gases que reaccionan químicamente. Además, la geometría considerada es multidimensional. Las ecuaciones que rigen el flujo son la de continuidad, de cantidad de movimiento, de energía, y especies químicas; éstas se exponen en coordenadas cartesianas.

Posteriormente se introduce la alternativa empleada en este trabajo para la simulación del flujo, que es la Alternativa de Ecuaciones Promediadas (Reynolds o Favre Averaged Navier-Stokes Equations, RANS), que es el promediado temporal de las ecuaciones instantáneas de conservación, mencionadas en el párrafo anterior.

También se presentan los modelos de combustión y flotación; éste último es incluido por la diferencia de densidades que se presenta en el flujo. Además se presenta un modelo de química rápida con un paso de reacción, empleado en esta tesis.

## 2.2 Continuidad

La ecuación de continuidad, que expresa la conservación de masa, puede escribirse como:

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

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

## 2.3 Conservación de cantidad de movimiento

La conservación de cantidad de movimiento del flujo es descrita a través de la ecuación:

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

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

Según la ley de Navier-Poisson el tensor de esfuerzos viscosos es [1]:

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

donde  $\mu$  es la viscosidad molecular de la mezcla,  $\mu_v$  es el coeficiente de viscosidad volumétrico y  $\vec{\delta}$  es el tensor delta de Kronecker. Generalmente, el coeficiente de viscosidad volumétrico  $\mu_v$ , es despreciado [33].

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

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

## 2.4 Conservación de la energía total

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

$$e = u + \frac{1}{2}|\vec{v}|^2 + U \quad (5)$$

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

La ecuación de la energía total es:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[ \rho \left( u + \frac{1}{2}|\vec{v}|^2 + U \right) \right] + \nabla \cdot \left[ \rho \vec{v} \left( u + \frac{1}{2}|\vec{v}|^2 + U \right) \right] = \nabla \cdot (\vec{\tau}' \cdot \vec{v}) - \nabla \cdot (p\vec{v}) - \nabla \cdot \vec{J}_e + \dot{Q}_r \quad (6)$$

donde  $\vec{J}_e$  es el flujo difusivo de calor y  $\dot{Q}_r$  es el intercambio de calor por radiación. En la ecuación (6), los dos primeros términos del lado derecho representan el trabajo de las fuerzas viscosas y de presión.

La entalpía de la mezcla es definida de la siguiente manera:

$$h = u + \frac{p}{\rho} \quad (7)$$

La ecuación de la energía total en términos de la entalpía de la mezcla, es:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[ \rho \left( h + \frac{1}{2}|\vec{v}|^2 + U \right) \right] + \nabla \cdot \left[ \rho \vec{v} \left( h + \frac{1}{2}|\vec{v}|^2 + U \right) \right] = \frac{Dp}{Dt} + \nabla \cdot (\vec{\tau}' \cdot \vec{v}) - \nabla \cdot \vec{J}_h + \dot{Q}_r \quad (8)$$

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

En flujos de baja velocidad, el número de Mach es pequeño ( $Ma \ll 1$ ) y por lo tanto, la energía cinética comparada con la entalpía es despreciable [34].

$$Ma = \bar{v}_o / \sqrt{\gamma R_c T_o},$$

donde  $\gamma$  es la relación entre las capacidades térmicas a presión y a volumen constante.

Pese a que el flujo es de baja velocidad, 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 gradientes de presión extrema, como ondas de choque o detonaciones [33], no siendo así en el caso de análisis en esta tesis.

El número de Eckert,  $Ec = \bar{v}_o^2 / Cp T_o$ , es un indicador de la contribución de la disipación de la energía cinética al nivel total de la entalpía. Cuando  $Ec \ll 1$ , el término  $\Phi_v$  se puede despreciar, como ocurre con los fluidos estudiados en este trabajo. 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 elevadas. Sin embargo, inicialmente no se considera en esta tesis.

## 2.5 Conservación de las especies químicas

Si se tiene una mezcla de  $N$  especies, la fracción másica de una especie química  $\alpha$  es:

$$Y_\alpha = \frac{m_\alpha}{m_T} \quad (9)$$

donde  $m_\alpha$  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 (9), la suma de todas las fracciones másicas de las especies es uno.

$$\sum_{\alpha=1}^N Y_{\alpha} = 1$$

La conservación de la especie  $\alpha$ , se expresa en términos de la fracción másica por la ecuación:

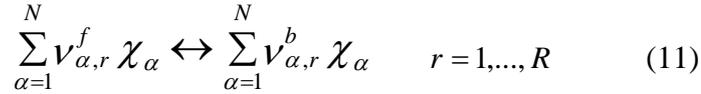
$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_{\alpha}) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} Y_{\alpha}) = -\nabla \cdot \vec{J}_{\alpha} + S_{\alpha}, \quad \alpha = 1, 2, \dots, N \quad (10)$$

donde  $\vec{J}_{\alpha}$  es el flujo difusivo y  $S_{\alpha}$  es la tasa de formación neta de la especie  $\alpha$ .

Para satisfacer la ecuación de continuidad (1), se cumple que  $\sum_{\alpha=1}^N S_{\alpha} = 0$  y  $\sum_{\alpha=1}^N \vec{J}_{\alpha} = 0$ .

El flujo difusivo de la especie  $\alpha$ ,  $\vec{J}_{\alpha}$  se trata más adelante.

Se puede obtener una expresión general para la tasa de reacción química,  $S_{\alpha}$ , si se supone que un sistema químico con R reacciones presenta la siguiente forma general:



donde  $\chi_{\alpha}$  es el símbolo químico de cada especie,  $\nu_{\alpha}$  son los coeficientes estequiométricos, el superíndice  $f$  indica la reacción directa (forward) y  $b$  reacción inversa (backward). Cuando la reacción (11) es elemental, la tasa de producción  $S_{\alpha}$  es:

$$S_{\alpha} = W_{\alpha} \sum_{r=1}^R \underbrace{(\nu_{\alpha,r}^b - \nu_{\alpha,r}^f)}_{\nu_{\alpha,r}} \dot{\omega}_{\alpha,r} \quad \alpha = 1, \dots, N \quad (12)$$

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

$$\dot{\omega}_{\alpha,r} = k_{f,r} \prod_{\alpha=1}^N [X_{\alpha}]^{\nu_{\alpha,r}^f} - k_{b,r} \prod_{\alpha=1}^N [X_{\alpha}]^{\nu_{\alpha,r}^b} \quad (13)$$

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

$$k_{f,r} = A_r T^{b_r} e^{\left(-\frac{E_r}{R_c T}\right)} \quad (14)$$

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

$$k_{b,r} = \frac{k_{f,r}}{k_{e,r}} \quad k_{e,r} = \exp\left(-\frac{\Delta Z^o}{RT}\right) \quad (15)$$

donde  $\Delta Z^o$  es el cambio de energía de Helmholtz en el estado estándar, el cual es:

$$\Delta Z^o = \sum_{\alpha=1}^N (s_{\alpha}^b - s_{\alpha}^f) (U_{\alpha}^o - T_{\alpha} S_{\alpha}^o) \quad (16)$$

donde  $U_{\alpha}^o$ ,  $T_{\alpha}$  y  $S_{\alpha}^o$  son respectivamente, la energía interna, temperatura y la entropía en el estado estándar de la especie  $\alpha$ .

La ecuación (10) puede formularse también en términos de la molalidad,  $n_{\alpha}$  (número de moles por unidad de masa de la mezcla), definida como sigue:

$$n_{\alpha} = Y_{\alpha} / W_{\alpha} \quad (17)$$

## 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:

$$\rho = \frac{1}{\sum_{\alpha=1}^N \frac{Y_{\alpha}}{\rho_{\alpha}}} \quad (18)$$

Si se supone una mezcla de gases ideales:

$$\rho = \frac{p}{RT \sum_{\alpha=1}^N \frac{Y_{\alpha}}{W_{\alpha}}} \quad (19)$$

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

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

donde  $h_{\alpha}$  es la entalpía de cada especie de la mezcla. La entalpía de la especie  $\alpha$  es la suma de las entalpías térmica y química:

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

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

El flujo difusivo,  $\bar{J}_{\alpha}$ , se produce por gradiente de especies, de temperatura (efecto Soret), y de presión [34]. Generalmente, estos dos últimos efectos son despreciados en flujos con combustión ([33] y [34]). El flujo difusivo,  $\bar{J}_{\alpha}$ , se expresa según la ley de Fick, que se escribe como [33]:

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

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

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

donde  $D_\alpha^M$  es el coeficiente de difusión medio de la especie  $\alpha$  en la mezcla de especies.

El coeficiente  $D_\alpha^M$  se puede calcular a partir del coeficiente de difusión binario  $D_{\alpha\beta}$  :

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

El flujo difusivo de calor  $\vec{J}_h$ , se produce por conducción de calor, por el efecto Dufour y por el flujo difusivo de la especie. Estos dos últimos efectos son usualmente despreciables en flujos con combustión ([33] y [34]); por lo tanto el término  $\vec{J}_h$  se expresa con la ley de Fourier:

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

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

El número adimensional de Schmidt de la especie  $\alpha$ ,  $Sc_\alpha$ , se define como:

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

Se puede reescribir el flujo difusivo de la especie  $J_\alpha$ , en términos del número de Schmidt, como sigue:

$$\vec{J}_\alpha = -\Gamma_\alpha \nabla Y_\alpha \quad , \quad \Gamma_\alpha = \frac{\mu}{Sc_\alpha} = \rho D_\alpha \quad (27)$$

Al aplicar las suposiciones anteriores y sustituir las expresiones de flujos difusivos, las ecuaciones de continuidad, cantidad de movimiento, especies químicas y energía se pueden escribir como:

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

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

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

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

Cuando puede suponerse constante el valor  $C_p$ , la ecuación (25) se expresa como:

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

El número de Prandtl, Pr, se define así:

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

En términos del número de Prandtl, la expresión (32) es igual a:

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

## 2.7 Ecuación diferencial homogénea y fracción de mezcla

Es común que en flujos con combustión se haga la suposición de que los coeficientes de difusión de las especies y la entalpía son iguales:

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

El número de Lewis, Le, es definido como:

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

Así pues, 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. Para flujo turbulento, el término de difusividad molecular es frecuentemente despreciable si se compara con el transporte turbulento  $\overline{v''\phi''}_\alpha$ , como es presentado más adelante. Este flujo turbulento frecuentemente se modela como un término de difusión turbulenta con igual coeficiente de difusión para las especies y la entalpía, por lo que la hipótesis de igual difusividad está justificada.

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

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

donde  $\phi_z$  puede ser la especie inerte o la entalpía o la fracción de mezcla. A la ecuación (37) se le denomina ecuación "homogénea", por no tener término fuente ( $S^\alpha$ ).

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

También es posible 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. Así pues, la ecuación (37) también representa estas combinaciones resultantes, que se denominan frecuentemente funciones de acoplamiento [18].

Cuando el sistema en estudio tiene solamente dos condiciones de contorno distintas para estas variables que responden a la ecuación diferencial homogénea, es decir, dos entradas de material, entonces todas las soluciones para esas variables están relacionadas linealmente a través de esas condiciones de contorno:

$$\frac{\phi_z - \phi_{z,2}}{\phi_{z,1} - \phi_{z,2}} = \frac{h - h_2}{h_1 - h_2} \quad (38)$$

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

## 2.8 Promediado de las ecuaciones

El flujo en la mayor parte de los problemas de interés práctico, así como en este trabajo, es turbulento. Una de las características de este tipo de flujos es la variación aleatoria e irregular, tanto en el espacio como en el tiempo, de las propiedades del fluido.

La Simulación Numérica Directa (Direct Numerical Simulation, DNS), la Simulación de Grandes Escalas (Large Eddy Simulation, LES) y la alternativa de Ecuaciones Promediadas (Reynolds Averaged Navier-Stokes Equations, RANS), son básicamente las tres alternativas para simular flujos turbulentos reactivos.

La alternativa de Ecuaciones Promediadas (RANS), usada en esta tesis, es extensamente utilizada en casos prácticos de interés industrial. Consiste en promediar las todas las escalas de las fluctuaciones turbulentas, espaciales y temporales y resolver las ecuaciones de transporte en términos de los valores medios de las variables del sistema. Estas ecuaciones no son cerradas, por lo cual se requieren modelos que reemplacen los términos no cerrados.

Con este método, el transporte turbulento de la cantidad de movimiento, energía o especies químicas, se modela mediante alguno de los llamados modelos de turbulencia, para este caso, el modelo k-ε [17], descrito en el apéndice A.

Si el flujo presenta variaciones en la densidad, se pueden usar dos tipos de promedio. Uno es el promedio de Reynolds, el cual toma a la densidad como constante. El otro es el promedio de Favre, que es ponderado con la densidad ([2] y [8]).

De manera ilustrativa, se representa con el símbolo  $\Phi$  cualquier propiedad transportada, tal como la fracción másica de la especie  $Y_\alpha$ , la entalpía  $h$  y las componentes de la velocidad  $\vec{U}$ . Los valores instantáneos de estas propiedades son escritos en términos de un promedio y una fluctuación turbulenta:

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

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

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

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

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

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

De las definiciones anteriores:

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

Con la definición de los dos promedios se obtiene:

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

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

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

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

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

Si se aplica el promedio de Favre a las ecuaciones instantáneas de continuidad, cantidad de movimiento, energía y especies químicas, se obtienen las siguientes ecuaciones [33]:

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

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

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{Y}_\alpha) + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{v}} \tilde{Y}_\alpha) = \underbrace{\nabla \cdot \bar{\Gamma}_\alpha \nabla \tilde{Y}_\alpha}_I - \underbrace{\nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{v}}'' Y_\alpha'')}_{II} + \bar{S}_\alpha \quad (50)$$

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

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

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

Las ecuaciones anteriores tienen una forma idéntica a las correspondientes ecuaciones instantáneas, con un término adicional  $(u''_i \Phi'')$ , que involucra las fluctuaciones de la

velocidad y el escalar  $\Phi$  y que representa físicamente el transporte convectivo de  $\Phi$  por movimientos turbulentos. En flujos turbulentos, el término de difusión laminar (I), de las ecuaciones anteriores, es generalmente despreciable frente al término de difusión turbulenta (II). Por lo tanto, las ecuaciones (48), (49), (50), (51) y (52) se escriben como:

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

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

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

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

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

Si el flujo es de baja velocidad ( $Ma \ll 1$ ), generalmente se supone que las fluctuaciones de la presión son despreciables [13]. Por lo tanto, los valores medios de la densidad y la tasa de reacción química se pueden expresar como función de una presión de referencia  $p_0$ .

$$\bar{\rho} = p_0 \left( R_c T \sum_{\alpha=1}^N \frac{Y_\alpha}{W_\alpha} \right)^{-1} \quad (58)$$

$$\bar{S}_\alpha(p, \rho, \phi_\alpha) = S_\alpha(p_0, \bar{\rho}, \tilde{\phi}_\alpha) \quad (59)$$

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

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

El tratamiento del término  $\overline{\rho v'' \tilde{\phi}_z''}$ , se puede consultar en Jones et al ([13] y [14]), y Lindstedt et al [18] ( $\tilde{\phi}_z$  puede representar también la fracción másica de las especies si se incluye un término fuente).

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

$$\bar{S}_\alpha = S_\alpha(\tilde{T}, \bar{\rho}, \tilde{\phi}_1, \dots, \tilde{\phi}_N) \quad (60)$$

$$\bar{\rho} = \rho(\tilde{T}, \tilde{\phi}_1, \dots, \tilde{\phi}_N) \quad (61)$$

## 2.9 Modelo de combustión

Una de las principales dificultades que se presentan en la simulación de flujos turbulentos reactivos es la modelización de la tasa de reacción media. Esto se debe al efecto que tienen las fluctuaciones turbulentas en dicha tasa de reacción química, pues ésta 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.

El modelado del término de reacción química, implica a menudo la comparación entre los tiempos característicos asociados a la cinética química y aquéllos asociados a una escala del movimiento turbulento. Por ello, es conveniente referirse a dos casos extremos que limitan el rango de situaciones posibles y, que son, la hipótesis de reacción infinitamente rápida o muy lenta. Estas hipótesis se hacen a partir de dichas comparaciones entre los tiempos característicos de la cinética química  $t_q$ , y de una escala de tiempos de turbulencia (por ejemplo, la escala integral,  $t_l$ ). El número de Damköhler es la relación entre estos tiempos:  $DaKo = t_l / t_q$ . La hipótesis de química rápida implica que  $t_q \ll t_l$  o

$Da \gg 1$  y la de química lenta  $t_c \gg t_l$  o  $Da \ll 1$ . La mayor parte de las reacciones que liberan energía en la combustión pueden considerarse condiciones normales rápidas.

Si se supone que la cinética química es infinitamente rápida ( $Da \gg 1$ ), se puede considerar que la reacción ocurre en una capa delgada que es alabeada, estirada o comprimida y, que sufre convección, debido a transporte turbulento, pero cuya estructura interna no es afectada por la turbulencia. Este tipo de modelos han dado lugar al desarrollo de otros de tipo "mixed is burned" y de "laminar flamelet" [32]. Los primeros ignoran totalmente la cinética química, mientras que los segundos consideran que dentro de la zona de reacción el flujo es laminar. Un modelo del tipo "mixed is burned", utilizado frecuentemente en la simulación de flujos industriales de llamas de difusión, supone que la reacción química procede al paso dictado por la mezcla de reactantes a nivel molecular, este modelo es discutido a mayor detalle posteriormente.

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

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

Por esta razón, esta reacción química se denomina a menudo "pseudo laminar". En combustión, las principales reacciones liberadoras de calor son demasiado rápidas para que esta aproximación sea válida ([21] y [26]).

El modelo a emplear en este caso, es el denominado "sistema de reacción química simple" (SCRS), el cual postula que la combustión procede, sin especies intermedias, de la siguiente manera:



Esta reacción se considera irreversible, esto es, la proporción de la reacción inversa o hacia atrás se supone muy baja. La energía en forma de "calor de combustión", se toma

como independiente de la temperatura; esto implica igualdad de calores específicos de reactantes y productos.

La entalpía de una mezcla de combustible, oxidantes y productos puede tomarse como:

$$h = C_p T + H_x Y_{comb} \quad (63)$$

donde el  $C_p$  es el calor específico,  $T$  es la temperatura absoluta,  $H$  es el calor de combustión y  $Y_{comb}$  es la fracción másica del combustible no quemado.

Las proporciones de las masas del combustible, oxidantes y productos que se relacionan en una reacción son  $1$ ,  $S$  y  $(1+S)$ , respectivamente, donde  $S$  la relación aire-combustible.

Una extensión de la definición de SCRS, a menudo utilizada, es que los coeficientes de difusión de combustible, de oxidante y de producto, son todos iguales entre sí, e iguales a la difusividad del calor; de modo tal que sus números de Prandtl/Schmidt sean iguales (véase apartado 2.6). Esto no está alejado de la realidad para flujos laminares gaseosos y es muy cercano a la realidad para los flujos turbulentos.

Al hacer esta suposición, entonces puede demostrarse que las cantidades siguientes son una "propiedad conservativa del fluido" [14], en el sentido en que el término fuente en las ecuaciones diferenciales que gobiernan su distribución son cero.

✚  $Y_{comb} - Y_{oxid} / S$ , donde:  $Y_{comb}$  es la fracción másica de combustible no quemado, y  $Y_{oxid}$  es la fracción másica de oxígeno no quemado.

✚  $Y_{comb} + Y_{prod} / (1 + S)$ , donde:  $Y_{prod}$  es la fracción másica de productos de la combustión.

Puede demostrarse también que  $(Y_{comb} - Y_{oxid} / S)$  se conserva cuando la difusión no está presente [14]; para la reacción química causada por  $Y_{comb}$  y  $Y_{oxid}$ , ambos disminuyen en proporción de acuerdo a una constante, que es la  $S$ , relación aire-combustible.

La igualdad de coeficientes de difusión asocia que, cuando la ecuación diferencial para la fracción másica del oxidante ( $Y_{oxid}$ ) es dividida por  $S$  y restada de la ecuación para  $Y_{comb}$ , no sólo hace que el término de la fuente desaparezca sino también las variables dependientes sólo aparecen en la forma diferencial de  $Y_{comb} - Y_{oxid} / S$ .

Un argumento similar es establecido para  $Y_{comb} + Y_{prod}$ , el cual puede reconocerse como representación de la fracción másica de material derivado de la corriente de flujo entrante que lleva el combustible.

Esta cantidad es de tal trascendencia, que en ocasiones es utilizada como variable dependiente en cálculos de combustión, llamándose a menudo "fracción de mezcla",  $\phi_z$ .

Si la fracción de mezcla se define como:

$$\phi_z = Y_{comb} + Y_{prod} / (1 + S)$$

se puede deducir la fracción másica del producto como sigue:

$$Y_{prod} = (\phi_z - Y_{comb})(1 + S) \quad (64)$$

De igual manera, la fracción másica de oxidante puede deducirse mediante los términos  $Y_{comb}$  y  $\phi_z$  de la ecuación:

$$Y_{oxid} = (1 - \phi_z) + S(Y_{comb} - \phi_z) \quad (65)$$

Como consecuencia importante de lo anterior, la composición de una reacción de la mezcla se puede describir por dos variables, por ejemplo:

$Y_{comb}$  = la fracción másica de combustible no quemado, y

$\phi_z$  = "fracción de mezcla", es decir, la masa de material que se origina del combustible, por la unidad de masa mezclada, sin tener en cuenta si ésta se quema o no.

La fracción de mezcla a la proporción estequiométrica, S, es:

$$\phi_z = f_{stoich} = 1/(1 + S) \quad (66)$$

En el SCRS, los productos son representados por una sola fracción másica que normalmente representará una mezcla de varias especies químicas.

Las relaciones entre la fracción de la mezcla,  $\phi_z$ , la fracción másica del oxidante y la de los productos, puede mostrarse como sigue:

$$\phi_z < f_{stoich} ; Y_{comb} = 0 \quad (\text{todo el combustible quemado}) \quad (67)$$

$$Y_{oxid} = Y_{oxid0} \left( 1 - \frac{\phi_z}{f_{stoich}} \right) \quad (\text{oxidantes sobrantes}) \quad (68)$$

$$\phi_z > f_{stoich} ; Y_{comb} = \frac{\phi_z - f_{stoich}}{1 - f_{stoich}} \quad (\text{sobrantes de la quema}) \quad (69)$$

$$Y_{oxid} = 0 \quad (\text{todos los oxidantes consumidos}) \quad (70)$$

$$\text{Cualquier } \phi_z ; Y_{dil} = Y_{dil0} (1 - \phi_z) \quad (71)$$

$$Y_{prod} = 1 - Y_{oxid} - Y_{comb} - Y_{dil} \quad (72)$$

donde  $Y_{oxid0}$  y  $Y_{dil0}$  son oxígeno y fracciones de masa diluida a la entrada.

La variable  $\phi_z$ , es determinada en cada una de las celdas mediante esta ecuación de transporte (57). De lo expuesto anteriormente, se puede establecer que la ecuación para  $\phi_z$  no tiene ningún término fuente.

La ecuación para la entalpía,  $h$ , tiene un término fuente que es el resultado de la absorción y emisión de radiación; pero tal variación de energía es muy pequeña, de modo que puede ser despreciada. Por consiguiente, en este trabajo se desprecia la radiación. Esto permite calcular la temperatura, deduciéndola con la entalpía mediante:

$$T = \frac{h - Y_{comb} \times H}{C_p} \quad (73)$$

donde el calor específico de la mezcla es calculado a partir del calor específico de las especies individuales.

## 2.10 Modelo de radiación de calor

En el cálculo de los parámetros numéricos de una llama, la temperatura es el único de éstos que indica la presencia de la llama. Sin embargo, parte de los contornos de temperatura corresponden a gases calientes. Por consiguiente, la comparación con sus correspondientes parámetros experimentales puede resultar complicada, ya que por este medio, la presencia de una llama se determina a través de mediciones de luminosidad del sistema de interés y, de ahí, se obtienen los parámetros experimentales.

Para este trabajo, se propone calcular la presencia de la llama a partir de su energía radiante. El modelo usado calcula la radiación a partir de especies "luminosas" como el  $\text{CO}_2$  y  $\text{H}_2\text{O}$ .

Dicho modelo de radiación considera la hipótesis de llama ópticamente delgada (absorción del gas despreciable) y desprecia el efecto de la dispersión. Por lo tanto, el flujo de calor por radiación se puede escribir como ([6] y [24]):

$$q_{rad} = -4\sigma K_p (T^4 - T_\infty^4) \quad (74)$$

donde  $\sigma$  es la constante de Stefan-Boltzmann ( $5.67 \times 10^{-8} \text{ Wm}^{-2}\text{K}^{-4}$ ) y  $K_p$  es el coeficiente de absorción medio de Planck. El coeficiente  $K_p$  es [6]:

$$K_p = X_{CO_2} K_{p,CO_2}(T) + X_{H_2O} K_{p,H_2O}(T) \quad (75)$$

donde  $K_{p,CO_2}$  y  $K_{p,H_2O}$  son los coeficientes de absorción del  $CO_2$  y  $H_2O$ , [6].

## 2.11 Modelo de flotación

El siguiente término fuente permite considerar la flotación, el cual se incluye en la ecuación de cantidad de movimiento:

$$F = (\rho - \rho_{ref}) * g \quad (76)$$

en donde  $\rho_{ref}$  es una constante.

## 2.12 Condiciones iniciales

Para realizar las simulaciones numéricas, se consideraron las condiciones iniciales mostradas en la tabla 1, para el caso base, con propano.

Dado que el sistema a simular está en estado permanente, dichas condiciones no muestran una influencia importante en la convergencia de la solución de las ecuaciones que gobiernan el movimiento del flujo (ecuaciones (53)-(57)).

**Tabla 1: Condiciones iniciales y de frontera**

Presión [Pa]		0.01
Velocidad [m/s]	u	0.8
	v	0.0
	w	0.01
Densidad [kg/m <sup>3</sup> ]		1.7466
Temperatura [K]		303
Energía cinética turbulenta [J/kg]		0.001
Tasa de disipación de la energía cinética turbulenta [J/kg s]		0.01
Fracción de mezcla [ ]		0.0

## *Capítulo 3*

### **Método de Solución**

El método de volúmenes finitos, permite dar solución a las ecuaciones presentadas en el capítulo anterior, las cuales representan la aerodinámica del flujo medio reactivo. Por ello, en este capítulo se presenta dicho método de solución.

#### **3.1 Método de volúmenes finitos**

Mediante una ecuación general, se pueden representar las ecuaciones medias de continuidad, cantidad de movimiento y del modelo de turbulencia, donde la variable dependiente está representada por  $\tilde{\phi}$  :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{\phi}) + \nabla \cdot (\bar{\rho}\tilde{u}_i\tilde{\phi}) - \nabla \cdot (\Gamma_\phi \nabla \tilde{\phi}) = \bar{S}_\phi \quad (77)$$

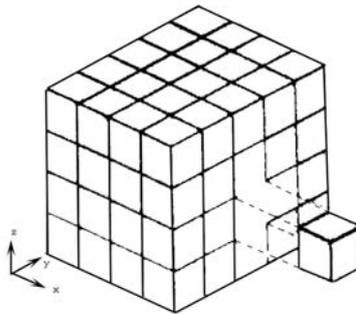
Donde  $\Gamma_\phi$  es el coeficiente de difusión y  $\bar{S}_\phi$  es el término fuente. Los términos del lado izquierdo de la ecuación (77) son el término transitorio, convectivo y difusivo, respectivamente. Los términos  $\Gamma_\phi$  y  $\bar{S}_\phi$  están especificados para cada variable  $\tilde{\phi}$  . En el caso de la ecuación de continuidad,  $\tilde{\phi} = 1$  .

Esta ecuación general (77), se puede discretizar con el método de volúmenes finitos. Con este método, el dominio se divide en pequeños volúmenes de control (figura 1), asociando

a cada uno de ellos un punto nodal. De manera similar, se discretiza el tiempo en intervalos temporales. La ecuación diferencial resultante, 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:

$$a_p \tilde{\phi}_p = \sum_{i,I=E,W,N,S,H,L} a_i \tilde{\phi}_i + a_T \tilde{\phi}_T + B \quad (78)$$

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 (78) puede consultarse en ([9] y [23]), así como en un gran número de textos de dinámica de fluidos computacional.



**Figura 1.** Representación del sistema discretizado en volúmenes finitos.

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

En la figura 2, se muestra la notación de la celda y de sus vecinas. Dada una celda P, sus vecinas se nombrarán 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 nombran con la misma nomenclatura, pero con letras minúsculas. A su vez, 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.

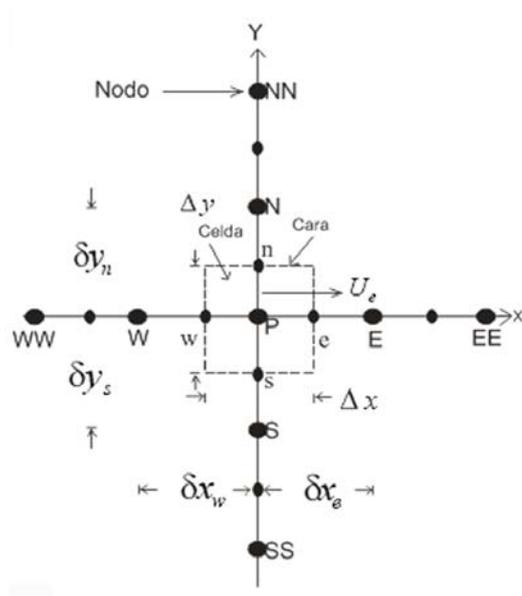


Figura 2. Diagrama esquemático de un volumen de control bidimensional.

A continuación, se presentan los términos de la ecuación discretizada (78).

Definiendo tres expresiones mediante los símbolos  $F$ ,  $D$ , y  $Pe$  como:

$$F = \bar{\rho} \bar{v}_i, \quad D = \frac{\Gamma}{\delta_i}, \quad Pe = \frac{F}{D} \quad (79)$$

Donde  $\bar{v}_i$  es la velocidad en la cara  $i$ ,  $\delta_i$  es la distancia entre los nodos que incluyen la cara  $i$  y  $Pe$  es de número de Peclet, que es una razón entre la convección y la difusión.

Las expresiones  $F$  y  $D$  representan el efecto de los términos convectivo y difusivo, respectivamente, de la ecuación de transporte (77).

Los coeficientes  $a_i$  de la ecuación (78) son:

$$a_i = D_i f(|Pe|_i) + \max(-F_i, 0) \quad (80)$$

Los valores  $F$  y  $D$  en la cara de la celda de la ecuación (80) son:

$$F_i = (\bar{\rho} \tilde{v})_i \Delta_i \quad D_i = \frac{\Gamma_i \Delta_i}{(\tilde{\delta})}, \quad i=n, s, e, w \quad (81)$$

donde  $\Delta_i$  es la longitud de la cara  $i$ .

Para determinar  $F_i$  se necesita conocer  $\bar{\rho}$  y  $\tilde{u}_i$  en la cara de la celda. El cálculo del término convectivo de la ecuación de transporte (1) requiere también el conocimiento de la variable escalar,  $\tilde{\phi}$ , en la cara de la celda. La velocidad  $\tilde{v}_i$  está calculada en la cara de la malla escalonada; pero  $\tilde{\rho}$  y  $\tilde{\phi}$  están calculados en el nodo y necesitan ser interpolados a la cara para calcular los coeficientes  $a_i$  de la ecuación discretizada (78).

La obtención de estas variables en la cara de la celda es importante para la precisión y convergencia de la solución. El cálculo de  $\tilde{\rho}$  y  $\tilde{\phi}_i$  da lugar a los llamados esquemas de discretización. La función  $f(|Pe|)$  de la ecuación (80) depende del esquema de interpolación; por ejemplo, en el esquema de diferencias desplazadas,  $f(|Pe|) = 1$ . Para el sistema híbrido [23]:

$$f(|Pe|) = \max(0.1 - 0.5|Pe|) \quad (82)$$

En el apéndice B se presentan estos esquemas de discretización lineales con más detalle, pues son los que se utilizarán en esta tesis en la discretización del término

convectivo de las ecuaciones de cantidad movimiento, energía, especies químicas y modelo de turbulencia.

El coeficiente para el término transitorio es:

$$a_T = \frac{\bar{\rho}_T \Delta x \Delta y}{\Delta t} \quad (83)$$

Para el cálculo del término  $D_i$  (81) se necesita obtener el coeficiente de difusión,  $\Gamma$ , en la cara de la celda. El coeficiente  $\Gamma$  no es necesariamente una constante, probablemente puede ser función de valores variables que se conocen en los nodos (por ejemplo la temperatura) y por tanto es necesario interpolarlo en la cara. Esta interpolación puede ser aritmética o armónica. Como ejemplo, para la cara e, estas interpolaciones son:

$$\Gamma_e = \frac{\Delta x (\Gamma_P + \Gamma_E)}{2 \delta x_e} \quad \Gamma_e = \frac{2 \delta x_e}{\Delta x \left( \frac{1}{\Gamma_P} + \frac{1}{\Gamma_E} \right)} \quad (84)$$

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

$$\bar{S}_\phi = \bar{S}_{\phi,c} + \bar{S}_{\phi,v} \tilde{\phi}_P \quad (85)$$

donde el término  $\bar{S}_{\phi,v}$  se elige de acuerdo a la relación existente entre  $\bar{S}_\phi$  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 (78) son:

$$B = \bar{S}_{\phi,c} \Delta x \Delta y + a_T \tilde{\phi}_T \quad (86)$$

$$a_p = a_e + a_w + a_n + a_s + a_T - \bar{S}_{\phi,v} \Delta x \Delta y \quad (87)$$

La ecuación (78) se aplica en cada celda del dominio, para cada  $\bar{\phi}$  y para cada paso temporal  $\Delta t$ , 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 las 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), ([22], [23] y [29]). El algoritmo utilizado en esta tesis para resolver el problema de acoplamiento velocidad-presión pertenece a esta familia.

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

Para procurar acelerar esta convergencia, se utiliza un método de relajación de algunas de las variables dependientes y propiedades. Se emplean dos tipos de relajación: la inercial y la lineal. La relajación inercial se emplea para las velocidades y los parámetros de turbulencia, y aumenta la diagonal de la matriz de coeficientes el agregar a la ecuación de cualquier variable  $\tilde{\phi}$ , el término fuente:

$$\bar{S}_{\phi,r} = \frac{\bar{\rho}V_P}{\Delta t_f} (\tilde{\phi}_P^{(n-1)} - \tilde{\phi}_P^{(n)}) \quad (88)$$

donde  $V_P$  es el volumen de la celda  $P$ ,  $\Delta t_f$  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:

$$\tilde{\phi}_P^{(n)} = \alpha \tilde{\phi}_P^{sol} + (1 - \alpha) \tilde{\phi}_P^{(n-1)} \quad (89)$$

donde  $\alpha$  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  $\alpha$ , 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 este trabajo, se usa el código de Dinámica de Fluidos Computacional, PHOENICS [19], para resolver las ecuaciones que describen la aerodinámica del flujo, recordando que son, la de continuidad, de cantidad de movimiento, de energía, de especies químicas y de turbulencia.



## **Capítulo 4**

### ***Predicción numérica de la llama en flujo cruzado***

#### **4.1 Introducción**

Parte importante del estudio en esta tesis es determinar la influencia que el tipo de combustible tiene en la aerodinámica de la llama. Por este motivo, se emplearon como combustibles el metano, el etano y el propano. Sin embargo, el propano se toma como caso base por ser el combustible empleado en el estudio experimental realizado por Majeski et al. [21] y en el cuál se apoya esta tesis para validar el modelo numérico, pues es para esta llama que se tienen datos experimentales.

Además, en este apartado se detallan brevemente las características y los procedimientos llevados a cabo tanto experimental como numéricamente, para poder determinar las longitudes y trayectorias de la llama. También se abordan los parámetros más importantes de ambas partes y las consideraciones tomadas.

#### **4.2 Configuración experimental**

Durante varios años se han realizado estudios de manera experimental sobre llamas turbulentas expuestas a una corriente horizontal de aire ([3], [4], [10], [11], [12], [15] y [25]). Para entender lo realizado en la simulación numérica, se describe la

configuración experimental. Esta consiste de un tubo de sección transversal circular, cuyos diámetros externo e interno son, respectivamente, 24.7 y 22.1 [mm]; la longitud de éste es variable entre 25 y 78 [cm], lo que permite posicionar la descarga de combustible y por tanto a la llama misma, dentro de la región de velocidad uniforme del flujo cruzado y, evitando de esta manera, que la capa límite del piso o del techo del túnel de viento afecten a la descarga de combustible. El flujo cruzado en la sección de prueba es uniforme con menos del 1% de turbulencia. Un generador de turbulencia es colocado en la sección de descarga del flujo de combustible para asegurar la turbulencia del mismo.

La velocidad del combustible es de 1 [m/s] y el rango de velocidades del flujo cruzado es de 0.8 a 12.0 [m/s].

Un diagrama esquemático de la configuración experimental se presenta en la figura 3.

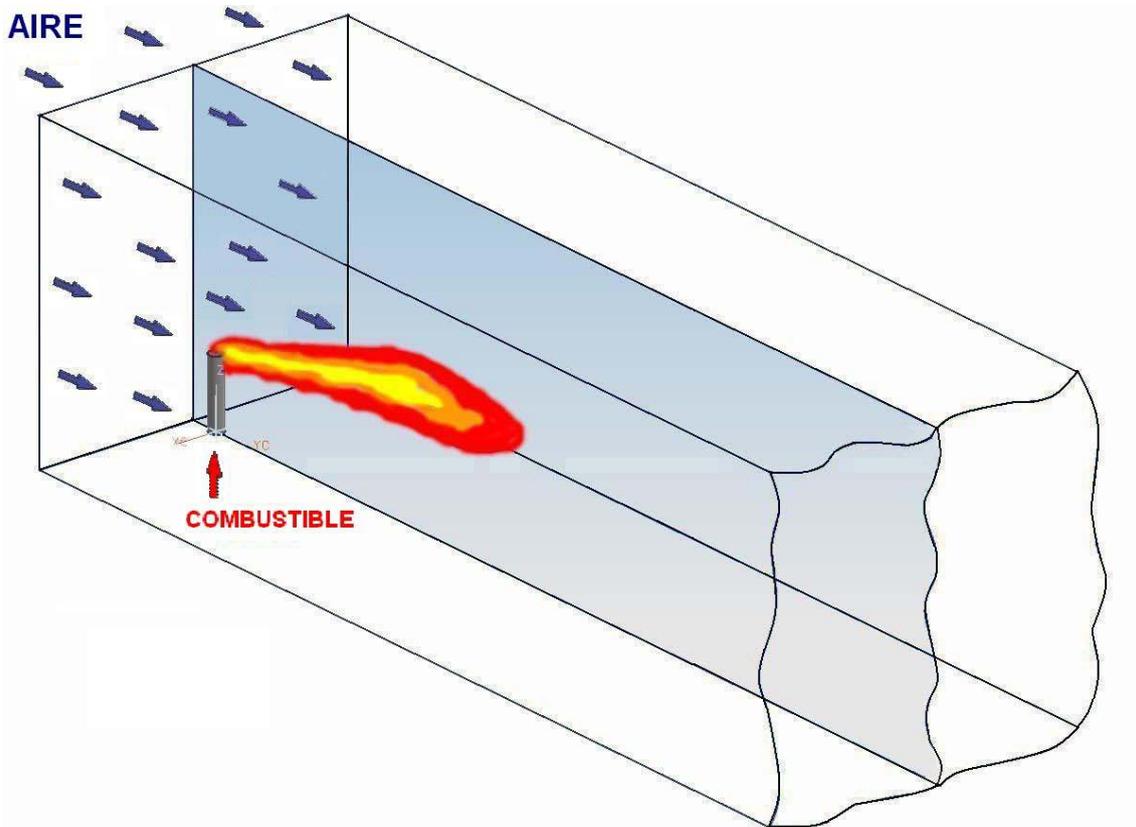


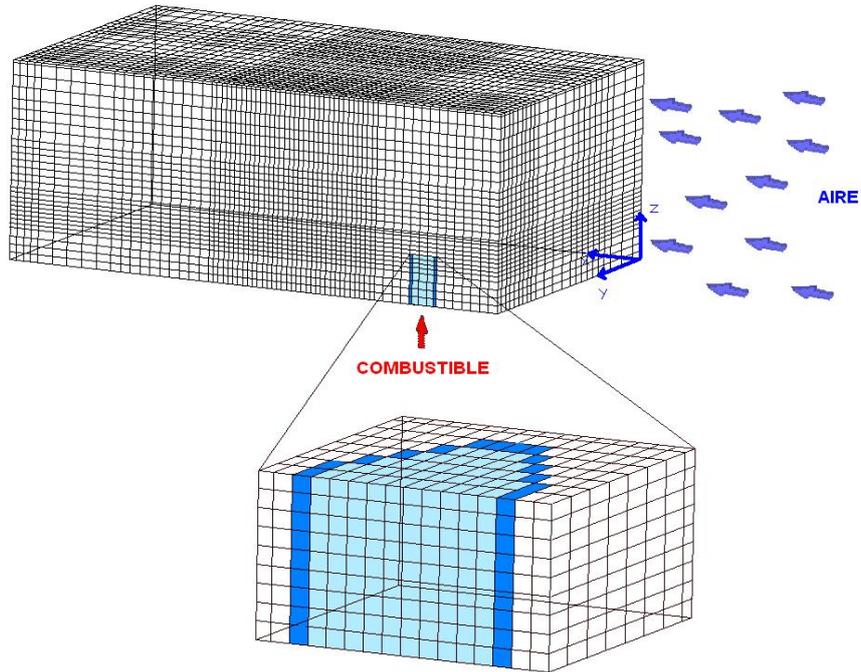
Figura 3. Representación Esquemática del Experimento.

El experimento realizado por Majeski et al. [21] se realizó en un túnel de viento con una sección transversal de prueba de 1.2 [m] de alto por 2.4 [m] de ancho. En uno de los costados del túnel se tiene una ventana de vidrio (0.91 [m] x 2.1 [m]) para permitir una visualización de la llama aguas abajo de la salida del chorro.

Empleando una cámara de video se filmó la llama luminosa, con el fin de obtener imágenes instantáneas de la misma. Del procesamiento de dichas imágenes se obtuvieron imágenes medias, que fueron empleadas para determinar las características medias de la llama; éstas son la longitud y el ángulo de deflexión.

### **4.3 Detalles numéricos**

La simulación numérica de la llama se realiza mediante la discretización del sistema, empleando mallas cartesianas en tres dimensiones. Dado que tanto el tubo como la llama presentan simetría respecto de un plano paralelo al XZ y, con fines de ahorro en memoria y tiempo de cálculo, el dominio de la simulación es la mitad del quemador. El dominio de cálculo fue discretizado con una malla de 160x70x80 en las direcciones x, y y z, respectivamente, como se aprecia en la figura 4; además, se puede observar la pared del quemador en la zona de la descarga de combustible hecha a partir de celdas. Pruebas realizadas reafinando el dominio, mostraron que los resultados son independientes del número de celdas.



**Figura 4.** Representación esquemática de la discretización del dominio de la simulación. Las celdas en tono oscuro representan la pared del quemador, mientras que las celdas en tono claro representan el interior del mismo.

Las ecuaciones de la aerodinámica son resueltas usando un método de volúmenes finitos, con un algoritmo del tipo SIMPLE [27] para resolver el acoplamiento presión-velocidad. La discretización del término convectivo de las ecuaciones de transporte se hace con el esquema de discretización híbrido [27]. La velocidad de salida del combustible se fijó en 1 m/s y la velocidad del flujo cruzado se varió desde 0.8 [m/s] hasta 12 [m/s]. Los combustibles que se usaron en la simulación, cada uno por separado se muestran en la tabla 2.

**Tabla 2.**

TIPO DE COMBUSTIBLE	RELACIÓN AIRE-COMBUSTIBLE, $\left[ \frac{kg_{aire}}{kg_{combustible}} \right]$	DENSIDAD, $\left[ \frac{kg}{m^3} \right]$
Metano	17,2550	0.6359
Etano	16,1047	1.1909
Propano	15,6864	1.7466

#### 4.4 Resultados y discusión

Como se mencionó en la introducción de éste capítulo, el propano fue tomado como caso base. Así pues, se exponen a continuación los resultados obtenidos para dicho combustible, de modo tal que se presentan comparaciones entre las predicciones y los datos experimentales disponibles, primero cualitativamente y ya después cuantitativamente, en términos de longitud y ángulo de deflexión de la llama.

Particularmente en este estudio, dichos parámetros de la llama fueron estimados a través de los niveles de radiación alcanzados con el modelo explicado en el apartado 2.9; pues es importante señalar que parte de los gases calientes de la flama son invisibles, por eso es que se define mejor la llama a través de contornos obtenidos a partir de propiedades de radiación en vez de utilizar patrones de temperatura. La figura 5 se presenta como un ejemplo de los contornos de radiación predichos, a los cuáles se les asigna el símbolo WWRA.

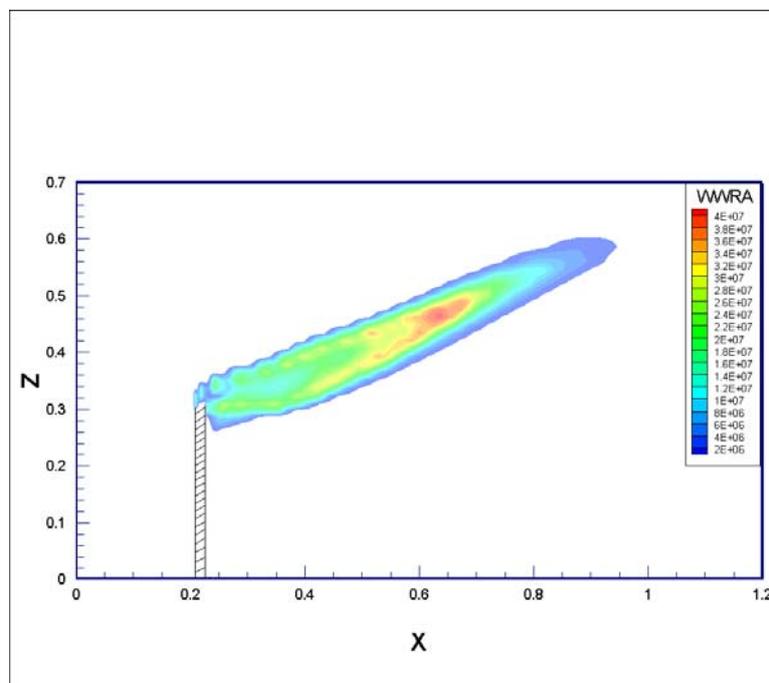
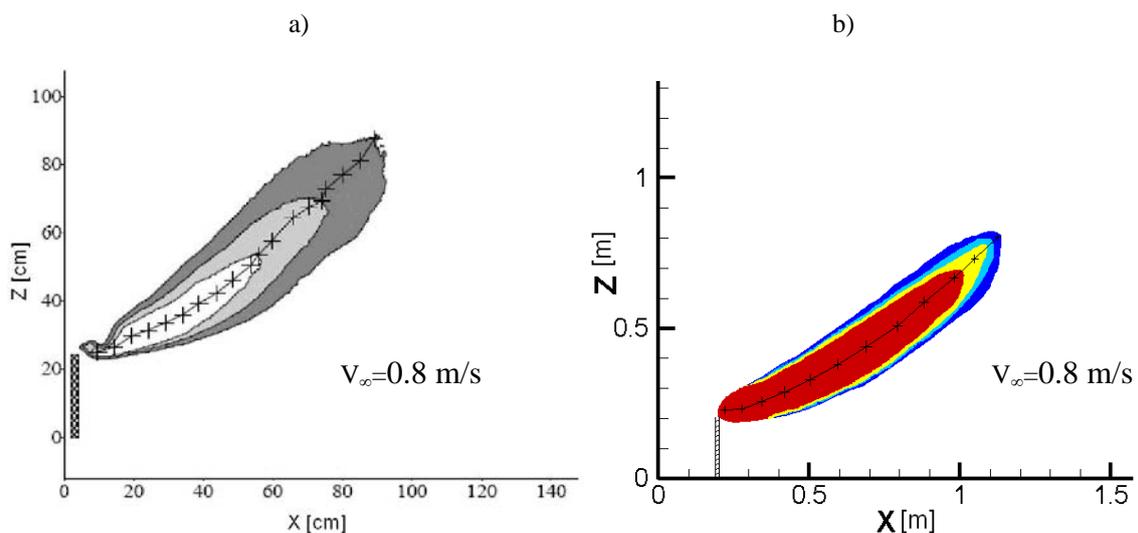


Figura 5. Predicción de los niveles de radiación para el propano, con  $V_{\infty} = 2$  [m/s].

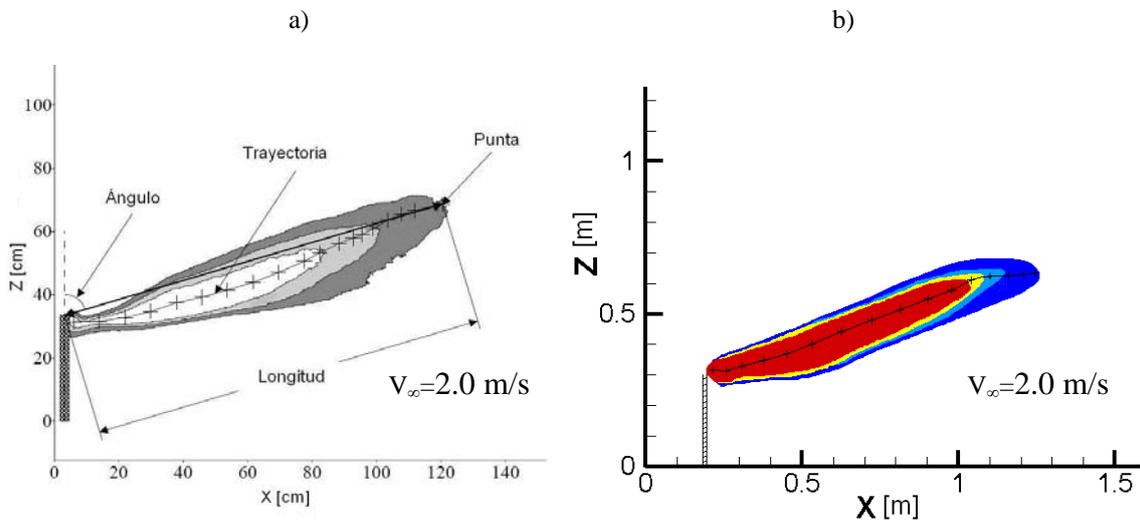
Las simulaciones se realizaron dejando fija la velocidad de salida del chorro de combustible, en 1 [m/s], mientras que la velocidad del flujo cruzado se varió en un rango de 0.8 a 12 [m/s]. Para facilitar el análisis de los resultados de las simulaciones, se graficaron los valores de longitud y ángulo de la flama, con respecto al cociente de velocidades  $V_j/V_\infty$ , donde  $V_j$  es la velocidad de descarga del flujo de combustible y  $V_\infty$  es la velocidad del flujo cruzado. Cabe señalar además, que la longitud de la llama se midió considerando ésta como la distancia desde el centro de la circunferencia del quemador hasta la punta de la cola de la flama. Y el ángulo medio de la flama, es el comprendido entre la vertical y la línea que pasa por los puntos coordenados antes mencionados. Mientras que la trayectoria de la llama es la línea central de los contornos de temperatura o de radiación.

#### 4.4.1 Resultados del caso base. Análisis y comparación con los datos experimentales.

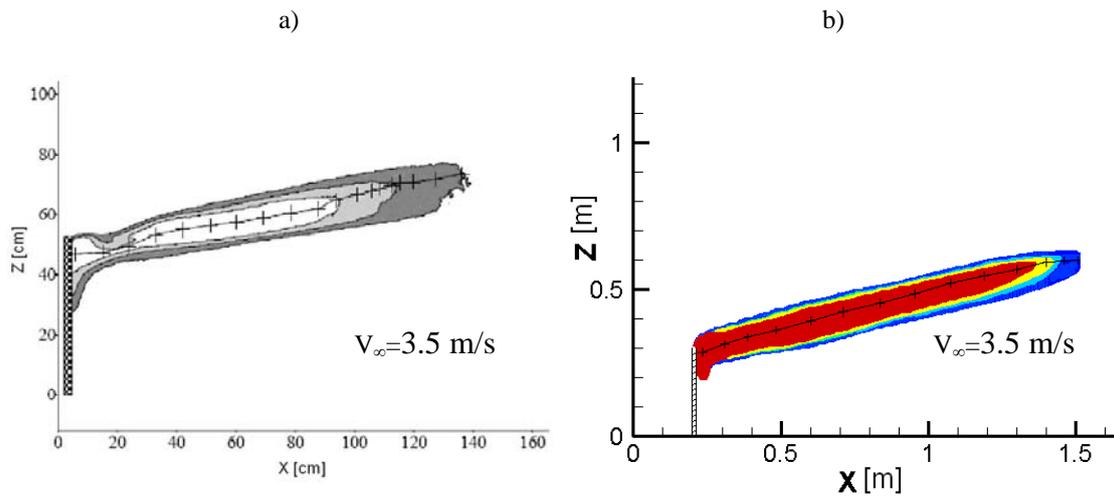
Al igual que lo establece Majeski et al [21], se observan 3 distintos tipos de trayectorias en las formas de las llamas [31], que pueden ser observadas para velocidades en el flujo cruzado de 0.8 [m/s], 2.0 [m/s] y 3.5 [m/s] y se muestran en las figuras 6, 7 y 8.



**Figura 6.** Perfil de la trayectoria media de la llama a 1 m/s en la velocidad del combustible y velocidad en el flujo cruzado de 0.8 [m/s]. a). Experimento [3] y b). Modelo numérico.



**Figura 7.** Perfil de la trayectoria media de la llama a 1 m/s en la velocidad del combustible y y velocidad en el flujo cruzado de 2.0 [m/s]. a). Experimento [3] y b). Modelo numérico.



**Figura 8.** Perfil de la trayectoria media de la llama a 1 m/s en la velocidad del combustible y y velocidad en el flujo cruzado de 3.5 [m/s]. a). Experimento [3] y b). Modelo numérico.

Los diferentes tipos de trayectoria son el resultado del equilibrio entre las fuerzas de flotación de los gases calientes producto de la combustión, la cantidad de movimiento de éstos y la cantidad de movimiento del flujo cruzado. Esto debido a que una vez que el flujo cruzado alcanza a la descarga de combustible, éste brinda el oxígeno necesario para que se lleve a cabo la combustión y a su vez también le transfiere cantidad de movimiento.

A bajas velocidades del flujo cruzado, o relaciones de velocidad  $V_j/V_\infty$  mayores a 1.25 (donde  $V_j$  es la velocidad de salida de la descarga de propano y  $V_\infty$  es la velocidad del flujo cruzado), la llama se ubica completamente por encima del tubo de descarga de combustible con una curvatura hacia arriba como resultado del dominio de las fuerzas de flotación sobre la cantidad de movimiento del flujo cruzado.

El incremento en la velocidad del flujo cruzado (es decir,  $V_j/V_\infty < 0.5$ ), a parte de inducir el aumento en el ángulo de la llama, también genera una zona de recirculación o estela detrás del tubo de descarga, en donde es atrapado y quemado parte del flujo de combustible. Esto ocasiona que la trayectoria de la llama en un principio se curve hacia arriba, pues las fuerzas de flotación de los gases producto de la combustión, generados en ésta zona, producen la tendencia hacia arriba de la llama, en cuanto éstos abandonan la zona de recirculación. Ya después, la trayectoria de la llama tiende a ser paralela con la dirección del flujo, debido a que en su extremo, las fuerzas de flotación no son lo suficientemente capaces para continuar con la tendencia hacia arriba.

Un incremento adicional en la velocidad del flujo cruzado (relaciones de velocidad  $V_j/V_\infty < 0.29$ ) origina que la cantidad de movimiento del flujo cruzado predomine sobre las fuerzas de flotación de la llama, por tal hecho ésta permanecerá prácticamente horizontal. Además de que causa que la región de recirculación formada detrás del mechero atrape más flujo de combustible y sea quemado en dicha zona.

En estos tres casos simulados, se presenta un comportamiento de la trayectoria de la llama similar a la correspondiente parte experimental (figuras 6, 7 y 8).

#### **4.4.1.1 Longitud de la Llama**

La longitud media de la llama de la parte experimental, así como las predicciones, se muestran en la figura 9, como función de la relación de velocidades  $V_j/V_\infty$ . Ahí se aprecia el comportamiento similar de las predicciones con los datos experimentales.

Al aumentar la velocidad del flujo cruzado, desde una condición próxima al reposo, se produce un incremento en la longitud de la llama hasta llegar a un máximo en aproximadamente  $V_j/V_\infty \approx 0.2$ .

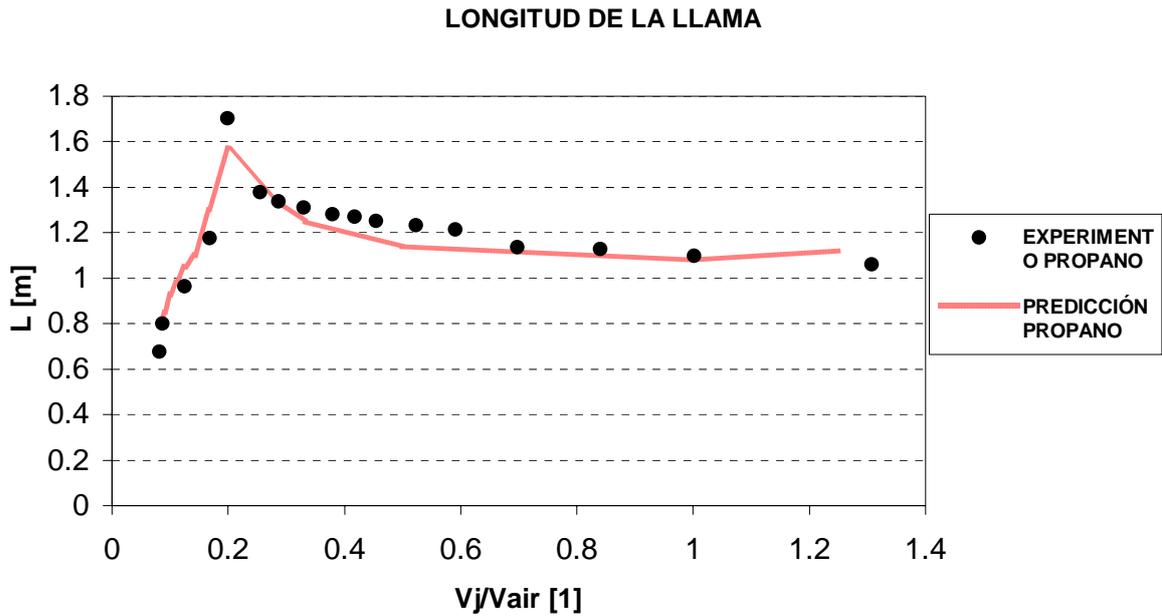
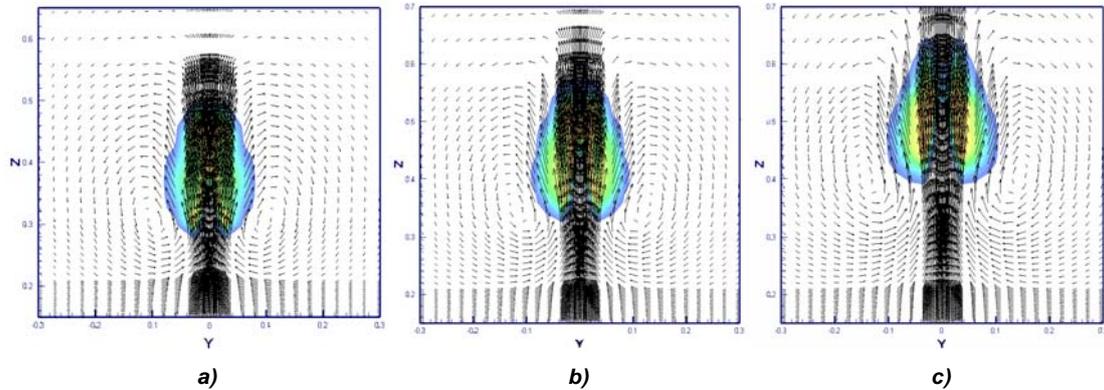
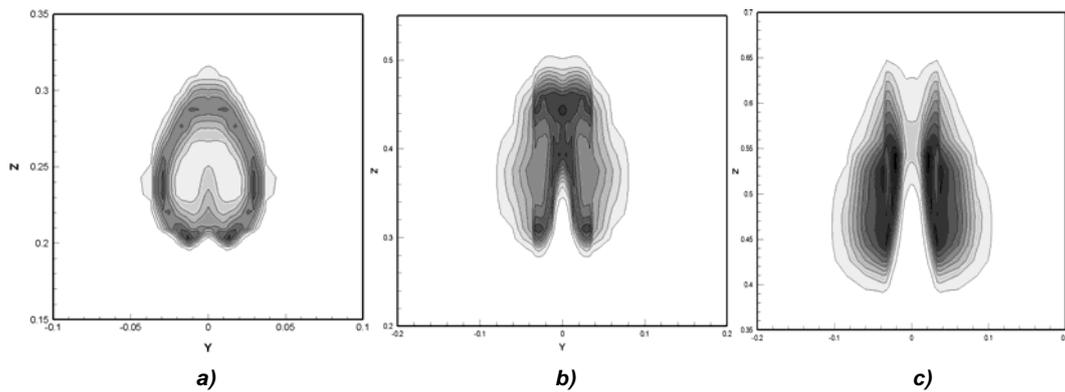


Figura 9. Longitud de llama con respecto a la relación de velocidades  $V_j/V_\infty$ .

Después, si se continúa incrementando esta velocidad, la longitud de la llama disminuye. Este comportamiento puede ser originado por el hecho de que conforme se incrementa la velocidad del flujo cruzado, se generan, con mayor intensidad, 2 vórtices medios en el interior de la llama (figura 10), los cuales introducen aire circundante de la parte posterior de la misma hacia su interior [30], obteniéndose una vista con forma de riñón, del corte transversal de la llama, como se muestra en la figura 12. Sólo una fracción del aire arrastrado por los vórtices es utilizado en la combustión. Sin embargo, si la tasa de entrada de este aire es muy grande, cuando se tienen velocidades de flujo cruzado demasiado elevadas, la inestabilidad de la llama puede provocar su desprendimiento del quemador y que ocurran caídas de temperatura a lo largo de ella, que se traduce en su enfriamiento. De ahí que se presente la disminución en tamaño de la llama, combustión incompleta y/o extinción.



**Figura 10.** Representación del corte transversal de la llama, con  $V_{\infty}=0.8$  [m/s], mostrando la presencia de un vórtice a cada lado de la llama y a lo largo de la misma. a)  $x=0.079$  b)  $x=0.379$  y c)  $x=0.579$ .

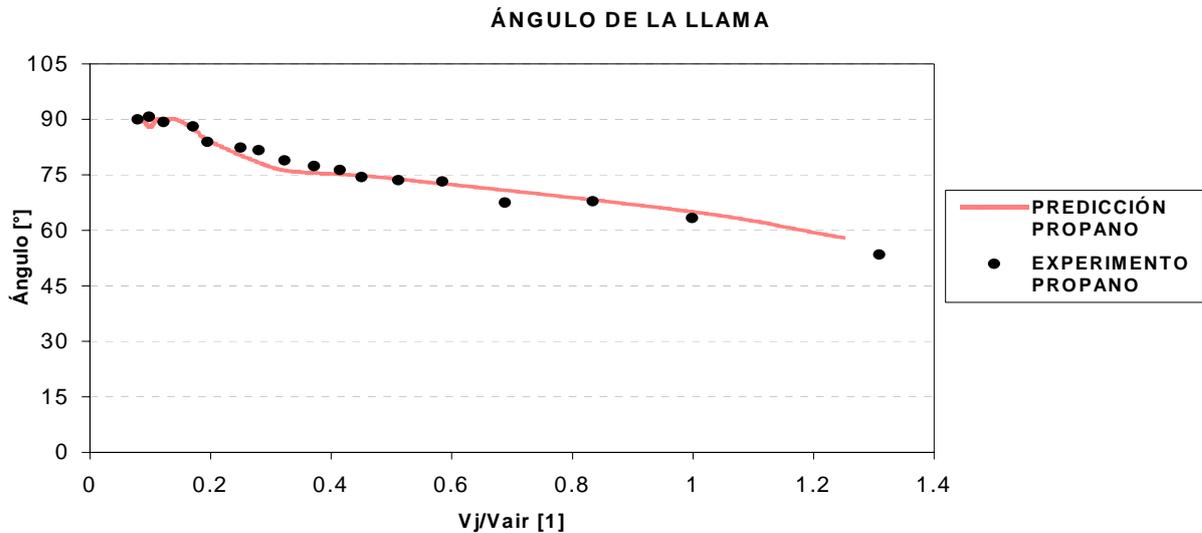


**Figura 11.** Representación del corte transversal de la llama, para  $V_{\infty}=0.8$  [m/s], mostrando la formación de los perfiles de riñón, a lo largo de la llama, debidos a la presencia de los vórtices mostrados en la figura 10. a)  $x=0.079$  b)  $x=0.379$  y c)  $x=0.579$ .

Las diferencias entre la parte experimental y su contraparte numérica podrían deberse, al estado no estacionario asociado a todo flujo turbulento, que la aproximación de ecuaciones promediadas no representa del todo bien, sin olvidar que el fenómeno complejo de la combustión se está representando mediante un modelo sencillo de 1 paso de reacción.

#### 4.4.1.2 Ángulo de la llama

En la figura 12 se presenta el ángulo de deflexión medio de la llama como función de la relación de velocidades  $V_j/V_\infty$ . Este ángulo, como se mencionó anteriormente, es medido con respecto a la vertical, como se muestra en la Figura 7. Un incremento uniforme en el ángulo de la llama se produce cuando se incrementa la velocidad en el flujo cruzado. A diferencia de la Figura 9, en esta gráfica no se presenta una transición brusca entre los casos en los cuales las llamas están por arriba del tubo de descarga y dentro de la zona de recirculación que se genera después del mismo. Las comparaciones realizadas entre los datos experimentales y las predicciones muestran que este parámetro se predice adecuadamente.



**Figura 12.** Ángulo de deflexión de llama con respecto a la relación de velocidades  $V_j/V_\infty$ .

#### 4.4.2 Análisis del efecto del tipo de combustible (metano, etano y propano)

Las llamas con los otros dos combustibles, metano y etano, presentan un comportamiento similar al observado en el caso del propano. No obstante, esto no quiere decir que la influencia de sus propiedades no sea relevante, pues los resultados muestran que a pesar que las tres llamas tienen el mismo gasto volumétrico de descarga, se presentan algunas diferencias de consideración.

##### 4.4.2.1 Longitud de la llama

La variación de la longitud de la llama visible con la velocidad del flujo cruzado es mostrada, en la figura 13, para los tres distintos combustibles de las simulaciones numéricas y para el propano, en la parte experimental. Después, de alcanzado un máximo en la longitud de la llama, si se continúa incrementando esta velocidad, la longitud de la llama disminuye.

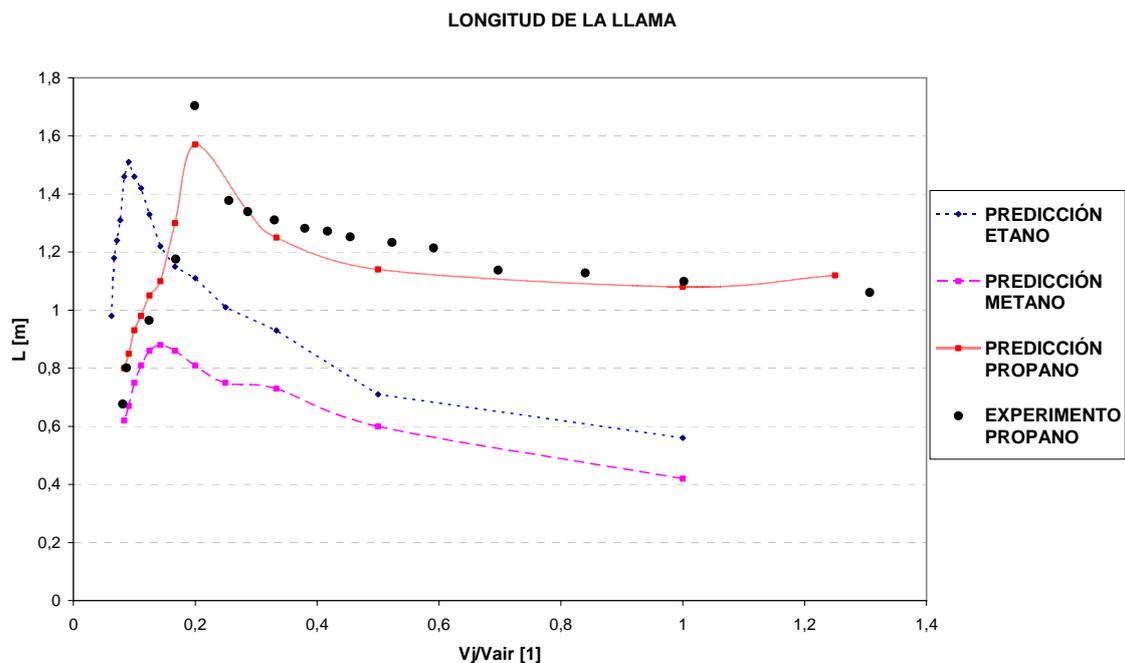


Figura 13. Longitud de llama con respecto a la relación de velocidades  $V_j/V_{air}$ .

La longitud de la llama es distinta, principalmente por la diferencia de densidades en los combustibles, que produce una diferente cantidad de movimiento en el flujo y por lo tanto, la penetración que cada una de las llamas tendrá en el flujo cruzado será distinta. La llama de propano es más grande que la de etano, mientras que la llama de metano es la más pequeña, para todas las velocidades del flujo cruzado.

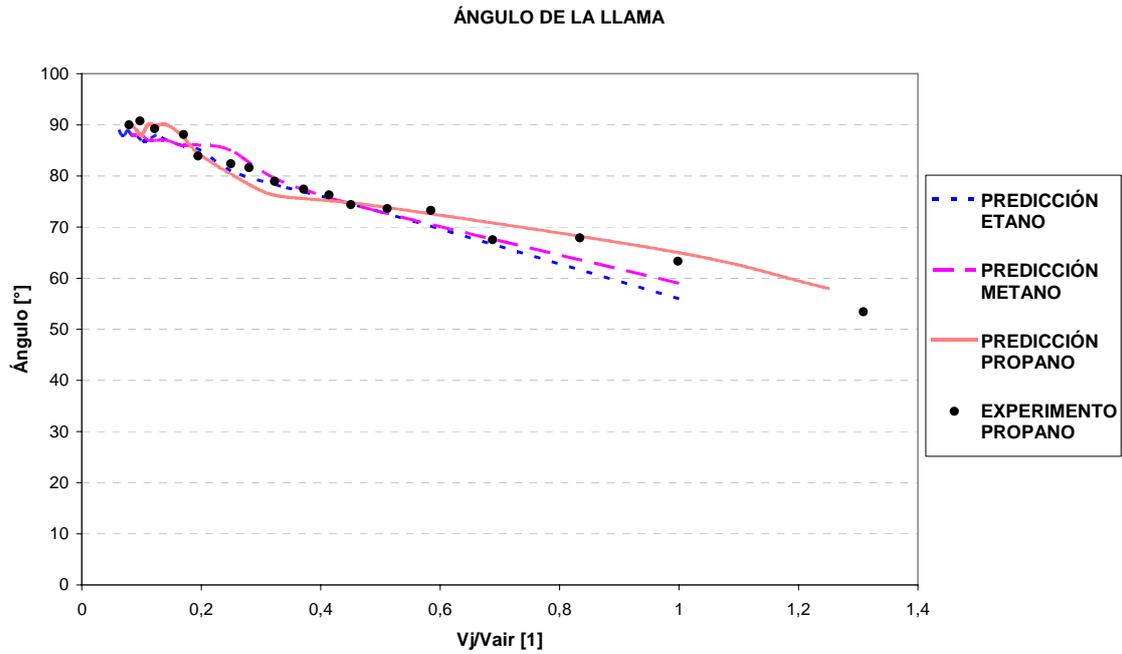
Pese a que los tres combustibles presentan un comportamiento similar, el valor de la relación de velocidades para el cuál se tiene el máximo en la longitud de su llama, es diferente (metano  $V_j/V_\infty \approx 0.14$ , etano  $V_j/V_\infty \approx 0.091$  y  $V_j/V_\infty \approx 0.2$ ); lo cual puede ser ocasionado por la diferencia de densidades en los combustibles que se descargan y diferente relación aire-combustible requerida por cada una de las llamas. Sin olvidarse además, de que después del tubo de descarga de combustible, se forma una zona de recirculación, que está influyendo en la estructura de la llama; con lo cual, si el flujo de combustible tiene una menor penetración en el flujo cruzado, esta zona de recirculación puede tener una mayor influencia en la llama.

Algo muy importante de mencionar también, es que cuando la velocidad del flujo cruzado comienza a alcanzar valores grandes ( $V_\infty$  igual o mayor a 8 m/s), se presentan fluctuaciones en los niveles de convergencia de los resultados, teniendo como consecuencia una desviación estándar en la predicción de la longitud de llama del orden de  $\pm 5\%$ . Esto es ocasionado porque el flujo en estas condiciones se vuelve aún más complejo por su naturaleza estocástica.

#### 4.4.2.2 Ángulo de la llama

El ángulo de deflexión medio de la llama se incrementa uniformemente cuando se incrementa de igual manera la velocidad del flujo cruzado. La figura 14 muestra la variación del ángulo medio de deflexión como función de la relación de velocidades  $V_j/V_\infty$ . Nuevamente en estos casos, no se presenta ninguna transición brusca en los datos graficados cuando la llama se localiza, por encima o por debajo y dentro de la

zona de recirculación, del quemador. Las comparaciones hechas con datos experimentales muestran congruencia en las predicciones.



**Figura 14.** Ángulo de deflexión de llama con respecto a la relación de velocidades  $V_j/V_{air}$ .

## **Capítulo 5**

### **Conclusiones**

En este trabajo se ha simulado la llama difusiva de un quemador elevado dentro de un flujo de aire, variando el tipo de combustible y la velocidad del flujo cruzado, para determinar la influencia que éstos tienen en los parámetros aerodinámicos de la llama, que son la longitud y el ángulo de deflexión.

Este estudio es de gran importancia, debido a que los mecheros industriales son ampliamente usados desde hace ya muchos años, por la industria petrolera y petroquímica, para el desecho de los gases residuales producto de la extracción y procesamiento del petróleo, pues su recuperación para un uso posterior resulta poco rentable y su almacenamiento peligroso.

Además, el conocer tales parámetros aerodinámicos permitirá generar diseños de mecheros más seguros, eficientes y económicos, lo que se traducirá en ahorros para las industrias, sin olvidarse del gran beneficio que esto traerá al medio ambiente, al reducir la cantidad de emisiones contaminantes.

El estudio se realizó mediante simulación numérica, con el uso de la alternativa de ecuaciones promediadas (Reynolds o Favre Averaged Navier-Stokes Equations, RANS) además de que se empleó un modelo sencillo de química rápida de un paso de reacción. La velocidad del flujo cruzado se varió desde 0.8 [m/s] hasta 12 [m/s], mientras que la velocidad de la descarga de combustible se mantuvo fija en 1 [m/s].

Los resultados de las simulaciones muestran concordancia con la correspondiente parte experimental, pues se observaron básicamente 3 distintos tipos de trayectorias en las formas de las llamas, que pueden ser observadas para velocidades en el flujo cruzado de 0.8 [m/s], 2.0 [m/s] y 3.5 [m/s]. Los diferentes tipos de trayectoria son el resultado del equilibrio entre las fuerzas de flotación de los gases calientes producto de la combustión, la cantidad de movimiento de éstos y la cantidad de movimiento del flujo cruzado.

En el primer caso, cuando  $V_{\infty}=0.8$  [m/s], la llama se encuentra completamente por encima del mechero, como resultado del dominio de las fuerzas de flotación de los gases calientes producto de la combustión sobre la cantidad de movimiento del flujo cruzado.

Para el segundo evento, con  $V_{\infty}=2.0$  [m/s], se observa que la base de la llama tiene una trayectoria hacia abajo, a consecuencia de la zona de baja presión generada detrás del quemador, por lo que la llama se pega en la pared del mechero, debido a que la recirculación del aire atrapa parte de la descarga de combustible, siendo quemado en ese lugar. Superada esa región, las fuerzas de flotación permiten que trayectoria de la llama se eleve, hasta que en su punta, dichas fuerzas de flotación no son suficientemente capaces de vencer la cantidad de movimiento del flujo cruzado, por lo que la trayectoria de la llama en este punto será prácticamente horizontal.

Mientras que la cantidad de movimiento del flujo cruzado para el tercer caso ( $V_{\infty}=3.5$  [m/s]), predomina completamente, sobre las fuerzas de flotación de los gases calientes, de modo tal que la trayectoria de la llama es prácticamente horizontal en todo momento.

Por último, cabe recordar que en cada costado de la llama se forma un vórtice, los cuales introducen aire hacia el centro de la llama, lo que a altas velocidades del flujo cruzado tiende a proporcionar una mayor cantidad de aire que la requerida, lo que favorece el enfriamiento de la llama que deriva en una baja eficiencia de la combustión e incluso en la extinción de ésta.

Para los tres tipos de combustible se tienen básicamente estos tres patrones de trayectoria y, en todos se tiene un valor diferente de la relación de velocidades,  $V_f/V_\infty$ , para el cual la longitud de la llama es la máxima, por lo que para valores mayores o menores a éste, la longitud tendrá un comportamiento decreciente.

Lo único que difiere notablemente entre cada combustible es la longitud de la llama y la relación de velocidades para las cuales se tiene la longitud máxima de llama.

La diferencia en la aerodinámica de cada una de las llamas de los distintos combustibles se debe, principalmente, a la densidad de cada uno, pues está directamente relacionada con la cantidad de movimiento del fluido; por lo que cada llama puede ser afectada de forma diferente por la zona de recirculación que se genera detrás del tubo de descarga. También la relación aire-combustible contribuye, pues cada combustible requiere de mayor o menor proporción de aire para su combustión.

Para altas velocidades del flujo cruzado, la turbulencia en el sistema es tal, que las predicciones comienzan a perder precisión, debido al nivel de convergencia. Adicionalmente, los niveles de radiación en el caso del etano, no permiten definir adecuadamente la presencia de la llama, debido a sus concentraciones en  $\text{CO}_2$  y  $\text{H}_2\text{O}$  que afectan los valores de radiación.

Como recomendaciones para trabajos futuros sobre este tema, puede sugerirse que se exploren otros modelos de radiación que permitan definir la llama. Adicionalmente, cabe destacar que se recomienda un estudio de la influencia de la radiación en la aerodinámica de la llama.

# Apéndice A

## Modelos de turbulencia.

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

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

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

### A.1 Cierres de segundo orden.

|

La ecuación de transporte exacta para los esfuerzos de Reynolds  $(\overline{u_i' u_j'})$  es [3]:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t} \left( \overline{\rho u_i'' u_j''} \right) + \frac{\partial}{\partial x_k} \left( \overline{\rho \tilde{u}_k u_i'' u_j''} \right) = & - \underbrace{\left( \overline{u_i''} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j} + \overline{u_j''} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} \right)}_{(a)} \\
 & - \underbrace{\left( \overline{u_i''} \frac{\partial p'}{\partial x_j} + \overline{u_j''} \frac{\partial p'}{\partial x_i} \right)}_{(b)} - \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_k} \left( \overline{\rho u_i'' u_j'' u_k''} \right)}_{(c)} \\
 & - \underbrace{\overline{\rho \left( u_i'' u_k'' \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_k} + u_j'' u_k'' \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_k} \right)}}_{(d)} - \underbrace{\left( \overline{\tau_{ik}} \frac{\partial u_j''}{\partial x_k} + \overline{\tau_{ik}} \frac{\partial u_i''}{\partial x_k} \right)}_{(e)} \quad (90)
 \end{aligned}$$

Los términos del lado derecho de la ecuación (90) representan, el efecto del gradiente de presión media (a), la correlación entre gradientes de presión fluctuante y fluctuaciones de velocidad (b), el transporte turbulento de los esfuerzos de Reynolds (c), la producción de los esfuerzos de Reynolds por velocidad de deformación media (d), y la disipación viscosa (e). De los términos anteriores, en (a), (b), (c), y (e) están presentes correlaciones desconocidas, y por tanto requieren modelización.

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

$$- \left( \overline{u_i''} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j} + \overline{u_j''} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} \right) = \frac{\overline{\rho' u_j''}}{\bar{\rho}} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\overline{\rho' u_i''}}{\bar{\rho}} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j} \quad (91)$$

La correlación  $\overline{\rho' u_j''}$  se puede modelar de una ecuación de conservación truncada como [3]:

$$\overline{\rho' u_i''} = - \frac{1}{4.3} \frac{\tilde{k}}{\tilde{\varepsilon}} \overline{u_i'' u_j''} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j} \quad (92)$$

donde  $k = 1/2 u_i'' u_i''$  es la energía cinética turbulenta y  $\varepsilon$  es su tasa de disipación. La contribución de este término es muy pequeña y frecuentemente se desprecia ([27] y [29]).

Con fines de modelización, la correlación entre gradientes de presión fluctuante y fluctuaciones de velocidad, (b), frecuentemente se divide en una parte re-distributiva y una parte isótropa [2]:

$$\left( \overline{u_i'' \frac{\partial p'}{\partial x_j}} + \overline{u_j'' \frac{\partial p'}{\partial x_i}} \right) = - \left( \overline{u_i'' \frac{\partial p'}{\partial x_j}} + \overline{u_j'' \frac{\partial p'}{\partial x_i}} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \overline{u_k'' \frac{\partial p'}{\partial x_k}} \right) - \frac{2}{3} \delta_{ij} \overline{u_k'' \frac{\partial p'}{\partial x_k}} \quad (93)$$

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

$$-\frac{2}{3} \delta_{ij} \overline{u_k'' \frac{\partial p'}{\partial x_k}} = - \underbrace{\frac{2}{3} \delta_{ij} \overline{\rho' u_k''}}_{(I)} + \underbrace{\frac{2}{3} \delta_{ij} \overline{p' \frac{\partial u_k''}{\partial x_k}}}_{(II)} \quad (94)$$

En flujos de baja velocidad  $Ma \ll 1$ , el término (II) de la ecuación (94) generalmente se desprecia [16]. El término (I) se suma al término de transporte turbulento de los esfuerzos de Reynolds (c) para formar el término:

$$\frac{\partial}{\partial x_k} (C_{ijk}) = \frac{\partial}{\partial x_k} \left( \overline{\rho' u_i'' u_j'' u_k''} + \frac{2}{3} \delta_{ij} \overline{p' u_k''} \right) \quad (95)$$

El término  $C_{ijk}$  se modela mediante un cierre de tipo gradiente [7]:

$$C_{ijk} = -C_s \frac{\tilde{k}}{\varepsilon} \overline{u_k'' u_i''} \frac{\partial \overline{u_i'' u_j''}}{\partial x_l} \quad (96)$$

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

$$\overline{\tau_{ik} \frac{\partial u_j''}{\partial x_k}} + \overline{\tau_{ik}'' \frac{\partial u_i''}{\partial x_k}} = \overline{\rho} \varepsilon_{ij} \quad (97)$$

Si se supone isotropía local, el término  $\varepsilon_{ij}$  se puede escribir en función de la disipación de energía cinética turbulenta,  $\varepsilon$ , como [3]:

$$\varepsilon_{ij} = \frac{2}{3} \varepsilon \delta_{ij} \quad (98)$$

La tasa de disipación de la energía cinética turbulenta,  $\varepsilon$ , se calcula de la siguiente ecuación de transporte, deducida por procedimientos similares a los utilizados en el caso de densidad constante [3]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\varepsilon u_j) = & \underbrace{-C_{\varepsilon 1}\bar{\rho}\frac{\varepsilon}{\tilde{k}}\widetilde{u_k''u_j''}\frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_j}}_{(A)} - \underbrace{C_{\varepsilon 2}\bar{\rho}\frac{\varepsilon^2}{\tilde{k}}}_{(B)} + \underbrace{C_{\varepsilon 3}\frac{\varepsilon}{\tilde{k}}\frac{\overline{\rho'u_j''}}{\bar{\rho}}\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j}}_{(C)} \\ & + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_j}\left(C_{\varepsilon}\bar{\rho}\frac{\tilde{k}}{\varepsilon}\widetilde{u_j''u_k''}\frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j}\right)}_{(D)} \end{aligned} \quad (99)$$

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

La parte re-distributiva de la correlación entre gradientes de presión fluctuante y fluctuaciones de velocidad, expresión (93), usualmente se divide en dos partes: una que incluye cantidades turbulentas y otra que incluye la tasa de deformación media.

Modelos para este término han sido propuestos, por ejemplo por Launder et al [21] (modelo ML), Gibson y Younis [7] (modelo MG) y Musonge [28] (modelo MJ). Denotando al término redistributivo como  $\Pi_{ij}$ , los modelos se escriben como:

$$\begin{aligned} \Pi_{ij} = & -C_1\bar{\rho}\varepsilon\left(\frac{\widetilde{u_i''u_j''}}{\tilde{k}} - \frac{2}{3}\delta_{ij}\right) + C_2\delta_{ij}\bar{\rho}\widetilde{u_l''u_m''}\frac{\partial \tilde{u}_l}{\partial x_m} - C_3\bar{\rho}P_{ij} + C_4\bar{\rho}\tilde{k}\left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i}\right) \\ & - \frac{2}{3}C_4\bar{\rho}\tilde{k}\frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k}\delta_{ij} - \left(\frac{2}{3}C_2 + C_3\right)\left(\bar{\rho}\widetilde{u_i''u_j''}\frac{\partial \tilde{u}_l}{\partial x_i} + \bar{\rho}\widetilde{u_l''u_i''}\frac{\partial \tilde{u}_l}{\partial x_j}\right) \end{aligned} \quad (100)$$

donde

$$P_{ij} = -\left(\overline{u_i'' u_k''} \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_k} + \overline{u_j'' u_k''} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_k}\right).$$

Las constantes de las ecuaciones (96), (99), y (100) se presentan en la tabla 3.

Sustituyendo las ecuaciones (95), (98) y (100) en la ecuación de los esfuerzos de Reynolds (90) se tiene:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\overline{\rho u_i'' u_j''}) + \frac{\partial}{\partial x_k} (\overline{\rho \tilde{u}_k u_i'' u_j''}) = \frac{\partial}{\partial x_k} (C_{ijk}) - \overline{\rho} \left( \overline{u_i'' u_k''} \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_k} + \overline{u_j'' u_k''} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_k} \right) \\ - \frac{2}{3} \overline{\rho} \varepsilon \delta_{ij} + \Pi_{ij} \end{aligned} \quad (101)$$

**Tabla 3: Constantes de las ecuaciones (96), (99) y (100).**

Modelo	MG	ML	MJ
C <sub>e1</sub>	1.4	1.44	1.40
C <sub>e2</sub>	1.8	1.90	1.90
C <sub>e3</sub>	0.15	0.15	0.18
C <sub>e4</sub>	0.22	0.21	0.22
C <sub>1</sub>	3	1.50	3.00
C <sub>2</sub>	0.3	-0.582	-0.44
C <sub>3</sub>	-	0.764	0.46
C <sub>4</sub>	-	-0.182	-0.23

## A.2 Modelos de viscosidad turbulenta.

Estos modelos son un método alternativo para determinar los esfuerzos de Reynolds  $\overline{u_i'' u_j''}$ . Están basados en el concepto de viscosidad turbulenta y suponen que, de la misma manera que en un 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:

$$\overline{\rho u_i'' u_j''} = -\bar{\rho} \nu_T \left( \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) + \frac{2}{3} \left( \bar{\rho} \tilde{k} + \bar{\rho} \nu_T \frac{\partial \bar{u}_k}{\partial x_k} \right) \delta_{ij} \quad (102)$$

Donde  $\nu_T (= \mu_T / \bar{\rho})$  es la viscosidad turbulenta. A diferencia de la viscosidad molecular ( $\nu = \mu / \rho$ ),  $\nu_T$  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:

$$\overline{\rho u_i'' u_\alpha''} = -\bar{\rho} \frac{\nu_T}{S_{c_T}} \frac{\partial \bar{\phi}_\alpha}{\partial x_i} \quad (103)$$

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

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

### A.3 Modelo $k - \varepsilon$

Este modelo es el empleado en ésta tesis. En él, se define como:

$$v_T = C_\mu \frac{\tilde{k}^2}{\tilde{\varepsilon}} \quad (104)$$

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

La ecuación para la energía cinética turbulenta,  $\tilde{k}$ , se obtiene de la ecuación (90), haciendo  $i=j$ , aplicando la hipótesis de isotropía local, y dividiendo entre dos:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{k}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{u}_j\tilde{k}) + \bar{\rho}\overline{u_i''u_j''}\frac{\partial\tilde{u}_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial}{\partial x_j}\underbrace{\left(\frac{1}{2}\overline{\rho u_j''u_i''u_i''}\right)}_{(a)} - \bar{\rho}\tilde{\varepsilon} \quad (105)$$

Los esfuerzos de Reynolds  $\overline{u_i''u_j''}$  se expresan de acuerdo con la ecuación (102).

El término (a) se aproxima como:

$$-\left(\frac{1}{2}\overline{\rho u_j''u_i''u_i''+u_j''p'}\right) \approx \frac{\mu_T}{\sigma_k} \frac{\partial\tilde{k}}{\partial x_j} \quad (106)$$

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

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{k}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{u}_j\tilde{k}) = \bar{\rho}(P_k - \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\bar{\rho}\frac{v_T}{\sigma_k}\frac{\partial\tilde{k}}{\partial x_j}\right) \quad (107)$$

donde:

$$P_k = v_T \left( \frac{\partial\tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial\tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial\tilde{u}_i}{\partial x_j} - \frac{2}{3} \left( \tilde{k} + v_T \frac{\partial\tilde{u}_i}{\partial x_i} \right) \frac{\partial\tilde{u}_i}{\partial x_i} \quad (108)$$

Aplicando hipótesis similares a las utilizadas para la ecuación de  $\tilde{k}$  (107), la ecuación para la disipación de la energía cinética turbulenta,  $\tilde{\varepsilon}$ , se obtiene a partir de la ecuación (99):

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{\varepsilon}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{u}_j\tilde{\varepsilon}) = \bar{\rho}\frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{k}}(C_{\varepsilon 1}P_k - C_{\varepsilon 2}\tilde{\varepsilon}) + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\bar{\rho}\frac{\nu_T}{\sigma_\varepsilon}\frac{\partial\tilde{\varepsilon}}{\partial x_j}\right) \quad (109)$$

Las constantes de las ecuaciones (107) y (109) se muestran en la tabla 4.

**Tabla 4: Constantes del modelo  $k - \varepsilon$  estándar.**

$C_\mu$	$\sigma_k$	$\sigma_\varepsilon$	$C_{\varepsilon 1}$	$C_{\varepsilon 2}$
0.09	1.0	1.314	1.44	1.92

El modelo  $k - \varepsilon$ , tal y como ha sido presentado, se comporta satisfactoriamente en flujos sencillos, normalmente flujos parabólicos para los cuales el modelo fue desarrollado en la década de 1970. En flujos más complejos, incluidos aquellos con rotación o con curvatura apreciable en las líneas de corriente, como los investigados en esta tesis, las hipótesis de isotropía en las que se basa el modelo no son aplicables, y las predicciones proporcionadas por el modelo son, en general, menos satisfactorias. La popularidad de este tipo de modelos, en la que su sencillez y economía juega un papel importante, ha dado lugar a una serie de modificaciones o variantes, que intentan compensar estas deficiencias, sin tener que abandonar la hipótesis de viscosidad turbulenta a favor de cierres de segundo orden.

## Apéndice B

### Esquemas de discretización

A continuación, se presentan los esquemas lineales que se usan en la discretización del término convectivo de la ecuación general (1), en el capítulo 2.

En la formulación de la ecuación discretizada (2), se requiere conocer la densidad  $\rho$  y la variable escalar,  $\phi$ , 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. De tal modo que el cálculo de  $\phi$  y  $\rho$  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.

Enseguida se presentan los esquemas de discretización lineales y no lineales empleados en esta tesis. Estos esquemas se describirán en base al sistema de celdas que se ilustra en la figura 15. Como ejemplo, se obtendrá el valor de  $\phi$  en la cara  $e$  de la celda  $P$ . La velocidad en la cara  $e$  se considerará, sin pérdida de generalidad, positiva ( $u_e > 0$ ).

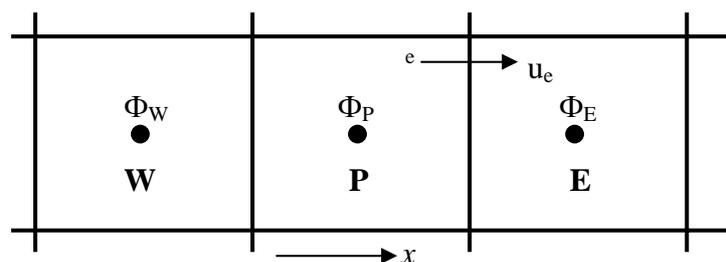


Figura 15. Diagrama esquemático de celdas.

## B.1 Esquemas lineales

### B.1.1 Diferencias desplazadas de primer orden

Con este esquema se supone que el valor de la variable  $\phi$  en la cara  $e$  es igual al nodo adyacente aguas arriba, es decir, para  $u_e > 0$  [20]:

$$\phi_e = \phi_P \quad (110)$$

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

### B.1.2 Diferencias centradas

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

$$\phi_e = \frac{\phi_E + \phi_P}{2} \quad (111)$$

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 (79) en el capítulo 3, que es un parámetro comparativo entre los procesos convectivo y difusivo.

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

### B.1.3 Híbrido

Este esquema fue introducido por Spalding [26] y consiste en combinar los esquemas de diferencias desplazadas y centradas para calcular el valor de la propiedad  $\phi$  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:

$$\phi_e = \frac{\phi_E + \phi_P}{2} \quad (112)$$

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

$$\phi_e = \phi_P, \quad Pe > 2 \quad (113)$$

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

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

## Apéndice C

### Archivo de datos de entrada Q1

El archivo Q1 contiene los datos de las condiciones de frontera para la simulación numérica. La información mostrada en la tabla 5, corresponde al caso del metano. Es importante mencionar, que este archivo debe ser modificado para cada tipo de combustible y para cada velocidad del flujo cruzado.

**Tabla 5: Condiciones de frontera para el metano**

Velocidad del combustible, $V_j$	1 [m/s]
Velocidad del flujo cruzado, $V_\infty$	3 [m/s]
Densidad del combustible, $\rho_j$	0.6359 [kg/m <sup>3</sup> ]
Relación aire-combustible	17,2550
Peso molecular	16 [kg/kmol]

A continuación, se presenta el archivo Q1, escrito en el lenguaje de entrada del programa Phoenix, PIL (Phoenix Input Language).

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

GROUP 1. Run title and other preliminaries

TEXT(LLAMA DE METANO: EBU)

\*\* Declarations

INTEGER(NYB,NZB,NYIN,NZIN,NZJ1,NZJ2)  
REAL(wiful,vin,GRHO)  
REAL(WINF,GVIST,FINF,HAIRIN,SECIN,DILIN)  
REAL(WAIR,WFU,WPR,CPAIR)  
REAL(DTFS,HFU,STOIC,FSTOI,CEBU,CPFU,CPPR,HINF,EAIR,YREW,HCMB)

real(ljet); ljet=0.203  
wiful=15.0  
vin=0.0

\*\* Thermodynamic and eddy-break-up constants

GRHO=1.161  
lstep=4000  
PRESS0=1.E5  
steady=t

\*\* Thermodynamic and eddy-break-up constants

WAIR=29.0; CPAIR=1032.5068; CPPR=1500.0; CPFU=2436.3  
WFU=16.0; WPR=28.0; HFU=5.0E7; STOIC=17.255  
FSTOI=1./(1.+STOIC); CEBU=4.0

ENUT=GRND

\*\* Domain specifications

GROUP 2. Transience; time-step specification

GROUP 3. X-direction grid specification

Cartes=t

NX=175  
NREGX=5  
IREGX=1; GRDPWR(X,15,.2,1.0)  
IREGX=2; GRDPWR(X,12,.027,1.0)  
IREGX=3; GRDPWR(X,12,0.047,1.0)  
IREGX=4; GRDPWR(X,116,1.4,1.0)  
IREGX=5; GRDPWR(X,20,.7,1.0)

GROUP 4. Y-direction grid specification

```
NY=62
NREGY=4
IREGY=1; GRDPWR(Y,6,.0135,1.0)
IREGY=2; GRDPWR(Y,6,.0235,1.0)
IREGY=3; GRDPWR(Y,20,.235,1.0)
IREGY=4; GRDPWR(Y,30,.55,1.0)
```

GROUP 5. Z-direction grid specification

```
NZ=84
NREGZ=5
IREGZ=1; GRDPWR(Z,19,.15,1.0)
IREGZ=2; GRDPWR(Z,7,.06,1.0)
IREGZ=3; GRDPWR(Z,12,.1,1.0)
IREGZ=4; GRDPWR(Z,22,.25,1.0)
IREGZ=5; GRDPWR(Z,24,.64,1.0)
```

GROUP 7. Variables stored, solved & named

```
solve(p1,U1,v1,w1,mixf)
SOLUTN(P1 ,Y,Y,Y,N,N,N)
  SOLUTN(U1 ,Y,Y,N,N,N,N)
  SOLUTN(V1 ,Y,Y,N,N,N,N)
  SOLUTN(W1 ,Y,Y,N,N,N,N)
  SOLUTN(MIXF ,Y,Y,N,N,N,N)
STORE(TMP1,RHO1)
STORE(FUEL,OXID,pROD,WRAD,WWRA)
TURMOD(KEMODL)
KELIN=3.0
tmp2a=FSTOI; tmp2b=hfU
  KELIN=3.0
```

GROUP 9. Properties of the medium (or media)

```
ENUL=1.57968E-5
CP1=GRND10
CP1A=CPFU
CP1B=CPPR
CP1C=CPAIR
RHO1=GRND6;RHO1A=WFU;RHO1B=WAIR;RHO1C=WPR
TMP1=GRND;TMP1A=CPFU;TMP1B=CPAIR;TMP1C=CPPR
Press0=1.0e5
```

GROUP 10. Interphase-transfer processes and

GROUP 11. Initialization of variable or porosity

\*\* Initial values

```
FIINIT(P1)=0.01
FIINIT(V1)=0.0;FIINIT(U1)=0.8
FIINIT(W1)=0.01
FIINIT(KE)=0.001;FIINIT(EP)=0.01
FIINIT(RHO1)=1.15
FIINIT(MIXF)=0.0
FIINIT(TMP1)=303.
```

GROUP 13. Boundary conditions and special sources

\*\* INLET FUEL

\*\* Fuel/Oxidant inlet

```
varmax(w1)=20.0
varmin(w1)=-20.0
varmax(v1)=15.0
varmin(v1)=-15.0
```

\*\* INLET FUEL

\*\* Fuel/Oxidant inlet

```
real(keini,epini)
KEINI=(0.03*wiful)**2
keini=19.44
epini=((0.09**0.75)*KEINI**1.5)/(0.1*56E-3)
```

\*\*fluctuaciones inicializacion\*\*\*rstm

```
real(win,rhoW,w1a,rhoentp)
Win=2.43
rhoW=1.15
rhoentp=0.6359
w1a=2.43
```

\*\*\* entrada COMBUSTIBLE\*\*\*

```
PATCH(IN1,LOW,17,26,1,2,1,1,1,1)
COVAL(IN1,P1,FIXFLU,1.09*rhoentp)
COVAL(IN1,U1,ONLYMS,0.0)
COVAL(IN1,V1,ONLYMS,0.0)
COVAL(IN1,W1,ONLYMS,1.09)
```

COVAL(IN1,KE,ONLYMS,.01)  
COVAL(IN1,EP,ONLYMS,1.0)  
COVAL(IN1,MIXF,ONLYMS,1.0)

PATCH(IN2,LOW,18,25,3,3,1,1,1,1)  
COVAL(IN2,P1,FIXFLU,1.09\*rhoentp)  
COVAL(IN2,U1,ONLYMS,0.0)  
COVAL(IN2,V1,ONLYMS,0.0)  
COVAL(IN2,W1,ONLYMS,1.09)  
COVAL(IN2,KE,ONLYMS,.01)  
COVAL(IN2,EP,ONLYMS,1.0)  
COVAL(IN2,MIXF,ONLYMS,1.0)

PATCH(IN3,LOW,19,24,4,4,1,1,1,1)  
COVAL(IN3,P1,FIXFLU,1.09\*rhoentp)  
COVAL(IN3,U1,ONLYMS,0.0)  
COVAL(IN3,V1,ONLYMS,0.0)  
COVAL(IN3,W1,ONLYMS,1.09)  
COVAL(IN3,KE,ONLYMS,.01)  
COVAL(IN3,EP,ONLYMS,1.0)  
COVAL(IN3,MIXF,ONLYMS,1.0)

PATCH(IN4,LOW,20,23,5,5,1,1,1,1)  
COVAL(IN4,P1,FIXFLU,1.09\*rhoentp)  
COVAL(IN4,U1,ONLYMS,0.0)  
COVAL(IN4,V1,ONLYMS,0.0)  
COVAL(IN4,W1,ONLYMS,1.09)  
COVAL(IN4,KE,ONLYMS,.01)  
COVAL(IN4,EP,ONLYMS,1.0)  
COVAL(IN4,MIXF,ONLYMS,1.0)

\*\*\* tuberia\*\*\*

CONPOR(TUB1,0.0,CELL,16,16,1,2,1,43)  
CONPOR(TUB2,0.0,CELL,17,17,3,3,1,43)  
CONPOR(TUB3,0.0,CELL,18,18,4,4,1,43)  
CONPOR(TUB4,0.0,CELL,19,19,5,5,1,43)  
CONPOR(TUB5,0.0,CELL,20,23,6,6,1,43)  
CONPOR(TUB6,0.0,CELL,24,24,5,5,1,43)  
CONPOR(TUB7,0.0,CELL,25,25,4,4,1,43)  
CONPOR(TUB8,0.0,CELL,26,26,3,3,1,43)  
CONPOR(TUB9,0.0,CELL,27,27,1,2,1,43)

\*\*\* entrada aire\*\*\*

PATCH(IN5,WEST,1,1,1,ny,1,nz,1,1)  
COVAL(IN5,P1,FIXFLU,3.0\*rhow)  
COVAL(IN5,U1,ONLYMS,3.0)  
COVAL(IN5,V1,ONLYMS,0.0)  
COVAL(IN5,W1,ONLYMS,0.0)  
COVAL(IN5,KE,ONLYMS,.001)

COVAL(IN5,EP,ONLYMS,.01)  
COVAL(IN5,MIXF,ONLYMS,0.0)

\*\*\*\*\* SALIDA\*\*\*\*\*

WALL(WSUP,HIGH,1,NX,1,NY,NZ,NZ,1,1)  
COVAL(OUT4,P1,FXP,0.0)  
WALL(WINF,LOW,1,NX,1,NY,1,1,1,1)  
PATCH(OUT2,EAST,NX,NX,1,NY,1,NZ,1,1)  
COVAL(OUT2,P1,FXP,0.0)

PATCH(OUT3,NORTH,1,NX,NY,NY,1,NZ,1,1)  
COVAL(OUT3,P1,FXP,0.0)

PATCH(WIGR,VOLUME,1,NX,1,NY,1,NZ,1,1)  
COVAL(WIGR,W1,FIXFLU,GRND)

GROUP 15. Termination of sweeps

LSWEEP=6000; SELREF=F; RESFAC=0.1

GROUP 16. Termination of iterations

restrt(all)

GROUP 17. Under-relaxation devices

RELAX(P1 ,LINRLX, 3.000000E-01)  
RELAX(U1 ,FALSDT, 1.000000E-03)  
RELAX(V1 ,FALSDT, 1.000000E-03)  
RELAX(W1 ,FALSDT, 1.000000E-03)  
RELAX(KE ,FALSDT, 1.000000E-04)  
RELAX(EP ,FALSDT, 1.000000E-04)  
relax(mixf,linrlx,0.7000)  
relax(rho1,linrlx,0.1000)

GROUP 18. Limits on variables or increments to

VARMAX(P1 ) = 30000.0  
VARMIN(P1 ) = -30000.0  
VARMAX(KE ) = 40.000  
VARMAX(EP ) = 5.000E+4  
VARMIN(KE)=0.0  
VARMIN(EP)=0.0  
VARMIN(TMP1)=303.0  
VARMIN(RHO1)=.05  
VARMIN(MIXF)=0.0  
VARMAX(MIXF)=1.0

GROUP 19. Data communicated by satellite to GROUND

GROUP 21. Print-out of variables

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

GROUP 22. Spot-value print-out

```
IXMON=63;IYMON=12;IZMON=45;TSTSWP=-1
```

GROUP 23. Field print-out and plot control

```
NPLT=1  
ITABL=1  
  iyprf=NY-2  
STOP
```

## ***Apéndice D***

### ***Archivo Ground***

El archivo Ground está escrito en el lenguaje de programación Fortran. Contiene los valores de ciertos parámetros necesarios para el cálculo de las variables de interés. Algunos parámetros que fue necesario definir son, los coeficientes de la ecuación del calor específico de cada combustible y los coeficientes estequiométricos de cada especie química, presentes en la ecuación de la combustión.

Así pues, se calculó para este caso la temperatura, la densidad, el efecto de la gravedad y los niveles de radiación del flujo simulado.

En seguida, se presentan los fragmentos de dicho archivo en los cuáles, se calculan las variables mencionadas, o donde se definieron ciertos valores de parámetros necesarios para calcular lo anterior.

### D.1 *Cálculo de la temperatura*

```
C * ----- SECTION 10 -----
C For TMP1.LE.GRND----- phase-1 temperature Index TEMP1

      L0TEM=L0F(LBNAME('TMP1'))
c   L0H1=L0F(H1)

      CALL SUB2(MIXF,LBNAME('MIXF'),MOXID,LBNAME('OXID'))

      CALL SUB2(MFUEL,LBNAME('FUUEL'),MPROD,LBNAME('PROD'))
C   fn10(y,x1,x2,a,b1,b2)      y = a + b1*x1 + b2*x2
C   fn47(y,a,b)                y = amax1(a,amin1(b,y))
c **** modelo de difusion

      R1MF=1.0/(1.0-TMP2A)

      CALL FN66(MFUEL,MIXF,-TMP2A*R1MF,R1MF)

      CALL FN66(MOXID,MIXF,1.0,-1.0/TMP2A)

      CALL FN10(MPROD,MOXID,MFUEL,1.0,-1.0,-1.0)

      CALL FN47(MPROD,0.0,1.0)

      L0MFUL=L0F(MFUEL)

      l0mprd = l0f(mprod)

      l0moxd = l0f(moxid)

      l0mif=l0f(MIXF)

      DO iix=IXF, IXL

      DO iiy=IYF, IYL

      icell=iiy+ny*(iix-1)

      YO= amax1(0.0, f(l0moxd+icell))

      YPR= amax1(0.0, f(l0mprd+icell))

      YF= amax1(0.0, f(l0mful+icell))

      YM= amax1(0.0, f(l0mif+icell))

      hc=ym*((2436.3*303.+48000000))
```

```

& -1032.948*303.)+1032.948*303.
    aaa=1000.*((.7669*YO+.7247*YPR)*.97035+
& .1514*YPR*.98230 +
& .1239*YPR*1.9088 +
& .2331*YO*1.0802+
& YF*1.6182)
    bbb=1000.*((.7669*YO+.7247*YPR)*1.493e-4+
& .1514*YPR*2.603e-4+
& .1239*YPR*3.4833e-5+
& .2331*YO*3.2656e-5+
& YF*2.7e-3)
    te=(sqrt(aaa**2.-4.*bbb*(+48000000*YF-hc))-aaa)/2./bbb
    if (isweep.eq.rg(2)) then
    write(6,*) f(l0tem+icell),hc,te
    endif

    f(l0tem+icell)=te

    ENDDO

    ENDDO
    
```

## D.2 *Cálculo de la densidad*

```

C * ----- SECTION 1 -----
C For RHO1.LE.GRND--- density for phase 1      Index DEN1
L0TEM1=L0F(LBNAME('TMP1'))
L0P1=L0F(P1)
L0den1=L0F(den1)
CALL SUB2(MIXF,LBNAME('MIXF'),MOXID,LBNAME('OXID'))

CALL SUB2(MFUEL,LBNAME('FUEL'),MPROD,LBNAME('PROD'))
C fn10(y,x1,x2,a,b1,b2)      y = a + b1*x1 + b2*x2
C fn47(y,a,b)                y = amax1(a,amin1(b,y))
c **** modelo de difusion

R1MF=1.0/(1.0-TMP2A)
    
```

```

CALL FN66(MFUEL,MIXF,-TMP2A*R1MF,R1MF)
CALL FN66(MOXID,MIXF,1.0,-1.0/TMP2A)
CALL FN10(MPROD,MOXID,MFUEL,1.0,-1.0,-1.0)
CALL FN47(MPROD,0.0,1.0)
L0MFUL=L0F(MFUEL)
I0mprd = I0f(mprod)
I0moxd = I0f(moxid)
I0mif=I0f(MIXF)
  DO Ixx=IXF, IXL
    DO Iyy=IYF, IYL
      Icell=Iyy+Ny*(Ixx-1)
      YO= amax1(0.0, f(I0moxd+icell))
      YPR= amax1(0.0, f(I0mprd+icell))
      YF= amax1(0.0, f(I0mful+icell))
      YM= amax1(0.0, f(I0mif+icell))
      FMN2=.767*YO+.721*YPR
      FMCO2=.181*YPR
      FMH2O=.098*YPR
      FMO2=.233*YO
      FMCH8=YF
c      F(L0DEN1+icell)=(1.0e5)*(FMCH8*44.09+FMN2*28.01
c      & +FMCO2*44.01
c      & +FMH2O*18.0
c      & +FMO2*32.0)/(8314.0*(amax1(F(L0TEM1+icell),303.0)))
      END DO
    END DO

```

### D.3 Efecto de la gravedad

C----- SECTION 12 ----- value = GRND

```

c  IF (NPATCH.EQ.'WIGR') THEN
  IOVAL=I0f(VAL)

```

```

I0den1=I0f(den1)
c  L0MIXF=L0F(LBNAME('MIXF'))

DO Ixx=IXF, IXL
DO Iyy=IYF, IYL
I=Iyy+Ny*(Ixx-1)
IF(INDVAR.eq.W1) then
c  IF(F(L0DEN1+i).gt.1.149) then
c  F(L0VAL+I)=0.0E0
c  else
F(L0VAL+I)=-(F(L0DEN1+i)-1.15129)*9.81
c  endif
c  if(F(L0MIXF+i).gt.0.98) then
c  F(L0VAL+I)=0.0E0
c  else
c  endif
else
endif
END DO
END DO

```

#### D.4 Niveles de Radiación

```

L0TEM1=L0F(LBNAME('TMP1'))
LOWRAD=L0F(LBNAME('WRAD'))
LOWWRA=L0F(LBNAME('WWRA'))
L0P1=L0F(P1)
L0den1=L0F(den1)
CALL SUB2(MIXF,LBNAME('MIXF'),MOXID,LBNAME('OXID'))

CALL SUB2(MFUEL,LBNAME('FUEL'),MPROD,LBNAME('PROD'))
C  fn10(y,x1,x2,a,b1,b2)      y = a + b1*x1 + b2*x2
C  fn47(y,a,b)              y = amax1(a,amin1(b,y))
c ***** modelo de difusion

R1MF=1.0/(1.0-TMP2A)
CALL FN66(MFUEL,MIXF,-TMP2A*R1MF,R1MF)
CALL FN66(MOXID,MIXF,1.0,-1.0/TMP2A)
CALL FN10(MPROD,MOXID,MFUEL,1.0,-1.0,-1.0)
CALL FN47(MPROD,0.0,1.0)
L0MFUL=L0F(MFUEL)
I0mprd = I0f(mprod)
I0moxd = I0f(moxid)
I0mif=I0f(MIXF)
DO Ixx=IXF, IXL
DO Iyy=IYF, IYL
Icell=Iyy+Ny*(Ixx-1)
YO= amax1(0.0, f(I0moxd+icell))

```

```

YPR= amax1(0.0, f(l0mprd+icell))
YF= amax1(0.0, f(l0mful+icell))
YM= amax1(0.0, f(l0mif+icell))
FMN2=.767*YO+.721*YPR
FMCO2=.181*YPR
FMH2O=.098*YPR
FMO2=.233*YO
FMCH8=YF

SUMYOW=0.0
SUMYOW = SUMYOW+FMN2/28.0134+FMCO2/44.00995+FMH2O/18.015340
& + FMO2/31.9988 +FMCH8/44.0
WTM = 1.0/SUMYOW

PKH2O=10.**(2.689-0.2986e-2*F(L0TEM1+icell)+
& 0.1080E-5*(F(L0TEM1+icell))**2-
& 0.1317E-9*(F(L0TEM1+icell))**3)
C...
X=F(L0TEM1+icell)/300.
PKCO2=10.**(-1.262396E-3*X**4+3.020593E-2*X**3
1 -2.532505E-1*X**2+6.776739E-1*X+1.032984)
ABS=0.E0

IF( FMH2O.GT. 0) THEN
  ABS=ABS+PKH2O*FMH2O*WTM/18.01534
END IF
IF( FMCO2.GT. 0) THEN
  ABS=ABS+PKCO2*FMCO2*WTM/44.00995
END IF
C units for ABS: 1/cm
RNcPA=1013250.D0
PRESION = 1013250.D0
ABS=ABS*PRESION/RNcPA/100.
C.. unit for Ralos: [ergs/(cm^3-s)]
SIGMA=5.668e-5
WTOT=4.*SIGMA*ABS*(F(L0TEM1+icell)**4-300.**4)
F(L0WWRA+icell)=WTOT
  if(WTOT.gt.1.0e6) then
    F(L0WRAD+icell)=1.0
  else
    F(L0WRAD+icell)=0.0
  endif
END DO
END DO

```

## ***Bibliografía***

- [1] **Aris, R.** Vectors, Tensors and the Basic Equations of Fluid Mechanics. Prentice Hall International Series in the Physical and Chemical Engineering Sciences. 1962.
- [2] **Biagioli, F.** Comparison Between Presumed and Monte Carlo PDF Transport Methods for Turbulent Combustion Modeling. AIAA-Journal of Propulsion and Power, 13(1):109-116. 1997.
- [3] **Briggs, G.A.** Plume Rise and Buoyancy Effects. Atmospheric Science and Power Production, pp. 327-366. 1984.
- [4] **Brzustowski, T.A.** Flaring in the Energy Industry. Progress in Energy and Combustion Science, 2, pp. 129-141. 1976.
- [5] **Castiñeira, D.,** Edgar, T.F. CFD for simulation of steam-assisted and air-assisted flare combustion systems. Energy and Fuels, 20(3), 1044-1056. 2006.
- [6] **Chen, J. Y.,** Liu, Y., Rogg, B. CO-H<sub>2</sub>-N<sub>2</sub>/Air Diffusion Flames: Thermal Radiation and Transfer Effects. Lecture Notes in Physics, m15. Springer-Verlag, Berlin. 1993.
- [7] **Daly, B. J.,** Harlow, F. H. Transport Equations in Turbulence. Physics of Fluids, 3(11):2634-2649. 1970.
- [8] **Favre, A.** Problems of Hydrodynamics and Continuum Mechanics. SIAM. 1969.
- [9] **Ferziger, H. H.,** Peric, M. Computational Methods for Fluid Dynamics. Springer-Verlag. 1996.

- [10] **Gollahalli, S.R.**, Brzustowski, T.A., Sullivan, H.F.; Characteristics of a Turbulent Propane Diffusion Flame in a Cross-Wind; Transactions of the CSME, Vol. 3, pp. 205-214; 1975.
- [11] **Huang, R.F.**, Chang, J.M.; Coherent Structure in a Combustion Jet in Crossflow; AIAA Journal Vol. 32, No. 6, pp. 1121-1125, 1994.
- [12] **Johnson, C.R.**, Wilson, D.J.; A Vortex Pair Model for Plume Downwash into Stack Wakes; Atmospheric Environment Vol. 31, No. 1, pp. 13-20; 1997.
- [13] **Jones, W. P.** Models for Turbulent Flows with Variable Density and Combustion. En *W. Kollmann*, editor, "Prediction Methods for Turbulent Flows". Lecture Series 1979-2. Von Karman Institute for Fluid Dynamics. Rhode Saint Genese, Bélgica. 1979.
- [14] **Jones, W. P.** Turbulence Modeling and Numerical Solutions Methods for Variable Density and Combustion Flows. pp 306-374. Academic Press. 1994.
- [15] **Kalghatgi, G.T.** The Visible Shape and Size of a Turbulent Hydrocarbon Jet Diffusion Flame in a Cross-Wind. Combustion and Flame, Vol. 52. pp 91-106. 1983.
- [16] **Lauder, B. E.**, Reece, G. J., Rodi, W. Progress in the development of a Reynolds stress turbulence closure. Journal of Fluid Mechanics, 65:537. 1975.
- [17] **Lauder, B. E.**, Spalding, D. B. Lectures in Mathematical Models of Turbulence. Academic Press. 1972.
- [18] **Lindstedt, R. P.**, Váos, E. M. Modeling of Premixed Flames with Second Moment Methods. Combustion and flame, 116:461-485. 1999
- [19] **Ludwing, J. C.**, Qin, H. Q., Spalding, D. B. The PHOENICS Reference Manual. Technical Report CHAM TR/200, CHAM Ltd, London. 1989.
- [20] **Lumey, J. L.** Pressure-Strain Correlation. Physics of Fluids. 18(6):750. 1975.

- [21] **Majeski, Adrian J.**, Wilson, David J., Kostiuk, Larry W. Size and Trajectory of a Flare in a Cross Flow. Canada, Alberta. 1999.
- [22] **Patankar, S. V.**, Spalding, D. B. A Calculation Procedure for Heat, Mass and Momentum Transfer in Three Dimensional Parabolic Flows. Int. J. Heat and Mass Transfer, 15. pp. 1787-1806. 1972.
- [23] **Patankar, S. V.** Numerical Heat Transfer and Fluid Flow. Series in Computational Methods in Mechanics and Thermal Science. Hemisphere Publishing Corporation. 1980.
- [24] **Siegel, R.**, Howell J. R. Thermal Radiation Heat Transfer. McGraw-Hill, 2nd edition. Washington. 1981.
- [25] **Smith, S.H.**, Mungal, M.G.; Mixing Structure and Scaling of the Jet in Crossflow; Journal of Fluid Mechanics, Vol. 357, pp. 83-122; 1998.
- [26] **Smoot, L.D.**, Smith, P.J. Coal Combustion and Gasification. Plenum Press, New York. 1985.
- [27] **Spalding, D. B.** A Novel Finite-Difference Formulation for Differential Expressions Involving Both First and Second Derivates. Int. Journal. Num. Methods Engineering, 4, pp. 551. 1972.
- [28] **Spalding, D. B.** Combustion and Mass transfer. Pergamon. 1979.
- [29] **Spalding, D. B.** Mathematical Modeling of Fluid Dynamics, Heat Transfer and Mass Transfer Process. Technical Report HTS/8011, Imperial College of Science Technology and Medicine. 1980.
- [30] **Vicente, W.**, Salinas, M., Barrios E., Barrera E. Numerical Analysis of a Flare in a cross flow. Fire Safety Journal. 2007. En revisión.

- [31] **Vicente, W.**, Salinas, M., Barrios E., Barrera E. Predicción numérica del tamaño y forma de una llama en un quemador elevado dentro de un flujo cruzado de aire. Ingeniería. Investigación y desarrollo. 2007. En revisión.
- [32] **Vicente, W.** Simulación numérica de la combustión y formación de contaminantes en llamas turbulentas premezcladas pobres. Zaragoza. 2000.
- [33] **Warnatz, J.**, Mass, U., Dibble, R. W. Combustion. Springer. 1996.
- [34] **Williams, F. A.** Combustion Theory. Second Edition, the Benjamin/Cummings Publishing Company. 1985.