

**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE
MÉXICO**

FACULTAD DE INGENIERÍA



**“ANÁLISIS PARAMETRICO DE UN QUEMADOR DE
PREMEZCLA POBRE CON UN MEDIO POROSO Y
UN FLUJO DE AIRE ADYACENTE”**

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

P R E S E N T A:

DUQUE BERMUDEZ EDUARDO

DIRECTOR DE TESIS: DR. WILLIAM VICENTE Y RODRIGUEZ

MÉXICO, D.F. CD. UNIVERSITARIA



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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

AGRADECIMIENTOS.

En estas líneas quiero agradecer a todas aquellas personas que me han apoyado y me han brindado su amistad durante el transcurso de mi vida en especial a mi mamá Dora Bermúdez Avilez, que siempre me ha apoyado en todas las cosas que he emprendido, a mi hermana Luci que siempre me ha estado presionando para que salga adelante y a la bebita, que donde quiera que se encuentre estará muy orgullosa de su brother al igual que papá.

Además quiero agradecer a mi primo Sergio Brito Duque, por encaminarme a la Universidad, así como también a mi tía Leonor Duque y a Lurdes quienes siempre me han dado sus consejos.

También le quiero agradecer el apoyo brindado por la UNAM y darme la oportunidad de ser parte de ella, quiero también mencionar al Dr. William Vicente y Rodríguez director de este trabajo de tesis por su paciencia, tolerancia y empeño para la realización de este trabajo, gracias también al Dr. Martín Salinas Vázquez por su apoyo

De igual forma quiero agradecerle a mi novia Jacqueline Jiménez Ruiz por que a lo largo de toda mi formación académica dentro y fuera de la universidad me ha apoyado al igual que toda su familia incluyendo al “chepes”.

Además les doy las gracias sinceras a todas aquellas personas que han contribuido con una sonrisa, con una palabra, con un joke y darme ánimo para que pudiera terminar, por fin, este trabajo.

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

Gracias Totales Lalo.

Simbología.

\vec{u}	Velocidad instantánea.	α, β, \dots	Especies químicas.
ρ	Densidad instantánea.	m_α	Masa de la especie.
p	Presión.	m_T	Masa total de la mezcla.
$\vec{\tau}$	Tensor de esfuerzos viscosos.	Y_α	Fracción másica de la mezcla.
\vec{f}_m	Fuerzas másicas.	\vec{J}_α	Flujo difusivo de la especie.
\vec{g}	Gravedad	S_α	Tasa de formación neta de la especie.
μ	Viscosidad molecular.	X_α	Símbolo químico de la especie.
μ_v	Viscosidad volumétrica.	W_α	Peso molecular de la especie.
μ_T	Viscosidad turbulenta.	.	Velocidad de reacción de la especie.
δ	Tensor delta de Kronecker.	ω_α	Fracción molar de la especie.
$k_{f,r}$	Constante de reacción directa.	X_α	Fracción molar de la especie.
$k_{b,r}$	Constante de reacción inversa.	U_α^0	Energía interna de la especie.
A_r	Factor pre-exponencial.	T_α^0	Temperatura de la especie.
b_r	Exponente de temperatura.	s_α^0	Entropía de la especie.
E_r	Energía de activación.	η_α	Moles de la especie.
R_G	Constante universal de los gases.	h_α	Entalpía de cada especie.
ΔZ^0	Energía libre de Helmholtz.	CP_α	Calor específico de cada especie a presión constante de cada especie.
J_α	Flujo difusivo de calor.	T_0	Temperatura de referencia.
\dot{Q}_r	Intercambio de calor por radiación.	D_α^m	Coefficiente de difusión media de cada especie.
$\vec{\tau} : \nabla \vec{v}$	Disipación viscosa.		
ρ	Densidad de mezcla.		Subíndices.
κ	Conductividad térmica de mezcla.	I	Escala integral.
T	Temperatura.	F	Característica de la flama laminar.
τ	Coefficiente de difusión	q	Cinética química.
C_D	Energía cinética turbulenta.	U_F	Velocidad de flama laminar.
τ_{mez}	Tiempo característico de mezcla.	Σ	Densidad de superficie de la flama.
ε	Energía cinética turbulenta.		Velocidad i de cada cara.
ρ_0	Densidad de los gases frescos.		
Σ	Densidad de la superficie de la flama.	u_i	
ϕ	Fracción másica.	V_p	Volumen de la celda.
ε	Tasa de disipación.	Δi	Longitud de la cara i
H	Probabilidad de transición.	Δt	Paso temporal.
l	Longitud Característica.	N_p	Partículas del conjunto.
t	Tiempo característica.	u	Velocidad.
U_L	Velocidad de flama laminar.	k	Cinética permanente.
k_p	Coefficiente de Absorción de Planck.	σ	Media
		γ	Desviación típica Gaussiana.

Ma	Número de Mach
Fr	Número de Fraude.
Ec	Número de Ecker.
Sc	Número de Schmidt
Pr	Número de Prandt.
Le	Número de Lewis.
Da	Damkóhler.
Ka	Karbutz.
Re _T	Reynolds

Índice general

Capítulo 1 Introducción

1. Introducción.....	5
2. Métodos de predicción.....	4
3. Objetivos.....	7
4. Estructura de la tesis.....	8

Capítulo 2 Ecuaciones de transporte

1. Introducción.....	9
2. Ecuación Continuidad.....	10
3. Conservación de cantidad de movimiento.....	10
4. Conservación de las especies.....	11
5. Conservación de la energía total.....	13
6. Ecuación de estado y flujo difusivo	14
7. Ecuación diferencial homogénea y fracción de mezcla.....	17
8. Promediado de las ecuaciones	19
9. Modelos de radiación.....	24
10. Modelos de combustión.....	26
11. Mecanismos reducidos.....	26
11.1 Mecanismo global de un paso	27
11.2 Mecanismo global de dos pasos.....	27
12. Lecho granular.....	29

Capítulo 3 Método de solución

1. Introducción.....	29
2. Método de volúmenes finitos.....	29

Capítulo 4 Resultados

1. Introducción.....	36
2. Definición de conceptos.....	36
2.1 Combustión.....	36
2.2 Configuración experimental.....	37
3. Análisis cualitativo.....	40
4. Resultados cualitativos	41
4.1 Perfil de velocidad.....	41
4.2 Perfil de temperaturas.....	43
4.3 Concentración de especies químicas mayoritarias.....	44
4.4 Contornos de H ₂ O.....	44
4.5 Contornos de CO ₂	45
4.6 Contornos de O ₂	46
4.7 Concentración de especies químicas minoritarias	47

4.8 Contornos de CO	47
5. Análisis cuantitativo	48
Tabla numero 3. Variaciones de velocidad.....	48
Tabla numero 4. Variación de la posición del medio poroso.....	55
Tabla numero 5 Variación de la relación Aire Combustible.....	57
Capitulo 5 <u>Conclusiones y recomendaciones</u>	
1. Introducción.....	60
2. Recomendaciones	61
Apéndice A <u>Modelos de Turbulencia</u>	
1. Introducción.....	62
2. Cierres de segundo orden	62
3. Modelos de viscosidad turbulenta.....	66
Apéndice B <u>Esquemas de Discretización.</u>	
1. Introducción.....	69
2. Esquemas lineales.....	70
2.1 Diferencias desplazadas de primer orden.....	70
2.2 Diferencias centradas.....	70
2.3 Hibrido.....	71
<hr/>	
Bibliografía.....	72

Capítulo 1. Introducción.

El crecimiento poblacional en nuestro país, principalmente en la Ciudad de México y área conurbada, hacen que la mancha urbana siga ganándole terreno a las reservas ecológicas debido a los numerosos asentamientos irregulares en zonas denominadas como “suelo de conservación”, esto aunado al rápido crecimiento del parque automotriz; a la falta de vialidades adecuadas para una buena circulación; un deficiente y ya obsoleto sistema de transporte traen como resultado la contaminación atmosférica cuando su principal fuente de abastecimiento de energía son los combustibles fósiles. Debido a que la combustión de estos hidrocarburos alteran el equilibrio ambiental que cambia la composición de la atmosfera generando problemas y efectos colaterales. La atmósfera es esencial para el desarrollo de la vida en nuestro planeta y cualquier cambio repercute en los seres vivos, por lo tanto es muy importante encontrar fuentes alternas de energía y mejorar los sistemas de combustión que disminuyan las emisiones contaminantes para así mantener una calidad de aire aceptable.

El resultado de la combustión de hidrocarburos, son emisiones altamente contaminantes como; monóxido de carbono (CO), bióxido de carbono (CO₂), los compuestos de nitrógeno llamados colectivamente óxidos de nitrógeno (NO_x), hidrocarburo inquemados, entre otros. Estos gases en su conjunto provocan diferentes fenómenos atmosféricos como el llamado efecto invernadero, que es un fenómeno natural y que se encarga de mantener un equilibrio térmico sobre la superficie de la tierra. En las últimas décadas debido al aumento de estos gases, la tierra ha estado experimentando un sobrecalentamiento global, lo que deriva en problemas tales como el deshielo de los polos terrestres, el aumento consecuente del nivel del mar, la inundación de ciudades costeras, la pérdida de biodiversidad, además de contribuir a la desertización de áreas cercanas a los trópicos, y por tanto un aumento de hambrunas y conflictos internacionales.

Para contrarrestar las diversas problemáticas mencionadas, algunos países desarrollados han adoptado diferentes acuerdos, uno de ellos es el protocolo de Kyoto, en este acuerdo los países se han comprometido a reducir, de manera considerable las emisiones contaminantes para evitar el sobrecalentamiento, por otra parte teniendo en cuenta que las fuentes móviles representan la principal cusa de la formación de estos gases nocivos los grandes fabricantes automotrices, destinan millonarias sumas en investigaciones, todas encaminadas a eficientar los sistemas de transporte en el mundo.

Actualmente, en México también se están llevando a cabo investigaciones al respecto, donde sistemas educativos, ONG`s y gobierno promueven la participación de la sociedad para el ahorro de energía. En este sentido el Instituto de Ingeniería, en conjunto con el Laboratorio de Control de Emisiones de la Facultad de Ingeniería ambos de la Universidad Nacional Autónoma de México, está llevando a cabo diversas investigaciones para proponer un quemador de propano que accione un Motor de Combustión Externa (MCE)

En el prototipo del quemador analizado, la combustión se lleva a cabo en un cilindro fuera del motor, y los gases productos de la combustión se utilizan para realizar el trabajo útil dentro del motor.

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

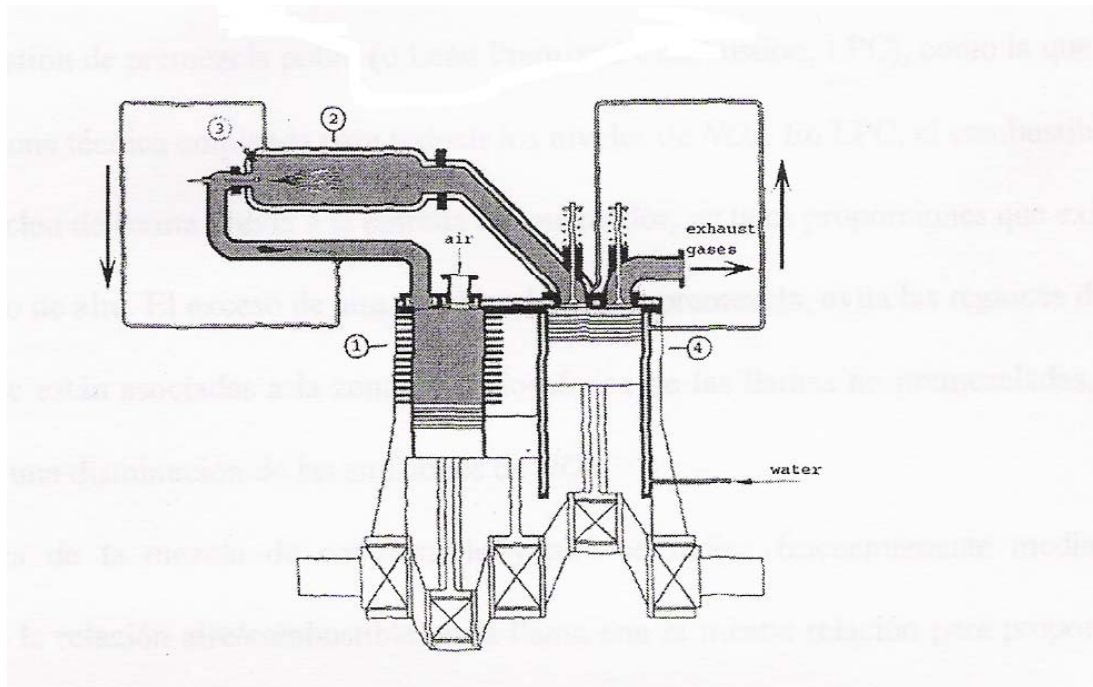


Figura 1. Configuración del motor de combustión externa

Como se observa en la figura 1, el aire se comprime mediante el cilindro (1), este aire se introduce en el quemador (2), en el cual también se inyecta una mezcla de aire-combustible a través de una boquilla, (además del agua que proviene de las camisas que el motor y al propio quemador). La combustión se inicia con el disparo de la bujía (3) y la energía térmica liberada hacen que se incremente el volumen y la temperatura de los gases los que se expanden en el cilindro de expansión (4), generando el trabajo útil.

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

Para el MCE se propuso un quemador que se explicara con mayor detalle en el capítulo 4, este quemador básicamente consiste de en un sistema compuesto de una entrada de aire-combustible previamente premezclados y un flujo de aire que entra de forma anular a la cámara de combustión. El combustible es gas LP, en particular usamos propano, y la mezcla de aire combustible se vario en

diferentes porcentajes para hacerla rica, pobre y estequiométrica. Aguas abajo de la entrada del quemador se localiza un medio poroso cuya finalidad es confinar la llama, provocando una mejor mezcla de los gases, la distancia existente entre la salida de los gases y el medio poroso se vario para permitiendo de esta forma encontrar la distancia más adecuada entre estos dos elementos, permitiendo de esta manera un mejor aprovechamiento del combustible.

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

La riqueza o pobreza de la mezcla combustible y aire se indica frecuentemente mediante la comparación de la relación aire/combustible en la llama con la misma relación para proporciones estequiométricas, esto es las proporciones de combustible y oxidante en la mezcla para tener una reacción completa para que no sobre ninguno de ellos. Al cociente de estas dos relaciones se le llama tasa de equivalencia, ϕ . Por lo tanto si $\phi > 1$, la mezcla es rica en combustible; si $\phi = 1$ la mezcla es estequiométrica y si $\phi < 1$, la mezcla es pobre en combustible es decir se tiene un exceso de oxidante.

2. Métodos de predicción.

El diseño de un quemador, como el propuesto para el MCE debe muy eficiente y poco contaminante por lo que requiere un conocimiento de las características del flujo del fluido y de su interacción con la cinética química de la combustión.

El sistema a analizar es de geometría multidimensional y consta de una mezcla multicomponente de gases que reaccionan químicamente entre ellos. El flujo es turbulento como en la mayoría de las

aplicaciones donde encontramos procesos de combustión. El sistema se puede analizar mediante dos técnicas; la primera serían ensayos experimentales, donde se requiere un prototipo o modelo físico del sistema y llevar a cabo ensayos y mediciones. Además el modelo físico se debe instrumentarse adecuadamente para llevar a cabo las mediciones de forma correcta, lo cual nos tomaría mucho tiempo y dinero. La segunda alternativa es la simulación numérica, mas económica que la experimentación, y nos proporciona resultados más completos y detallados

En la mayoría de los procesos de combustión el flujo analizado es turbulento, al igual que en este trabajo, el problema tiene la dificultad añadida de la complejidad de la cinética química de la combustión que involucra un gran número de reacciones y de especies.

Para simular el flujo numéricamente, se tienen tres alternativas, la primera es la Simulación Numérica Directa (Direct Numerical Simulation, DNS), que consiste en la discretización de las ecuaciones instantáneas que gobiernan el movimiento del flujo, válidas tanto para flujo laminar como para turbulento. Las ecuaciones que se resuelven son: las ecuaciones de conservación de masa, las de cantidad de movimiento, la de energía y las de especies químicas. Por este método se resuelven todas las escalas espaciales y temporales de las variables del flujo, y por lo tanto no requiere de ninguna aproximación o modelo de turbulencia. En el flujo turbulento sin reacción para capturar todas las escalas, el número de puntos de la discretización (espacio temporal) es función del número de Reynolds elevado prácticamente al cubo. Debido a que el problema considerado incluye especies reactivas aparecerán escalas menores que exigen más detalle en la simulación, como el flujo de interés es casi siempre turbulento y con un número de Reynolds alto, la aplicación de este método se limita por la falta de equipos de cálculo con suficiente potencia.

La segunda alternativa es la Simulación de Grandes Escalas (Large Eddy Simulation, LES), esta resuelve las ecuaciones para las escalas de mayor tamaño modelando el efecto de las pequeñas fluctuaciones sobre ellas. Aun cuando esta técnica puede mejorar sustancialmente la predicción de la aerodinámica del flujo sobre todo en flujos con estructuras transitorias de vorticidad que dominan los

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

Finalmente la tercera posibilidad es, una simulación con ecuaciones promediadas (RANS) extensamente utilizada en casos prácticos de interés industrial y que consiste en promediar todas las escalas, espaciales y temporales, de las fluctuaciones turbulentas y resolver las ecuaciones de transporte en términos de variables medias del sistema.

En el presente trabajo se utilizara la alternativa de ecuaciones promediadas, descrita en el capítulo 2 con mayor detalle. Este método tiene el nombre de RANS (Reynolds Average Navier-Stokes equations) donde el transporte turbulento de la cantidad de movimiento, energía o especies químicas, se modela mediante algún modelo de turbulencia que se tratan en el apéndice A.

La modelización del término de reacción química implica a menudo la comparación entre los tiempos característicos asociados a la cinética química t_q , y aquellos asociados a una escala del movimiento turbulento por ejemplo la escala integral de la turbulencia t_I , o la escala de Kolmogorov t_{K0} . El número de Damköhler es la relación entre estos tiempos por ejemplo $Da_{K0} = t_I/t_q$. (Se puede análogamente definir $Da_{K0} = t_{K0}/t_q$).

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

mezclan a nivel molecular, ayudados por la turbulencia, la mayor parte de las reacciones que liberan energía en la combustión pueden considerarse, condiciones normales, rápidas.

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

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

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

Dados los altos requerimientos computacionales y en tiempo de calculo por parte de las FDP's en esta tesis se utilizara un modelo de tipo disipación viscosa, que incluye el efecto de las tasas de reacción química y el modelo Eddy Break Up. Este modelo se trata en el capitulo 2.

3. Objetivos

Proponer una configuración física adecuada para el quemador de propano. Así mismo presentar las condiciones químicas más apropiadas para un eficiente funcionamiento, tomando en cuenta el

cuidado el medio ambiente. Teniendo como base el análisis numérico siendo este proceso el más tardado de la investigación.

Llevar a cabo el objetivo planteado, se realizaron distintas simulaciones tomando como referencia un caso base. En la primera etapa se hizo variar la velocidad del aire circundante, para la segunda etapa se varió la posición del medio poroso y finalmente se varió la relación de aire-combustible que entran por la boquilla.

4. Estructura de la tesis

Tras este capítulo introductorio, en el capítulo 2 se presentan las ecuaciones de transporte que gobiernan el movimiento del flujo y se deduce las ecuaciones promediadas que resuelven el modelo. En el capítulo 3 se presenta el método utilizado para la solución de las ecuaciones de transporte descritas en el capítulo anterior, que describe el flujo.

En el capítulo 4 tras una breve introducción se presentan los resultados cualitativos, productos de una simulación para un caso base, posteriormente se presentan resultados de las 15 simulaciones hechas a partir de este caso base variando diferentes parámetros tanto físicos como químicos.

Las conclusiones y las recomendaciones para posteriores investigaciones se presentan en el capítulo 5

Los apéndices A y B, presentan los modelos de turbulencia y esquemas de discretización utilizados respectivamente.

Capítulo 2. Ecuaciones de Transporte.

1. Introducción

En el capítulo introductorio se habló de tres alternativas para la simulación de flujos turbulentos, en este capítulo veremos definiciones básicas y algunas consideraciones que se hacen debido al problema considerado, también explicare el método utilizado en la simulación del quemador de propano considerado.

La alternativa más conveniente para la simulación de flujos turbulentos es, a mi parecer, el promediado de las ecuaciones de Navier-Stokes (RANS) ya que es menos exigente computacionalmente hablando, aun cuando sí requiere medios considerables debido a que son cálculos tridimensionales.

Las ecuaciones que modelan el efecto de la radiación térmica y la definición de la ecuación integro-diferencial del flujo radiante con su resolución, se presentan posteriormente.

Si consideramos que la cinética química de las reacciones en la combustión es muy rápida, podemos afirmar que estas reacciones ocurren en una capa delgada que es deformada por la turbulencia, sin embargo la estructura interna de la reacción no se ve afectada. El número de variables o especies que intervienen en la combustión es muy grande y por lo tanto nos vemos obligados a reducir el sistema químico detallado a uno más sencillo y los modelos utilizados para este fin se explican mas adelante. Por ultimo daré la explicación del por que introducir un medio poroso dentro del quemador

2. Continuidad

La ecuación de continuidad la expresa la conservación de masa y la podemos definir como:

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

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

3. Conservación de cantidad de movimiento

La conservación de cantidad de movimiento del flujo se describe por la siguiente ecuación:

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

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

A su vez la ley de Navier-Poisson establece que el tensor de esfuerzos viscosos es [1]:

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

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

Sustituyendo esta última ecuación en (2), se obtienen las ecuaciones de Navier- Stokes, que se define como:

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

4. Conservación de las especies

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

$$Y_\alpha = \frac{m_\alpha}{m_r} = \frac{\text{masa de la especie}}{\text{masa total de la mezcla}} \quad (5)$$

de acuerdo con esta definición, podemos afirmar que la suma de todas las fracciones másicas de las especies es uno.

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

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

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

donde \bar{J}_α es el flujo difusivo y S_α es la tasa de formación neta de la especie α . Para satisfacer la ecuación de continuidad (1), se tiene que cumplir que:

$$\sum_{\alpha=1}^N S_\alpha = 0 \quad \text{y} \quad \sum_{\alpha=1}^N \bar{J}_\alpha = 0$$

El flujo difusivo de la especie α , \bar{J}_α se trata más adelante.

Una expresión general que representa la tasa de reacción química, S_α , se puede obtener si suponemos un sistema químico con R reacciones, presentan la siguiente forma:



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

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

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

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

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

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

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

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

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

Por otra parte el cambio de la energía libre de Helmholtz en el estado estándar es:

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

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

La ecuación (6) también se puede formular en términos de la molalidad, n_α , número de moles por unidad de masa de la mezcla, definida como:

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

5. Conservación de la energía total

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

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

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

La ecuación de la energía total se define como:

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

donde \bar{J}_e es el flujo difusivo de calor y \dot{Q}_r es el intercambio de calor por radiación. De esta misma ecuación, podemos decir que los dos primeros términos representan el trabajo de las fuerzas viscosas y de presión.

La entalpía de la mezcla se define como:

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

Y en términos de esta última ecuación, la ecuación de la energía total la podemos escribir como:

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

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

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

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

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

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

En la combustión el intercambio de energía por radiación, \dot{Q}_r , es importante cuando hay flujos con altas temperaturas. Sin embargo no lo considerare en esta investigación, debido a que el efecto de la radiación lo estudiare con el modelo de pérdidas de calor por radiación.

6. Ecuación de estado y flujo difusivo

Todas las ecuaciones anteriormente presentadas deben complementarse con ecuaciones de estado que relacionen variables más simples de controlar como la presión, la densidad y la temperatura, igualmente con expresiones para los flujos difusivos.

En términos de la densidad de las especies constitutivas dentro de la mezcla, la densidad la podemos calcular como:

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

Suponiendo una mezcla de gases ideales tenemos:

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

La temperatura la podemos conocer a partir de la definición de la entalpía de la mezcla:

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

donde como ya vimos h_{α} es la entalpía de cada especie de la mezcla y por ende la entalpía de la especie α es la suma de las entalpías térmica y química:

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

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

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

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

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

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

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

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

El flujo difusivo de calor, \bar{J}_h se produce por conducción de calor, definido como el efecto Dufour y por el flujo difusivo de la especie. Estos dos últimos efectos son usualmente despreciables en flujos con combustión ([25] y [26]); por lo tanto el término (\bar{J}_h) se expresa con la ley de Fourier:

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

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

Por otro lado el número adimensional de Schmidt de la especie α , Sc_{α} , se define como:

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

Y así mismo el flujo difusivo de la especie J_{α} , en términos del anterior número se puede describir como:

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

Aplicando estas suposiciones y sustituyendo en las expresiones de flujos difusivos, anteriormente vistas, se pueden escribir de la siguiente manera:

Ecuación de Continuidad.

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

Ecuación de Cantidad de Movimiento.

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

Ecuación. de Especies químicas.

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

Ecuación de Energía.

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

Cuando C_p puede suponerse constante, la ley de Fourier igualmente se puede escribir como:

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

Y a su vez el número de Prandtl, Pr , Se define como:

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

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

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

7. Ecuación diferencial homogénea y fracción de mezcla

Es muy frecuente que en flujos con combustión, se haga la suposición de que los coeficientes difusivos de las especies y la entalpía son iguales:

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

El número de Lewis, Le . Se define como:

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

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

Cabe mencionar que la anterior 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, esto para flujo laminar. Por el contrario en un flujo turbulento, como se explica más adelante, el término de difusividad molecular es con mucha frecuencia despreciado cuando se le

compara con el transporte turbulento $\bar{v}'' \phi''_\alpha$. Este flujo turbulento 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 (que no reaccionan), y para otros escalares transportados que no constan de un término fuente, la hipótesis de igual difusividad, como consecuencia sus ecuaciones de conservación tienen la misma forma:

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

donde ϕ_z es la especie inerte o la entalpía.

A esta ecuación se le denomina ecuación “homogénea”, por no tener término fuente (S_α).

Para la ecuación de la entalpía, que no tiene términos fuente, la hipótesis mencionada anteriormente: de número de Lewis unitario, también responde a la ecuación diferencial homogénea (37).

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

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

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

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

8. Promediado de las ecuaciones

En la mayoría de los sistemas físicos que se analiza un fluido este se vuelve turbulento, en este trabajo de investigación no es la excepción, y la característica que sin duda describe este tipo de flujos es una variación irregular y completamente aleatoria del fluido, tanto en el espacio como en el tiempo, presentando diferentes características en un mismo proceso.

La alternativa de simulación que hemos seleccionado es un promedio de todas las ecuaciones, esto es, se promedian todas las variaciones temporales obteniendo un valor medio que posteriormente se utiliza al resolver las ecuaciones de transporte aquí cabe mencionar que estas ecuaciones no son cerradas y por lo tanto se requerirán modelos que replacen a los términos no cerrados.

Cuando un fluido tiene densidad variable podemos utilizar dos alternativas:

La primera es sacar el promedio de Reynolds, el cual toma a la densidad como cte.

Por otra parte podemos obtener el promedio de Favre [3], que es ponderado con la densidad.

Con el fin de no confundir al lector, la simbología utilizada la definimos en este momento para las siguientes ecuaciones representamos con el símbolo Φ a cualquier propiedad transportada, como la fracción másica de la especie Y_α , la entalpía h y las componentes de velocidad, \bar{v} . Por otra parte los

valores instantáneos de las mismas propiedades son escritos en términos de un promedio y una fluctuación turbulenta:

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

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

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

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

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

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

de las definiciones anteriores:

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

Con la definición de los dos promedios se obtiene:

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

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

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

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

El motivo principal de la aplicación del promedio de Favre en las ecuaciones de transporte es que al aplicar este promedio, las ecuaciones resultantes son mucho más sencillas que dejan de incluir correcciones con fluctuaciones de densidad.

Así pues aplicando el promedio de Favre a las ecuaciones de transporte obtenemos:

instantáneas de continuidad, cantidad de movimiento, energía y especies químicas, se obtienen las ecuaciones siguientes [25]:

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

Ecuación de cantidad de movimiento.

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

Ecuación de energía

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

Ecuación de especies químicas

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

Así mismo aplicando el promedio de Favre en la ecuación homogénea obtenemos:

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

Estas ecuaciones son idénticas a las correspondientes ecuaciones instantáneas que contienen un término adicional (u''_i, Φ'') , e involucra fluctuaciones de velocidad y el escalar Φ , y que representa físicamente el transporte convectivo de Φ por movimientos turbulentos. En flujos turbulentos, el término (I) de las ecuaciones anteriores es generalmente despreciable frente al término (II). Por lo tanto, las ecuaciones (48), (49), (50), (51) y (52) se escriben como:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Una de las principales dificultades que se presentan en la simulación es la modelización de la tasa de reacción media para flujos turbulentos reactivos. Esto se debe al efecto que tienen las fluctuaciones turbulentas en la tasa de reacción media. Por otra parte la tasa de reacción química es no lineal, por lo que su valor no se puede calcular simplemente a partir de las variables medias, que son los resultados que se obtienen del modelo.

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

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

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

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

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

9. Modelos de radiación

En cualquier sistema de combustión las pérdidas de calor por efecto de radiación se pueden calcular por diferentes métodos, en nuestro sistema de combustión las temperaturas que se alcanzan, son suficientemente altas para que la transferencia de calor por radiación pueda ser significativa, para el estudio de este fenómeno, en nuestro caso incluimos un modelo muy sencillo descrito en esta misma sección.

La radiación emitida es proporcional a la temperatura del cuerpo emisor a la cuarta potencia, y por tanto es un fenómeno muy importante a altas temperaturas y poco relevante a bajas. En todos los sistemas en los que se tienen temperaturas altas se debe estudiar este fenómeno a profundidad ya que representa una importante pérdida. Por otra parte La radiación es un fenómeno que también depende del espacio, tiempo de la dirección y de la longitud de onda.

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

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

donde s es el coeficiente de dispersión, a el coeficiente de absorción y λ es la longitud de onda.

Apoyándonos en la figura (1) podemos decir que el significado de la ecuación anterior expresa las pérdidas y ganancias (por unidad de longitud) en intensidad I que sufre el rayo que viaja en una dirección determinada al atravesar un volumen de fluido. Las pérdidas son de dos tipos: en primer lugar (componente A), una fracción de I es absorbida por el medio (A); y en segundo lugar (componente DD), una fracción s de la intensidad que es dispersada por el medio en otras direcciones. Las ganancias en intensidad son debidas a otros dos factores: a la emisión de radiación por el volumen de fluido que tiene lugar en la dirección del rayo que se considera (contribución E); y la radiación que se recoge en la dirección del rayo proveniente de la dispersión (componente DR).

Esta última tiene la forma de la integral de la probabilidad de que un rayo viaje en dirección Ω' disperse radiación de intensidad I en la dirección Ω considerada.

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

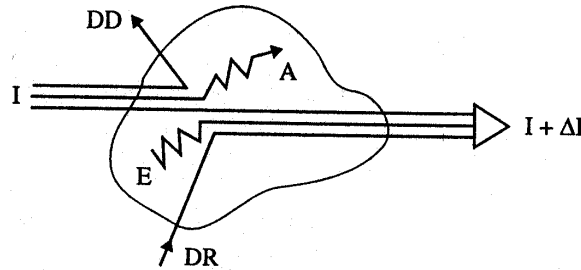


Figura 1: Representación grafica de la ecuación para la intensidad radiante.

El método de flujos considera que la intensidad radiante solo dependiente de la posición, el tiempo y los cósenos directores. La dependencia de la longitud de onda se elimina por integración. La ecuación de la intensidad radiante es la siguiente:

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

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

10. Modelos de combustión

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

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

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

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

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

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

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

11. Mecanismos reducidos

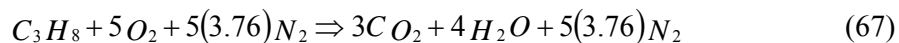
En la combustión hidrocarburos, inclusive en los más sencillos como el propano, se tiene de decenas de especies y cientos de reacciones. Para disminuir el número de especies, es común reducir el

sistema químico a un menor de variables que sean manipulables. El mecanismo resultante se denomina “mecanismo reducido”.

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

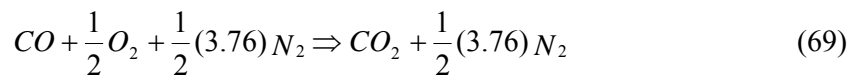
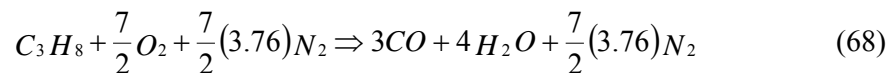
11.1 Mecanismo global de un paso

El mecanismo químico de un paso para el propano es:



11.2 Mecanismo global de dos pasos

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



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

12. Lecho granular

Para mejorar el nivel de mezclado en los gases se propone la idea de utilizar un medio poroso a una cierta distancia de la boquilla, esto nos ayudara también para tener un mejor confinamiento de la llama, esto es tendremos una zona de mezclado y otra zona de combustión. Hay que considerar que

debido a la introducción de este medio poroso tendremos como consecuencia una caída de presión y debido a esto tenemos que modelar y cuantificar esta caída de presión.

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

$$\frac{\Delta P}{L} = \frac{\mu}{k_1} v + \frac{\rho}{k_2} v^2 \quad (70)$$

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

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

$$\Delta P = P_i - P_o \quad (71)$$

donde P_i y P_o son las presiones absolutas a la entrada y salida del medio poroso, respectivamente.

La k_1 y k_2 significan las constantes de permeabilidad de Darcyan, estos parámetros representan las propiedades estructurales del medio poroso.

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

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

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

Capítulo 3. Método de Solución.

1. Introducción

El método utilizado para resolver las ecuaciones que modelan la aerodinámica de un fluido es conocido como método de volúmenes finitos, el cual consiste en la discretización del dominio, donde posteriormente se identifican los nodos que caracterizan cada subdominio, este nodo aparece geoméricamente en el centro de nuestro dominio, los cuales son llamados volúmenes de control, en forma similar se discretizan el tiempo en intervalos.

1. Método de volúmenes finitos

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

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

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

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

La ecuación (1) se puede discretizar con el método de volúmenes finitos. Con este método, el dominio se divide en pequeños volúmenes de control (figura 1), asociando a cada uno de ellos un punto nodal. De forma similar se discretiza el tiempo en intervalos temporales. La ecuación diferencial se integra en cada volumen de control y en cada intervalo temporal, y el resultado es una

ecuación discretizada que relaciona los valores de $\tilde{\phi}$ para un determinado grupo de puntos nodales. Esta ecuación algebraica expresa el principio de conservación de $\tilde{\phi}$ en el volumen finito, de la misma manera que la ecuación diferencial lo expresa para un volumen infinitesimal. La ecuación algebraica para un nodo P puede expresarse en forma general como:

$$a_P \tilde{\phi}_P = \sum_{i,I=E,W,N,S,H,L} a_i \tilde{\phi}_I + a_T \tilde{\phi}_T + B \quad (2)$$

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

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

En la figura 2 se muestra la notación de la celda y de sus vecinas. Dada una celda P , sus vecinas se notarán según las iniciales de los puntos cardinales (en inglés) en las direcciones “ x ” e “ y ” y como “Low” y “High” en la dirección z . Las caras de la celda se notan con la misma nomenclatura, pero con letras minúsculas.

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

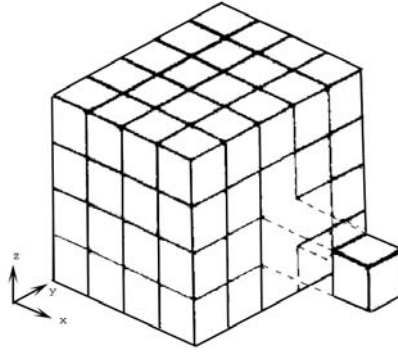


Figura 1: Representación del sistema discretizado en volúmenes finitos.

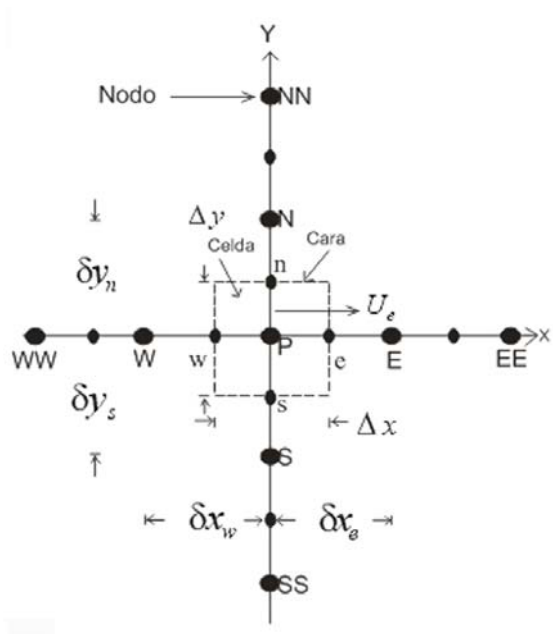


Figura 2: Diagrama esquemático de un volumen de control bidimensional.

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

Definiendo los símbolos F , D , y Pe como:

$$F = \bar{\rho} \bar{v}_i, \quad D = \frac{\Gamma}{\delta i}, \quad Pe = \frac{F}{D} \tag{3}$$

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

Los coeficientes a_i de la ecuación (2) son:

$$a_i = D_i f(|Pe|) + \max(-F_i, 0) \quad (4)$$

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

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

donde Δ_i es la longitud de la cara i .

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

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

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

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

El coeficiente para el término transitorio es:

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

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

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

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

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

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

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

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

$$a_p = a_e + a_w + a_n + a_s + a_T - \bar{S}_{\phi,v} \Delta x \Delta y \quad (11)$$

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

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

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

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

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

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

$$\bar{S}_{\phi,r} = \frac{\bar{\rho}V_P}{\Delta t_f} (\tilde{\phi}_P^{(n-1)} - \tilde{\phi}_P^{(n)}) \quad (12)$$

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

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

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

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

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

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

Capítulo 4. Resultados.

1. Introducción

En este capítulo se presentan los resultados de la simulación numérica del quemador. En una primera parte se presenta la configuración experimental de la sección de prueba del quemador a simular, haciendo referencia a conceptos básicos y explicando cada una de las partes que lo constituyen. En la segunda parte, se presentan resultados cualitativos del modelo en estudio, en términos de especies mayoritarias como: H_2O , CO_2 y O_2 , y minoritarias como CO , llevándose a cabo un análisis para determinar los factores que alteran el comportamiento de la combustión dentro del quemador. Los factores que se modificaron en el modelo numérico son: diámetro del quemador, longitud de colocación del medio poroso y gasto de aire lateral.

El modelo en estudio es básicamente un quemador de combustión premezclada que opera con una mezcla de gas LP-Aire. Para mejorar el proceso de mezclado y operación a bajas temperaturas, se tiene un medio poroso colocado a cierta distancia del quemador y adicionalmente se suministra una corriente de aire que entra la región anular entre la boquilla y las paredes del quemador.

2. DEFINICIÓN DE CONCEPTOS

Combustión.

La combustión se puede definir como una reacción química que libera energía en forma de calor al combinar combustible y oxígeno, como consecuencia de la reacción se tiene la formación de una llama. En estos procesos además de emitirse luz y calor se genera una gran cantidad de contaminación. Los principales contaminantes atmosféricos son N_2 , CO_2 , H_2O , y SO_2 e hidrocarburos sin quemar, que pueden originar daños a la salud y al medio ambiente. De ahí el interés en buscar soluciones a la

contaminación mediante investigaciones y modelos de análisis para disminuir los gases nocivos productos de la combustión.

2.2 Configuración experimental

La configuración experimental del quemador simulado en esta tesis, se construyó físicamente en el laboratorio de Control de Emisiones de la Facultad de Ingeniería de la UNAM, y consta en general de un tubo que representa el cuerpo del quemador, la boquilla por la cual entra la mezcla de aire-combustible, y un lecho granular, que se propuso para mejorar la combustión en el quemador.

Partes que constituyen el quemador:

Tubo.

La configuración experimental del quemador es un tubo recto con longitud de 400 [mm] y de diámetro 50.8 [mm], dentro de el cual, se tiene una boquilla y un lecho granular de 50.8 [mm], que se propuso para mejorar la mezcla entre los gases productos de la combustión y gases reactantes.

Boquilla.

La boquilla es una placa que consta en total de 18 orificios, los seis primeros tienen un arreglo circular a 12.5 [mm] de radio y cada orificio tiene 3 [mm] de diámetro además de uno en el centro con las mismas características físicas, mientras que las once perforaciones restantes están situadas a un radio de 23 [mm] del centro, y con un radio de 1.5 [mm].

El dominio de simulación en la boquilla se discretizó tomando las perforaciones circulares, de la entrada de los reactantes, como trapecoides circulares, el arreglo que se implemento se muestra en la figura 1.

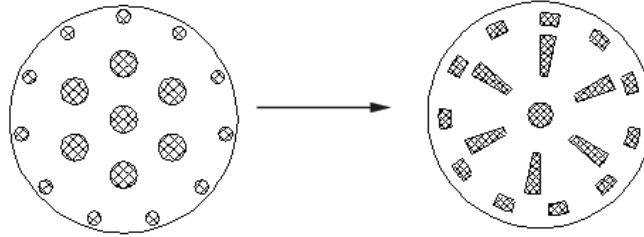


Figura 1. Esquema de discretización del dominio de la boquilla.

Por otra parte el dominio del cuerpo del quemador se reduce a la mitad, esto con fines de ahorro en memoria y tiempo de cálculo. Para discretizar el dominio se utilizó una malla en coordenadas cilíndrico polares, que comienza a la salida de la boquilla, con las siguientes dimensiones 32 x 22 x 120 celdas en las direcciones angular (θ), radial (r), y axial (z) respectivamente, esta última dirección se extiende hasta 400 [mm]. Debido a que el mayor número de reacciones químicas ocurren próximo a la salida de la mezcla, además se tienen que analizar los fenómenos que se presentan en esa parte del quemador, por tal motivo, se hizo un refinamiento de malla en los primeros 30 [mm] y se colocaron 30 celdas en esta longitud, en los 370 [mm] restantes se colocaron 90 celdas. El arreglo se muestra en la figura 2.

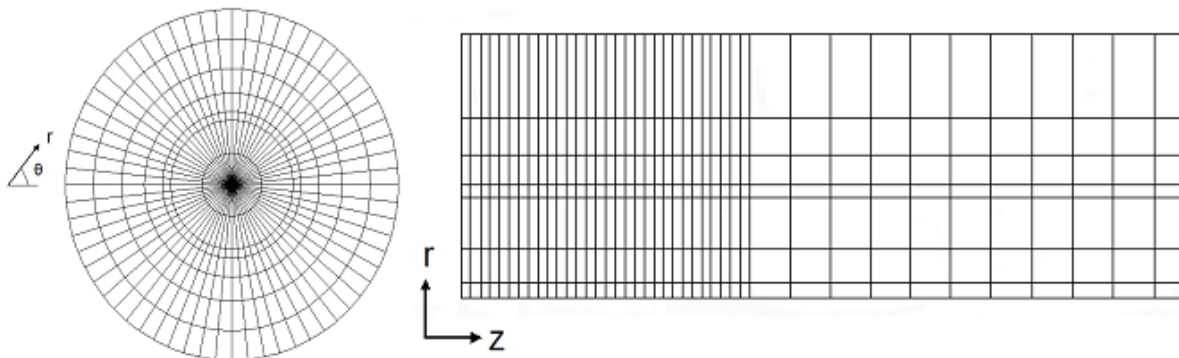


Figura 2. Ejemplificación del dominio del quemador.

Lecho granular.

El lecho granular, es un medio constituido por material poroso cerámico, con un diámetro de partícula de 3 [mm], el cual está colocado a 141.3 [mm] de la boquilla con una longitud de 120.6 [mm]. La

existencia de este medio poroso permite tener una mezcla mejorada entre la mezcla aire y combustible, los gases productos de la combustión, y el aire adyacente lateral que permitirá reducir la temperatura de la combustión.

En la figura 3 podemos apreciar los componentes principales del quemador así como la malla que se utilizó para la simulación numérica.

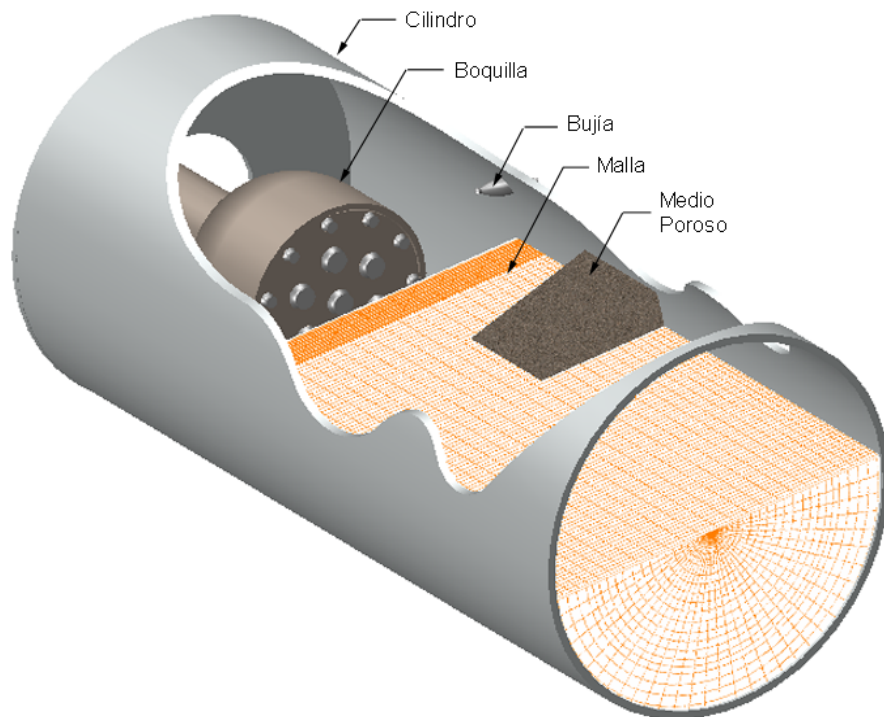


Figura 3. Componentes básicos del quemador.

Dentro de la boquilla fluye una mezcla de gas propano-aire y en su exterior un flujo de aire anular. La presión y la temperatura de la mezcla son 75.84 [KPa] y 300 [K] respectivamente. En la entrada de la boquilla, la velocidad media es $v_1 = 10.6$ [m/s]. El aire primario que entra por el espacio anular tiene una velocidad $v_2 = 0.5$ [m/s], en la tabla 1 y 2 se resumen los parámetros experimentales de esta llama de propano y aire.

Presión manométrica	75.845	KPa
Temperatura	300	K
Volumen específico	7.356	m ³ /Kg
Densidad	0.136	Kg/m ³
Gasto másico del gas	0.00833	Kg/s
Gasto volumétrico del gas	612.925	cm ³ /s
Velocidad del gas	10.6	m/s
Velocidad del aire	0.05	m/s

Tabla 1. Datos experimentales obtenidos de la llama propano aire en la boquilla.

Condiciones de físicas y químicas para el caso base			
		Mezcla con exceso del 20% de Aire	
Velocidad [m/s]	Distancia de la boquilla al medio poroso	Fracciones Másicas	
0.566299	141.3 [mm]	C ₃ H ₈	0.0509142
		O ₂	0.2210858
		N ₂	0.728
		h	2.68E+06

Tabla 2. Condiciones físicas y químicas para el caso base

Cabe mencionar, que el modelo se calibró con datos experimentales en un trabajo anterior por lo tanto, en este trabajo se estudia el efecto de los siguientes factores: posición del lecho poroso, el gasto de aire adyacente, y la tasa de aire combustible que entra por la boquilla.

3. Análisis cualitativo

En esta segunda parte del capítulo se presentan un análisis cualitativo del flujo reactivo en el quemador. Durante el proceso se modificaran los siguientes parámetros: longitud a la cual se encuentra el lecho granular, la velocidad del aire adyacente, y el porcentaje de mezcla aire y combustible. Esto nos permitirá establecer las mejoras correspondientes y así obtener un mejor aprovechamiento de la energía del combustible en el quemador.

Si bien es cierto la combustión de cualquier hidrocarburo involucra varias decenas de reacciones químicas y de especies; en este trabajo solo considerare las reacciones que son más importantes en función de la presencia de componentes que son nocivos para el medio ambiente, teniendo en cuenta lo siguiente términos que involucra el modelo.

Aire.

El aire que se utiliza en la reacción química, es aire común y esta constituido en general por 21% de O₂, y 79% de N₂ en porcentaje volumétrico, ó 0.233 de O₂ y 0.766 de N₂ en fracción másica.

Combustible.

La composición del combustible es fundamental para poder determinar los parámetros estequiométricos de la reacción. El combustible se considera Propano y la mezcla Aire Combustible, es pobre en los casos simulados, es decir existe un exceso de aire en la llama.

4. Resultados cualitativos.

4.1 Perfiles de velocidad

La aerodinámica del flujo es importante en la mezcla ya que de esta depende la formación de especies contaminantes en la combustión. En la figura 4 se muestra el campo de velocidades para el caso base.

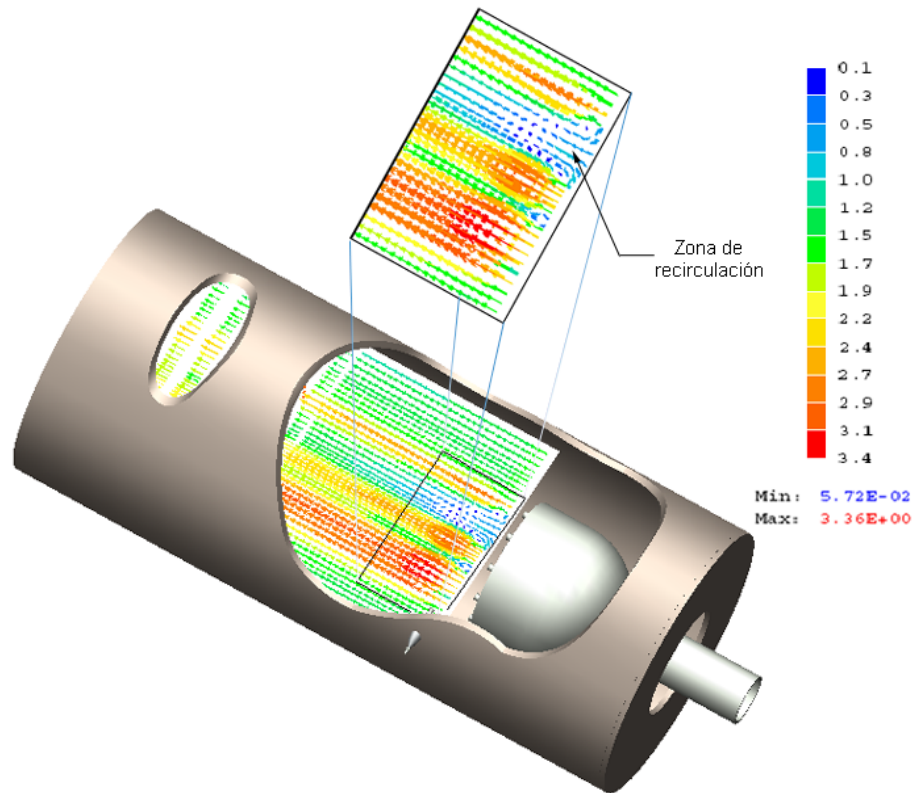


Figura 4. Campo de velocidades.

En el campo de velocidades de la figura 4, se puede observar como después de la boquilla y antes del medio poroso se forman zonas de recirculación, que tienen en su interior, básicamente, gases productos de la combustión, con una alta temperatura y que permiten estabilizar la llama. Posteriormente, el flujo tiende a ser uniforme. El aire adyacente entra por la sección anular formada por las paredes del quemador y la boquilla.

4.2 Perfil de temperaturas

La temperatura a la cual se lleva a cabo la ignición representa una medida de la eficiencia al llevarse a cabo la combustión. De igual manera podemos determinar las condiciones ideales para llevar a cabo la reacción, que es en buena parte el objetivo de esta tesis ya que lo que se requiere es eficientar el quemador y producir menos contaminantes

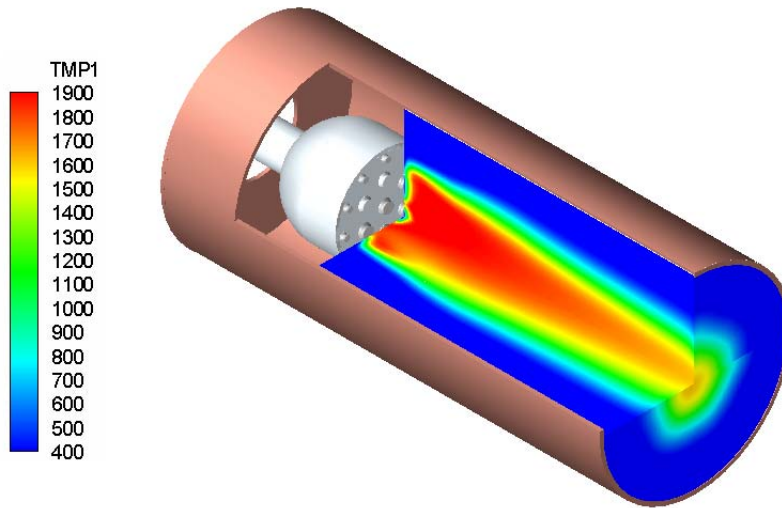


Figura 5. Contornos de temperaturas.

En la figura 5 se muestra la evolución axial de la temperatura, donde podemos apreciar que el máximo valor se localiza en la zona de recirculación, debido a que en esta área se encuentran los gases productos de la combustión los cuales estabilizan la llama. También podemos señalar que existe una zona de temperatura intermedia en la frontera entre a salida de la mezcla aire combustible y la zona de recirculación, llamada zona de reacción, donde se lleva a cabo, principalmente, la combustión.

En la zonas de recirculación, como se aprecia en la figura 5, se alcanzan temperaturas cercanas a los 1900 K, que es muy próximo al valor de temperatura adiabática calculado para esta mezcla. En esta misma región el valor del propano es muy cercano a su valor de equilibrio ($C_3H_8=0$).

Por otra parte el flujo de aire lateral que entra anularmente tiene como propósito principal enfriar la llama, cuya temperatura, después de las zonas próximas al quemador (zonas de recirculación), va disminuyendo hasta llegar a un valor promedio de 1600 K a lo largo del quemador, lo cual se debe al intercambio de energía con el flujo de aire adyacente y a la transferencia de calor por radiación.

4.3 Concentración de especies químicas mayoritarias.

4.4 Contornos de H₂O.

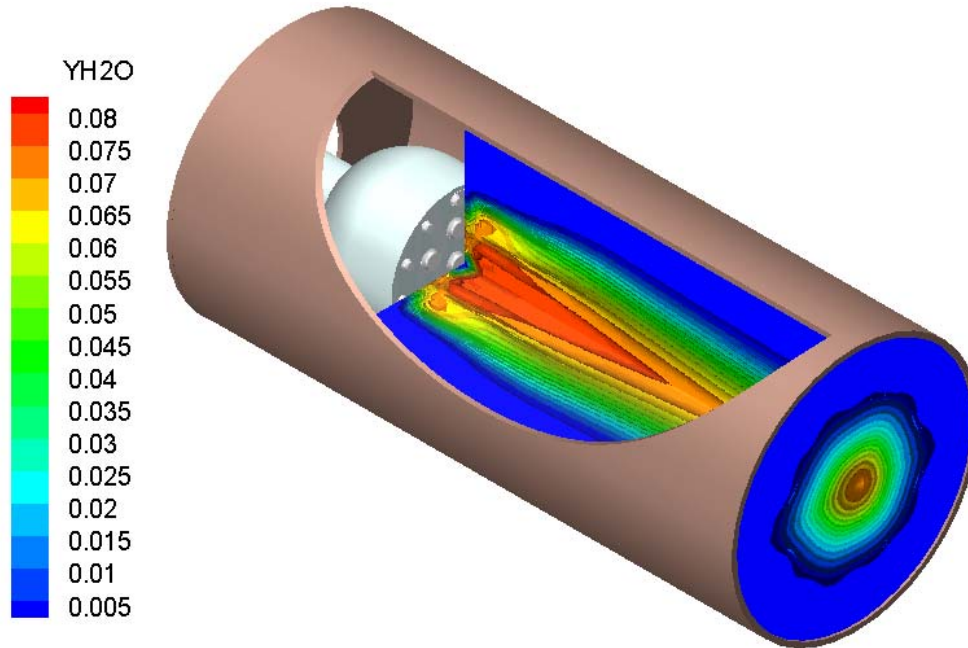


Figura 6. Contornos de fracción másica de agua

El campo de concentraciones de agua se ilustra en la figura 6. La formación de agua se da principalmente cuando hay una combustión de sustancias que contienen carbono y como resultado de las reacciones químicas que ocurren dentro del proceso de combustión. La mayor concentración de

agua se localiza en las zonas de recirculación debido principalmente a que es un espacio con gases productos de la combustión. El valor máximo de esta especie química es de 0.005, que es el valor de equilibrio químico.

4.5 Contornos de CO_2 .

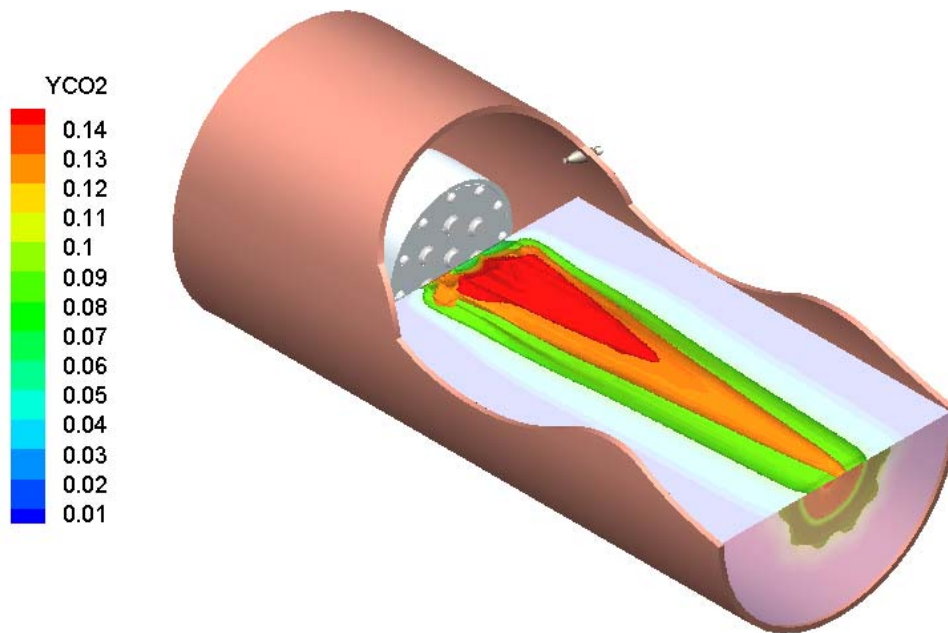


Figura 7. Contornos de fracción másica de dióxido de carbono.

La formación de CO se origina en todos aquellos procesos en los cuales se tiene lugar la ignición de sustancias que contienen carbono además es un indicador del grado de reacción de la mezcla, en la figura 7, podemos observar los contornos de CO_2 en fracción másica, se aprecia que la formación de CO_2 se da a partir de la producción de CO inmediatamente después de la región de recirculación, esta especie está directamente ligada con el comportamiento de la temperatura.

4.6 Contornos de O_2 .

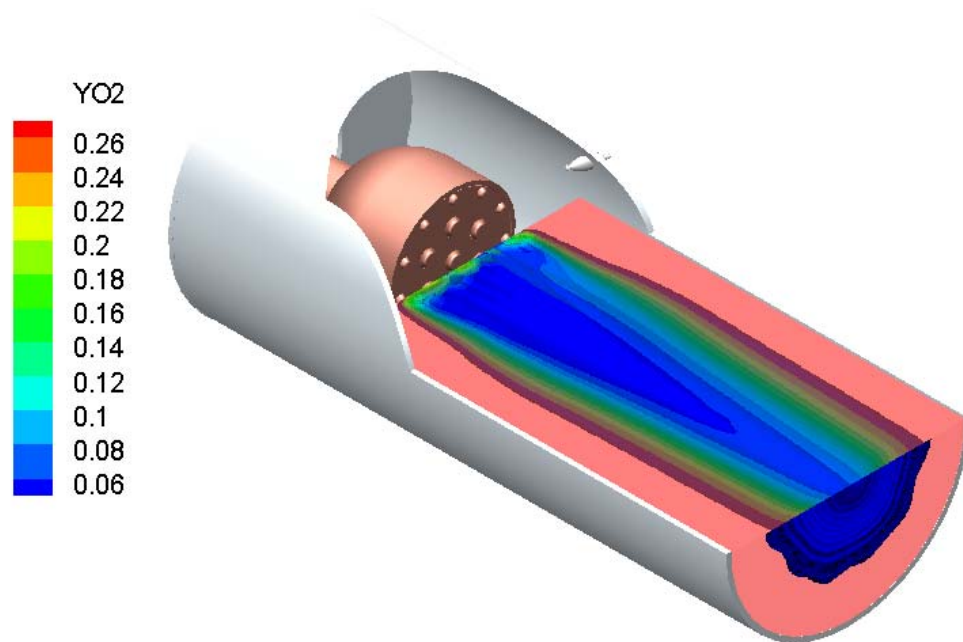


Figura 8. Contornos de fracción másica de Oxígeno.

En cualquier proceso de combustión es indispensable la presencia de oxígeno para que se lleve a cabo la oxidación, en la figura 7 se observa como se consume el oxígeno al inicio de la combustión de la misma manera en que se consume el propano. A lo largo del quemador se aprecia como aumenta la concentración de oxígeno debido a que no se produce la combustión en estas zonas y al arrastre de oxígeno que proviene del chorro de aire lateral, el cual en parte es arrastrado a hacia la parte central del quemador.

4.7 Concentración de especies químicas minoritarias.

4.8 Concentración de CO.

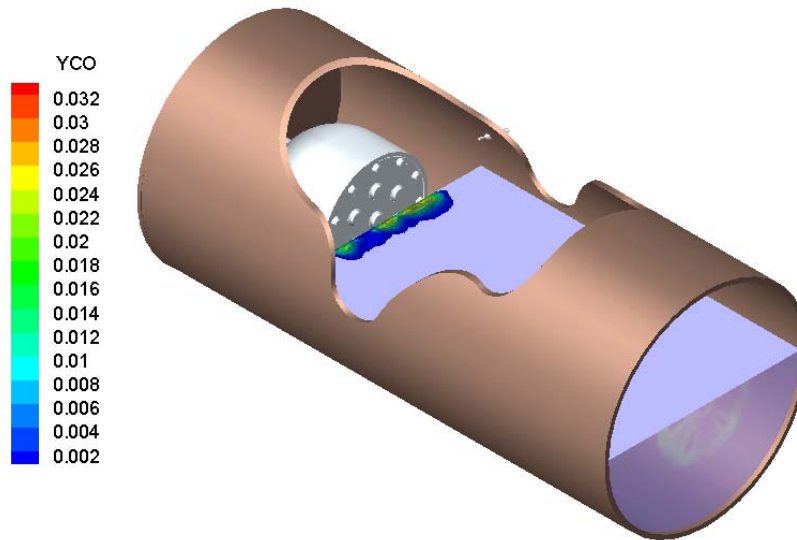


Figura 6. Contornos de fracción másica de monóxido de carbono.

En la figura 6 podemos observar los contornos de fracción másica de monóxido de carbono se aprecia que los niveles máximos de esta especie se tienen en la zona de reacción, en la cual el combustible y el oxidante reaccionan debido a la mezcla con los gases productos de la combustión, que están a una alta temperatura. En la área de reacción es donde se genera esta especie química; gran parte de este monóxido de carbono se convierte en bióxido de carbono después de pasar la zona de reacción, es por eso que poco después de pasar las zonas de recirculación tenemos muy poca presencia de la especie en el resto del quemador.

5. análisis cuantitativo

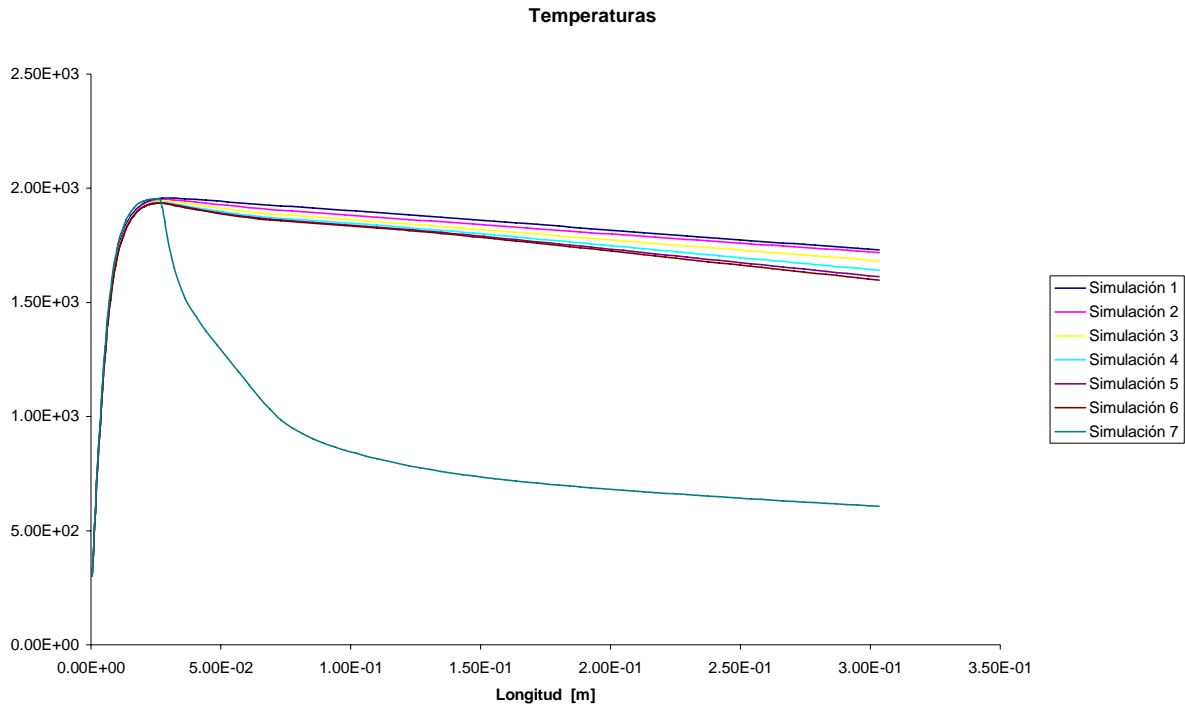
Para cumplir con el objetivo planteado de eficientar el quemador se decidieron hacer 3 diferentes variaciones a un caso base, esta tercera parte de resultados se compone de tres partes, la primer parte presenta resultados de la variación en la velocidad de salida de la mezcla aire combustible, la segunda parte de los resultados se compone de simulaciones hechas variando la distancia entre la boquilla y el medio poroso, finalmente la tercer parte de los resultados está formada por resultados de simulaciones variando la relación de la mezcla de aire-combustible que entra por la boquilla.

En la tabla 3 se presentan los datos para los cuales se hicieron 7 simulaciones, en la columna 4 y 5 se muestran las 7 diferentes variaciones en la velocidad del flujo de aire que entra de forma adyacente, así como las fracciones másicas de la mezcla con un exceso de aire (20%), que junto con la distancia que hay de la boquilla al medio poroso permanecen constante. El número de simulación se tiene en la columna 5 y es el que se presenta en las graficas 1 hasta 6.

Constantes.			V a r i a b l e s	
Dist. de la boquilla al medio poroso	Fracciones Másicas	Mezcla con exceso del 20% de Aire	Velocidad [m/s]	Numero de Simulación
7.522 [cm]	C3H8	0.0509142	7.36188	7
	O2	0.2210858	4	6
	N2	0.728	1.472377	5
	H	2.68E+06	1.0516983	4
			0.736188	3
			0.566299	2
			0.4907925	1

Tabla 3. Variaciones de velocidad

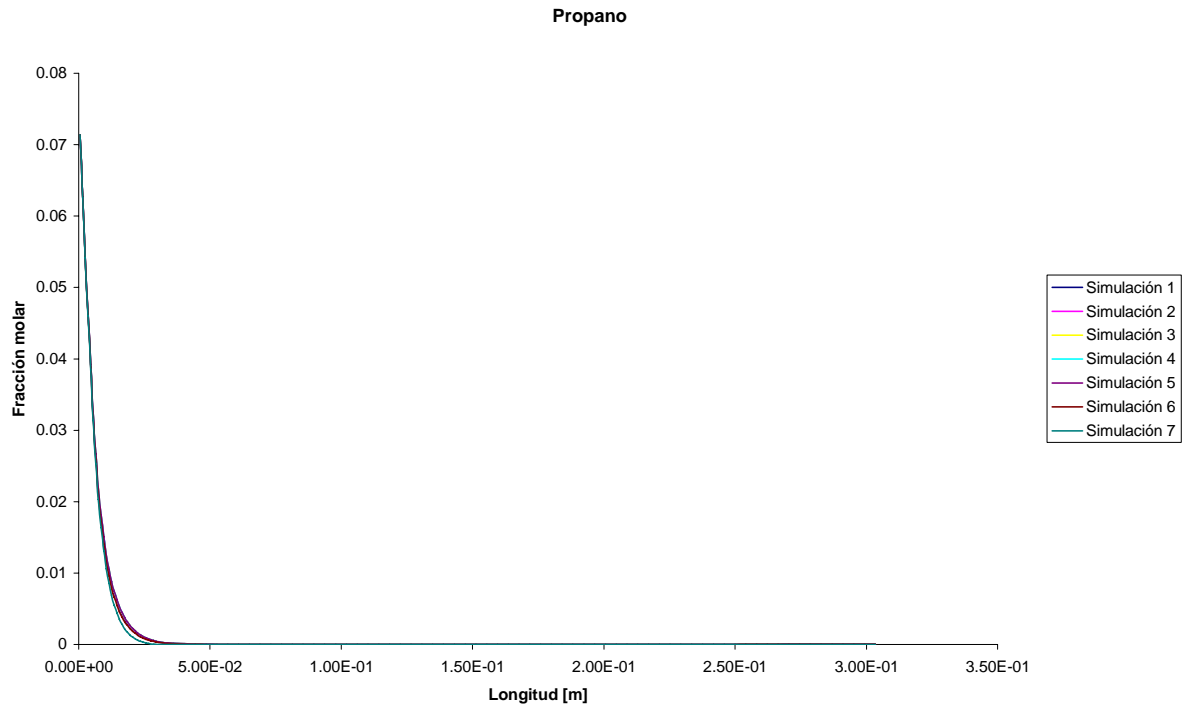
La gráfica 1 muestra la evolución axial de la temperatura al lo largo del quemador.



Gráfica 1. Perfil axial de temperaturas.

De acuerdo a la tabla 3 y observando la gráfica 1 podemos señalar que mientras la velocidad del aire que entra de forma anular al cilindro la temperatura, representada en el eje vertical de la gráfica, tiende a disminuir debido a la transferencia de calor que se da por radiación (y por arrastre). Para la simulación 7, en donde la velocidad del flujo adyacente es la mayor, se experimenta un valor máximo al inicio de la combustión y bruscamente se nota un descenso en la temperatura en todo lo largo del quemador debido al arrastre del aire adyacente.

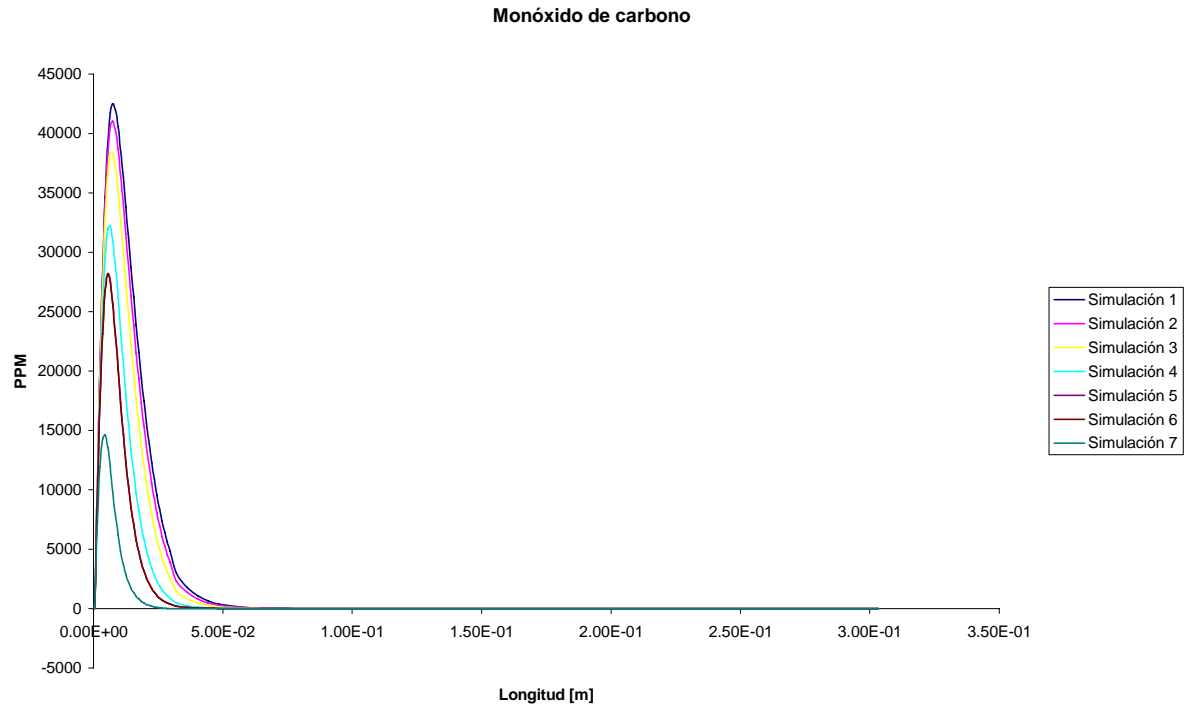
A continuación se presenta la gráfica 2 donde se muestra el propano en la parte central y a largo del quemador.



Gráfica 2. Perfiles axiales en porcentaje volumétrico de C_3H_8 .

Como podemos observar el incremento en la velocidad de salida del combustible no afecta de manera drástica la combustión, esto quiere decir que el propano se consume por completo poco después de haberse quemado.

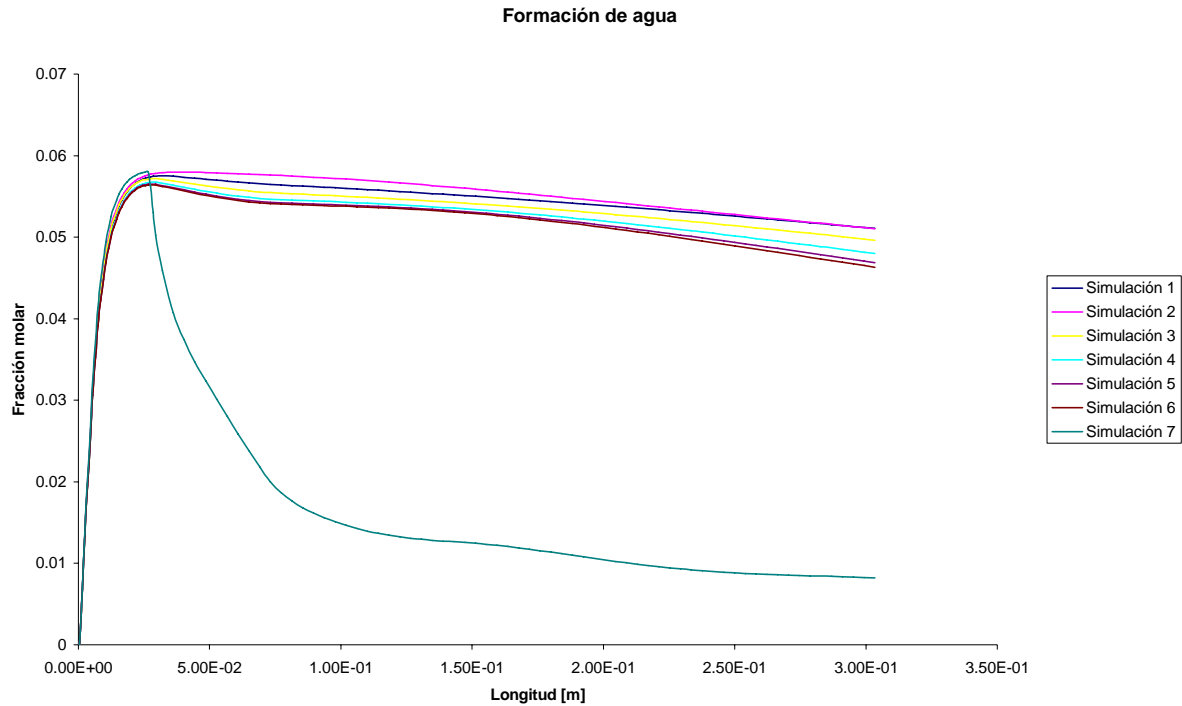
En la gráfica 3 se presentan los perfiles axiales en fracciones másicas para el monóxido de carbono a lo largo de todo el quemador.



Gráfica 3: Perfiles axiales en fracciones másicas de CO.

De acuerdo a la gráfica 3, la velocidad del aire que entra anularmente al cilindro afecta de manera sensible la formación de CO, a mayor velocidad la formación de monóxido de carbono se hace menor. Esto se deduce después de comparar la simulación 1 y 7, donde en el primer caso tenemos la velocidad la mínima y en el segundo la velocidad es máxima. Sin embargo, podemos afirmar que la formación de CO se limita a los primeros centímetros de la combustión para convertirse después en CO₂.

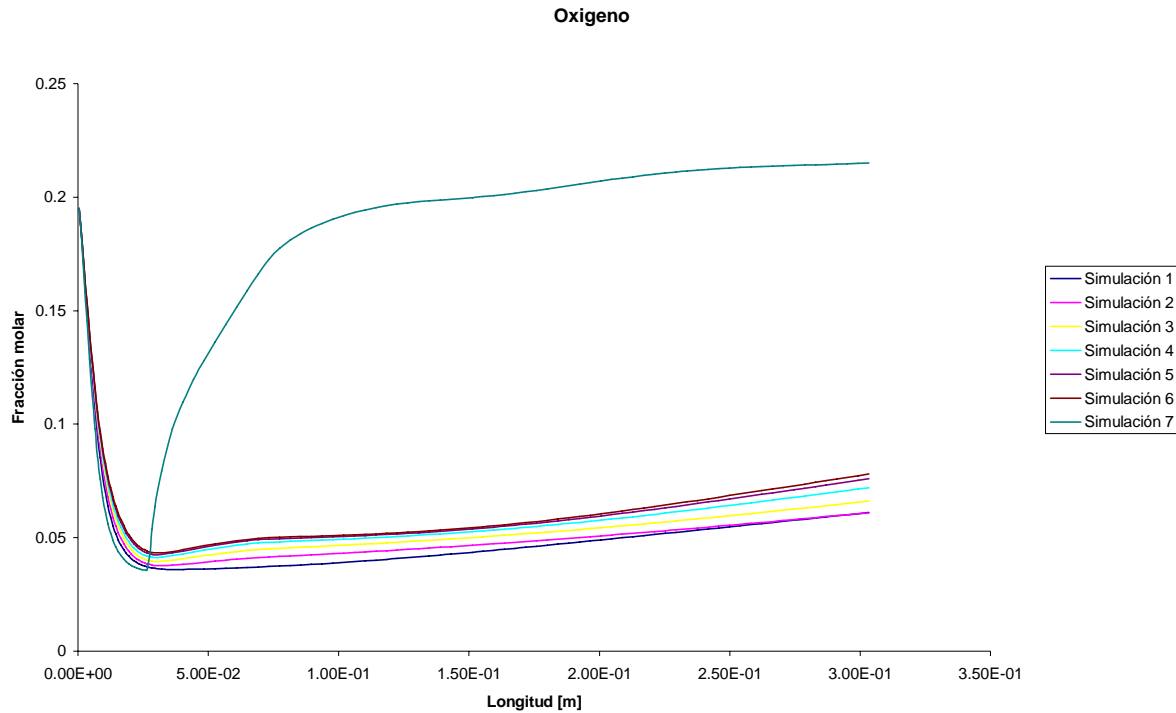
La formación de H₂O a lo largo del quemador, se muestra en la gráfica 4, y es producto de las reacciones químicas que ocurren dentro del proceso de combustión.



Gráfica 4: Fracción molar de H₂O a lo largo del quemador.

Esta gráfica 4 es muy similar a la de temperaturas, por lo tanto podemos afirmar que a mayor velocidad y gasto de aire que se inyecta por la periferia de la boquilla hay una menor interacción entre las especies debido a la entrada de aire adyacente hacia las partes interiores, y por lo tanto no se completa la formación de estas.

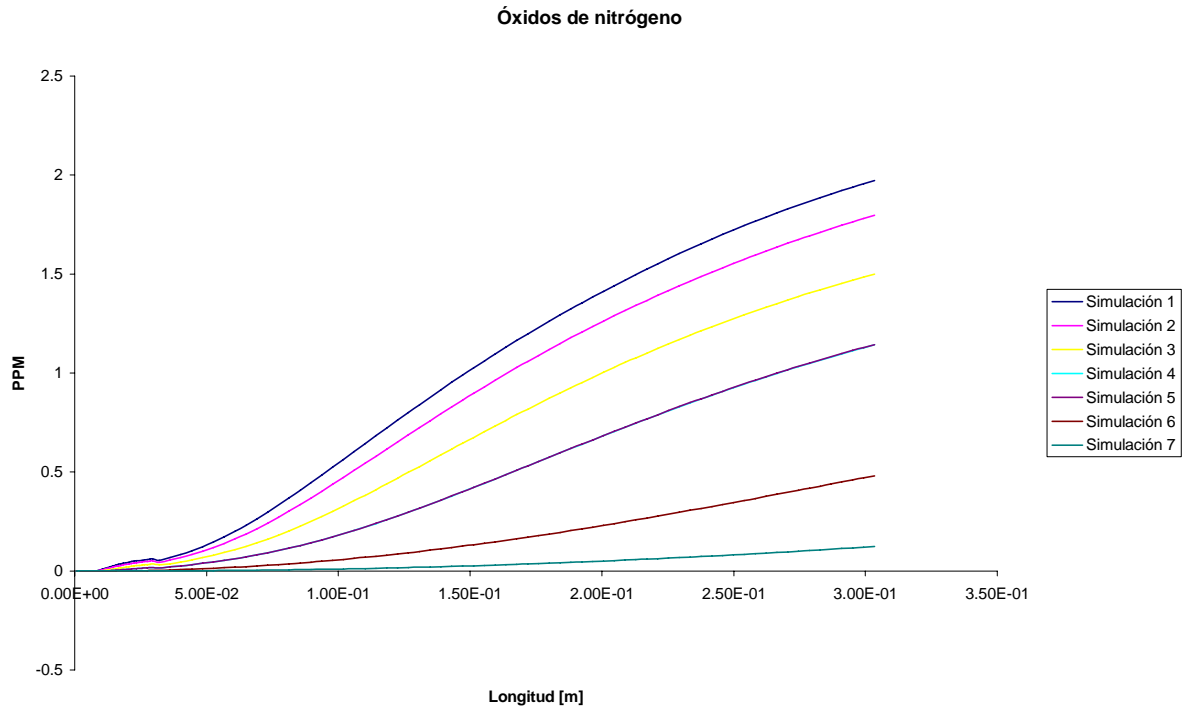
En la grafica 5 se presenta la presencia de oxígeno a lo largo del quemador. Debido a que el O₂ es indispensable para que se lleve a cabo la combustión es lógico que en las zonas de recirculación del quemador haya una poca presencia para posteriormente elevarse un poco.



Gráfica 5 Presencia de oxígeno a lo largo del quemador.

En la entrada del quemador, el oxígeno disminuye debido a su consumo en la combustión después aguas arriba se da un incremento. En la simulación 7 se aprecia que después de pasar la zona de combustión, la presencia de oxígeno se incrementa debido a que la velocidad y el gasto, de aire que entra anularmente, se incrementan considerablemente.

En la gráfica 6 podemos apreciar, en fracción molar, la presencia de óxidos de nitrógeno a lo largo del quemador al hacer variar la velocidad del aire que entra anularmente a la cámara de combustión.



Gráfica 6 Fracción molar de Óxidos de nitrógeno.

De la gráfica 6 se puede observar desde la simulación 1 hasta la 7 una disminución de la especie conforme aumenta la velocidad de aire que entra adyacentemente hasta llegar a valores mínimos que se presentan en la simulación 7. Esto se debe a que en la formación de óxidos de nitrógeno existe una dependencia fuerte con la temperatura, por lo que una disminución en ella dentro de la combustión puede producir una reducción substancial en la formación de NO_x .

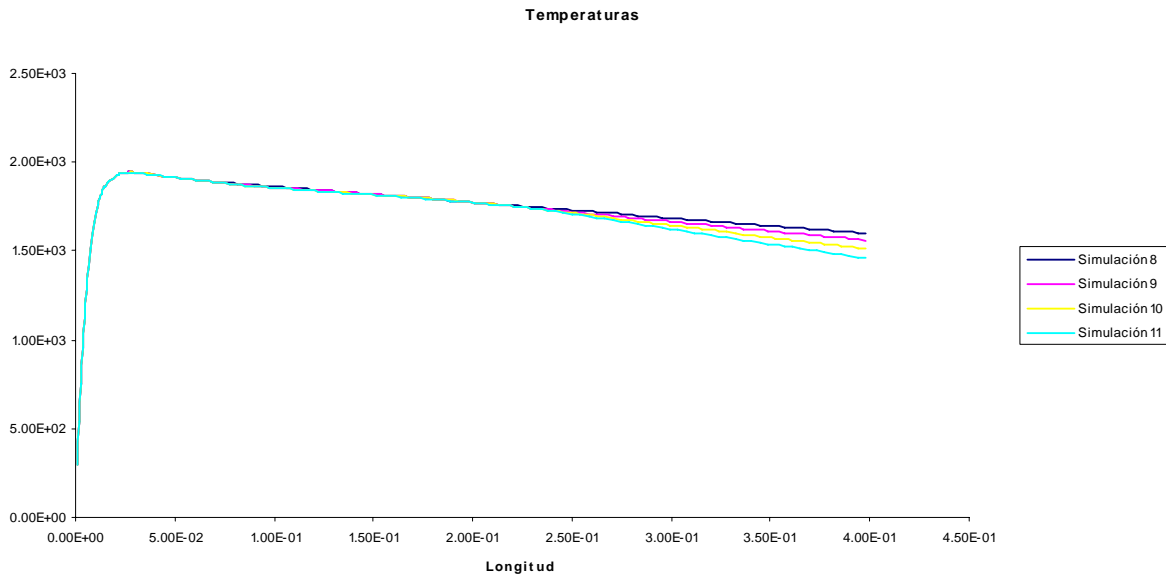
Con el fin de encontrar la mejor posición para albergar el medio poroso dentro del quemador, en la siguiente etapa de la investigación se retomaron los valores para el caso base y se llevaron a cabo simulaciones variando la distancia existente entre la boquilla y el medio poroso.

La tabla 4 se muestra los valores que permanecieron constantes. En las columnas 4 y 5 se observan las diferentes variaciones hechas. El número en la columna 5 representa el número de simulación y es el que se presenta en las graficas 7, 8 y 9.

Constantes		Variables	
Velocidad [m/s]	Mezcla con exceso del 20% de Aire	Dist. de la boquilla al medio poroso [cm]	Numero de Simulación
1.0516983	Fracciones Másicas		
	C3H8	0.0509142	7.11111
	O2	0.2210858	11.22222
	N2	0.728	15.33333
	h	2.68E+06	19.44444

Tabla 4. Variaciones de la distancia entre el medio poroso y la boquilla

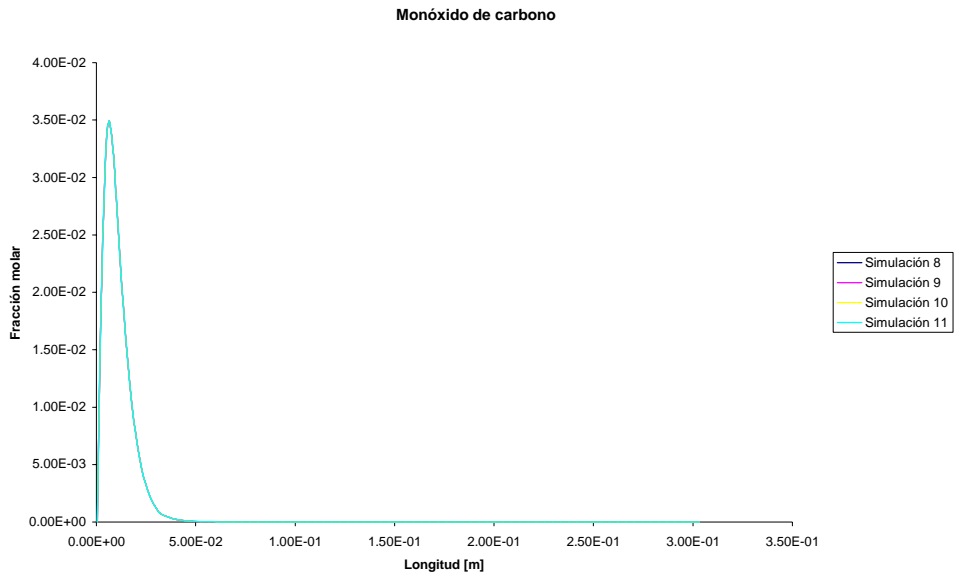
En la gráfica 7 podemos observar, la evolución axial de la temperatura a lo largo del quemador. Al variar la distancia existente entre el medio poroso y la boquilla no se nota un cambio significativo en los valores de temperatura alcanzados anteriormente, por lo tanto podemos concluir que la temperatura no se ve afectada variando la posición del medio poroso.



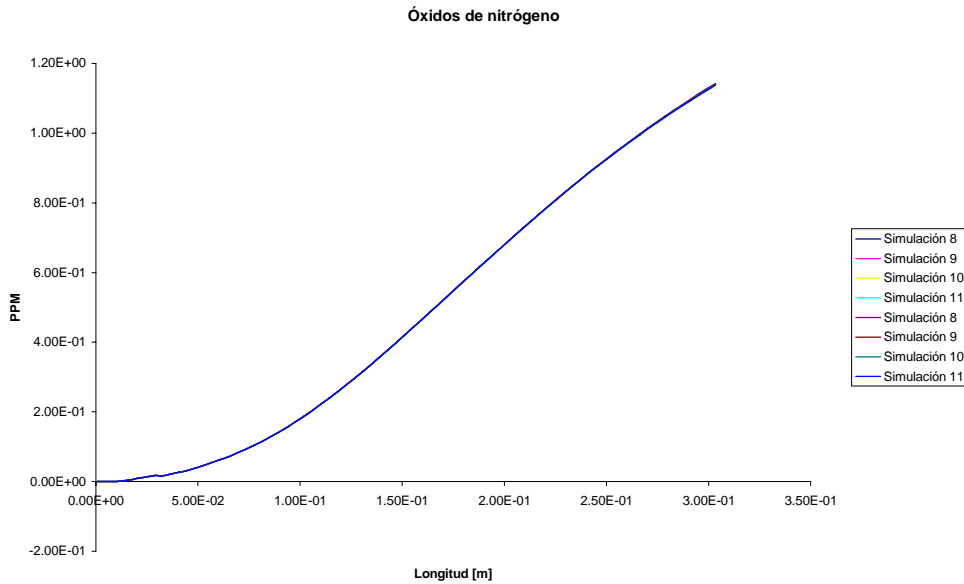
Gráfica 7. Perfil axial de temperaturas

En la gráfica 8 y 9 se muestra los perfiles axiales en fracción másica de CO y NO_x en fracción molar respectivamente. De estas graficas se aprecia que no hay cambio alguno al variar la distancia entre el

medio poroso y la boquilla, al igual que en la grafica 7. Por lo tanto, se puede concluir que el medio poroso no ayuda a confinar la llama como se propuso al inicio del trabajo y por lo tanto no es necesario



Gráfica 8. Perfiles axiales en fracciones máscas de CO.



Gráfica 9. Fracción molar de NO_x.

Para la tercera y última etapa de este trabajo de tesis, retomando el caso base se llevaron a cabo simulaciones haciendo variaciones en la relación aire combustible estableciéndola a la misma rica, pobre y estequiométrica como se muestra en la tabla 5, los porcentajes están en fracción másica.

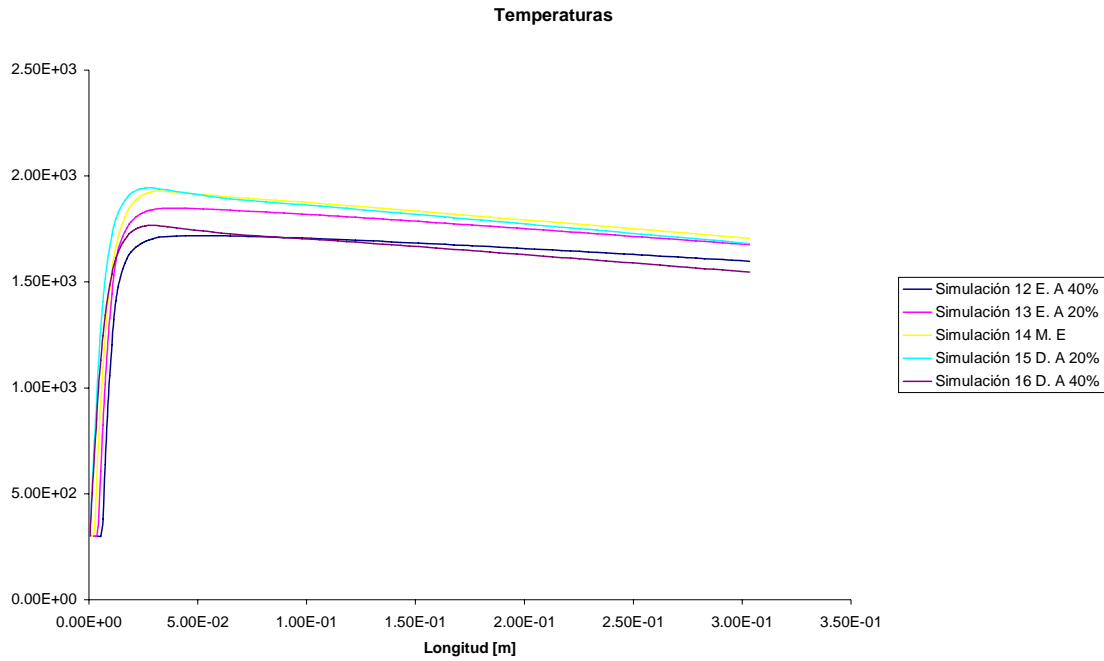
Constantes			Variables				
Velocidad [m/s]	Dist. de la boquilla al medio poroso	Fracciones Másicas	Def. A 40%	Def. A 20%	Mez. Estq.	Ex. A 20%	Ex. A 40%
1.0516983	7.522 [cm]	C ₃ H ₈	0.096619	0.0742537	0.0612	0.0509142	0.04383229
		O ₂	0.02104286	0.21562	0.2188	0.2210858	0.2227
		N ₂	0.69295166	0.71012623	0.72	0.728	0.7334671
		h	4.83E+06	3.78E+06	3.17E+06	2.68E+06	2.36E+06
		Numero de Simulación	16	15	14	13	12

Tabla 5. Variación de la relación Aire Combustible.

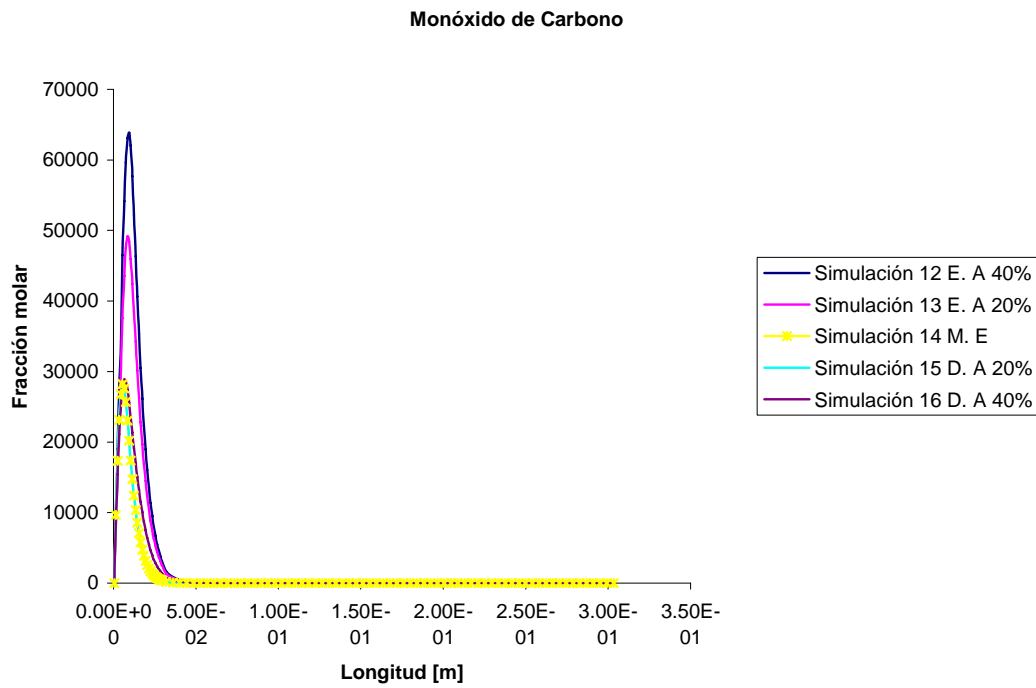
Los perfiles de temperatura a lo largo del quemador se presentan en la gráfica 10.

De la gráfica 10 se puede señalar que las temperaturas más altas se dan para los casos en donde la mezcla es estequiométrica y con exceso de aire al 20%, para el resto no hay cambios bruscos ni significativos es decir el comportamiento es aceptable. En la gráfica 11 se muestran perfiles axiales en fracciones másicas de CO, podemos indicar que para la mezcla estequiométrica tenemos los valores mas bajos de formación de esta especie, sin embargo, para los casos en los cuales existe en exceso de aire en la mezcla, la formación de la especie aumenta considerable mente y por lo tanto aumenta también la formación de CO₂

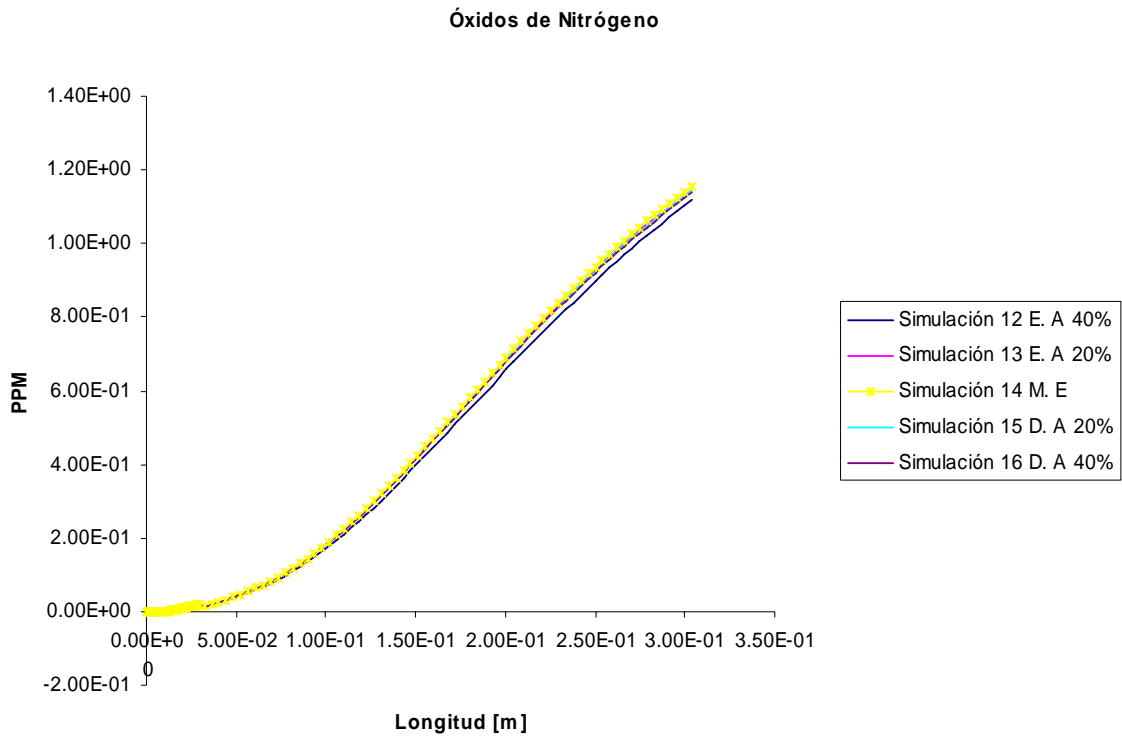
En la gráfica 12 se presenta la formación, en fracción molar, de NO_x en donde se observa que no existen cambios significativos al variar la mezcla aire combustible.



Gráfica 10. Perfil axial de temperaturas.



Gráfica 11. Perfiles axiales en fracciones másicas de CO.



Gráfica 12. Fracción molar de NO_x

Capítulo 5.

Conclusiones y Recomendaciones

1 Introducción.

En el capítulo anterior se presentan los resultados de las simulaciones que se realizaron para una llama de propano y aire, primeramente presentando resultados cualitativos y posteriormente los resultados cuantitativos, que muestran el comportamiento de la llama. En la primera etapa de nuestro estudio se tomó un caso base para simular variaciones en la velocidad de aire que entra en el espacio anular entre la boquilla y la pared del cilindro. Dados estos resultados se seleccionó la velocidad más próxima a valores experimentales, para llevar a cabo la siguiente etapa de nuestra investigación. En esta segunda etapa se hicieron variaciones en la distancia a la cual se coloca el medio poroso, lo cual nos proporcionó un importante resultado que nos indica que el medio poroso no desempeña ninguna función importante dentro del cilindro. En la tercera etapa del estudio retomamos la velocidad escogida en la primera etapa y las simulaciones se llevaron a cabo variando las concentraciones de aire-combustible entrantes por la boquilla, esto es se hicieron pobres ricas y estequiométricas, que sin lugar a duda nos arrojan resultados muy importantes.

Con los resultados obtenidos podemos formar diferentes configuraciones del cilindro y teniendo en cuenta que el objetivo de este trabajo es el mejorar el funcionamiento del cilindro, bajando los niveles de contaminación y de consumo de combustible. Por lo tanto, estaríamos hablando de una mezcla pobre al 20%, con una velocidad circundante de aire de 1.05 [m/s] y con una ausencia del medio poroso.

2. Recomendaciones

Las recomendaciones para los trabajos futuros serían en primer lugar llevar a cabo simulaciones de la misma llama, con premezcla pobre entre la mezcla estequiométrica y la mezcla pobre al 20%. También, dada la importancia de la química se requerirá modelos químicos más complicados que representen adecuadamente la misma. También se requiere de modelos más complejos que simulen adecuadamente la aerodinámica del flujo, como modelos del tipo Simulación de Grandes Escalas (Large Eddy Simulation).

Apéndice A. Modelos de turbulencia

1. Introducción

En este apéndice se presentan los modelos utilizados para modelar el fenómeno de la turbulencia, dentro del flujo reactivo desarrollado en el interior del quemador que se está simulando, hay dos modelos para la representación de este fenómeno y se clasifican de la siguiente manera

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

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

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

2. Cierres de segundo orden.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

En flujos de baja velocidad $Ma \ll 1$, el término (II) de la ecuación (5) generalmente se desprecia [4].

El término (I) se suma al término de transporte turbulento de los esfuerzos de Reynolds (c) para formar el término:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$-\frac{2}{3}\bar{\rho}\bar{\varepsilon}\delta_{ij} + \Pi_{ij} \quad (12)$$

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

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

3. Modelos de viscosidad turbulenta.

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

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

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

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

$$\rho u_i''u_\alpha'' = -\bar{\rho} \frac{v_T}{S_{C_\tau}} \frac{\partial \bar{\phi}_\alpha}{\partial x_i} \quad (14)$$

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

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

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

En este modelo, se define como:

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

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

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

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

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

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

Sustituyendo las expresiones (13) y (17) en la ecuación (16), se obtiene:

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

donde:

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

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

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

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

C_{μ}	σ_k	σ_{ε}	$C_{\varepsilon 1}$	$C_{\varepsilon 2}$
0.09	1.0	1.314	1.44	1.92

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

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

Apéndice B

1. Introducción.

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

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

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

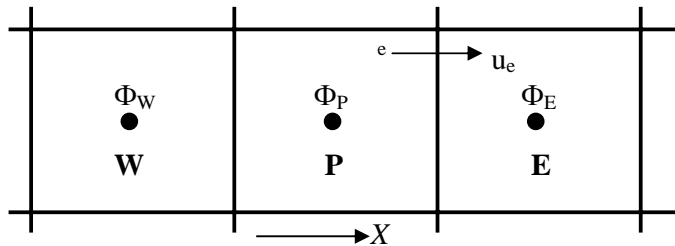


Figura 1: Diagrama esquemático de celdas.

2 Esquemas lineales

2.1 Diferencias desplazadas de primer orden

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

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

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

2.2 Diferencias centradas

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

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

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

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

2.3 Híbrido

Este esquema fue introducido por Spalding [23] y consiste en combinar los esquemas de diferencias desplazadas y centradas para calcular el valor de la propiedad ϕ en la cara del volumen de control.

La selección del esquema se hace en función del número de Peclet de la celda:

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

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

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

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

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

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

Bibliografía

- [1] R. Aris. Vectors, tensor and the Basic Equations os Fluid Mechanics.
Prentice Hall International Series in the Physical and Chemical Engineering Sciences.
1962.
- [2] B. E Lsunder, G. J Reece and W. Rodi. Progress in the development of a Raynolds stress
turbulence closure. *Journal of Fluid Mechanics*, 65:537,1975.
- [3] F. Biagioli. Comparison Between Presumed and Monte Carlo PDF Transport Methods for
Turbulent Combustion Modeling. *AIAAA-Journal of Propulsion and Power*,
13(1):109-116,1997.
- [4] R. W. Turbulent Jet Diffusion Flames. *Progress Energy Combustion Science*,
1:87-109, 1976.
- [5] B. J. Daly and F. H. Harlow. Transport Equations in Turbulence. *Physics of Fluids*,
13(11):2634-2649, 1970.
- [3] A. Favre. *Problems of Hydrodynamics and Continuum Mechanics*. SIAM, 1969.
- [4] H. H. Ferziger and M. Peric *Computational Methods for Fluid Dynamics*. Springer
Verlag. 1996.
- [5] M. M. Gibson and B. A. Younis. Calculation of Swirling Jets with a Reynolds Stress
Closure. *Physics of Fluids*, 29-38,986.
- [6] W. P. Jones. Models for Turbulent Flows with Variable Density and Combustion. IN
W. Kollmann, editor, *Prediction Methods for Turbulent Flows*, Lecture Series 1979-2.
V on Karman Institute for Fluid Dynamics. Rhode Saint Genese Belgium, January 1979.

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

- Power*, 114:33-38, 1992.
- [18] S. V. Patankar. *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. Series in Computational Methods in Mechanics and Thermal Science. Hemisphere Publishing Corporation, January 1980.
- [19] S. V. Patankar and D. B. Spalding. A Calculation Procedure for Heat, Mass and Momentum Transfer in Three Dimensional Parabolic Flows. *Int. J. Heat and Mass Transfer*, 15:1787-1806, 1972.
- [20] L.D. Smoot and P.J Smith. *Coal Combustion and Gasification*, Plenum Press, New York, 1985.
- [21] L. D. Soot and P. J. Smith. *Coal Combustion and Gasification*. Plenum Press, New York, 1985.
- [22] D. B. Spalding. D. B. Spalding. Mathematical Modeling of Fluid Dynamics, *Heat Transfer and Math Transfer Process*. Technical Report HTS/8011, Imperial College of Science Technology and Medicine, 1980.
- [23] D. B. Spalding. A Novel Finite-Difference Formulation for Differential Expressions Involving Both First and Second Derivates. *Int. Journal. Num. Methods Engineering*, 4:551, 1992.
- [24] W. Vicente, "*Simulación numérica de la combustión y formación de contaminantes en llamas turbulentas premezcladas pobres* ", Zaragoza, mayo 2000.
- [25] J. Wamatz, U. Mass, and R. W. Dibble. *Combustion Springer. 1996*.
- [26] F. A. Williams. *Combustion Theory: Secons Edition*, the Benjamin/Cummings Publishing Company. 1985.
- [27] Tesis que para obtener el titulo de Ingeniero Mecánico presenta Sangines Coral Daniel Eric; Simulación y Validación experimental de un Quemador de Premezcla pobre con un medio poroso; México, UNAM; 2005