



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE ESTUDIOS

SUPERIORES ZARAGOZA

ANÁLISIS NÚMÉRICO DE LAS CONDICIONES DE OPERACIÓN DE
UNA LLAMA DIFUSIVA.

TESIS

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE

INGENIERO QUÍMICO

PRESENTA:

CLAUDIA IVETTE ALVAREZ OLVERA

Director: Mtro. en Ing. LUIS MANUEL CERVANTES MARCELINO

FACULTAD DE INGENIERIA

México, D.F. 2014





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.

Contenido

ÍNDICE DE FIGURAS.....	5
ÍNDICE DE TABLAS.....	6
INTRODUCCIÓN	7
RESUMEN Y OBJETIVO	8
CAPÍTULO 1 COMBUSTIÓN Y LLAMAS	9
1.1 COMBUSTIÓN	9
1.2 MODELO DE COMBUSTIÓN SCRS.....	10
1.3 MODELO EDDY BREAK UP	11
1.4 LLAMA	12
1.4.1 LLAMAS DE PREMEZCLA LAMINAR	12
1.4.2 LLAMAS DE PREMEZCLA TURBULENDA	13
1.4.3 LLAMAS DE DIFUSIÓN LAMINAR	15
1.4.4 LLAMAS DE DIFUSIÓN TURBULENDA	17
CAPÍTULO 2 ECUACIÓN DE TRANSPORTE	19
2.1 ECUACIÓN DE CONTINUIDAD	19
2.2 ECUACIÓN DE LA CANTIDAD DE MOVIMIENTO	20
2.3 ECUACIÓN DE LA CONSERVACIÓN DE LA ENERGÍA	22
2.4 CONSERVACIÓN DE LAS ESPECIES QUÍMICAS	24
2.5 ECUACIONES DE ESTADO Y FLUJO DIFUSIVO	25
2.6 PROMEDIADO DE LAS ECUACIONES	27
CAPÍTULO 3 MÉTODO DE SOLUCIÓN	30
3.1 MÉTODO DE VOLÚMENES FINITOS.....	30
CAPÍTULO 4 CONFIGURACIÓN Y CONSIDERACIONES REALIZADAS PARA LA SIMULACIÓN.....	35
4.1 CONFIGURACIÓN GEOMÉTRICA	35
4.2 CONDICIONES DE FRONTERA Y CONSIDERACIONES NUMÉRICAS	36
CAPÍTULO 5 RESULTADOS	38
5.1 PROPIEDADES DE FLUJO.....	38
5.1.1 TEMPERATURA.....	38
5.1.2 VELOCIDAD	43
5.1.3 DENSIDAD	49
5.1.4 FRACCIONES MÁNICAS.	50
CONCLUSIONES.....	52

SUGERENCIAS	53
APÉNDICE A	54
A.1. CONCEPTO	54
A.2 NIVELES DE MODELIZACIÓN.	56
A.3 MODELOS DE VISCOSIDAD TURBULENTA.....	58
A.3.1 MODELO $\mathcal{K} - \varepsilon$	59
APÉNDICE B	61
B.1 ESQUEMAS LINEALES DE DISCRETIZACIÓN.	61
APÉNDICE C.....	64
GLOSARIO	69
REFERENCIAS	71

Índice de figuras

Figura 1.- Escalas turbulentas [José Ma. Desantes, 1998].	13
Figura 2.- Zonas de flujo [José Ma. Desantes, 1998].	14
Figura 3.- Diagrama de Borgui.	14
Figura 4.- Variación del carácter de una difusión gaseosa en función de la velocidad del chorro de combustible que muestra el despegue de llama experimental [I. Glassman, 1987].	16
Figura 5.- Formas generales de la llama sub ventilada y sobre ventilada, las alturas reales varían con las condiciones de flujo [I. Glassman, 1987].	16
Figura 6.- Relación de la longitud de llamas múltiples (L_m) con respecto a la de llamas aisladas (L_a), en función de la disposición y separación de los orificios [Manuel Márquez Martínez, 1989].	17
Figura 7.- Tipos de llama que pueden lograrse variando las características de mezclado recirculación y rotación [Manuel Márquez Martínez, 1989].	18
Figura 8.- Representación del vector n (normal de la diferencial de superficie). Figura extraída de [Irving h. Shames, 1979].	20
Figura 9.- Fuerzas de superficie. Figura extraída de [Irving h. Shames, 1979].	21
Figura 10.- Esfuerzos normales y tangenciales actuando sobre un elemento fluido.	23
Figura 11.- Las variables del sistema se descomponen en un valor medio y otro fluctuante debido a la turbulencia. Figura extraída de [José Ma. Desantes, 1998].	27
Figura 12.- Discretización del dominio en pequeños volúmenes de control.	31
Figura 13.- Notación de una celda y las celdas vecinas.	31
Figura 14.- Celda bidimensional.	32
Figura 15.- Configuración del generador de vapor	35
Figura 16.- Condición de no deslizamiento.	36
Figura 17.- Mallado del dominio de cálculo para el proceso de combustión.	37
Figura 18.- Contornos de temperatura, extraídos de un plano que pasa por el centro de la boquilla del oxígeno y dos de metano, para 50%, 100% y 150% de oxígeno.	39
Figura 19.- Plano del centro de la llama.	40
Figura 20.- Gráfica de temperatura adiabática de llama para cada una de las proporciones simuladas.	41
Figura 21.- Gráfica de temperatura a la salida del generador de vapor para cada una de las proporciones simuladas.	42
Figura 22.- Contornos de velocidad, extraídos de un plano que pasa por el centro de la boquilla del oxígeno y dos de metano, para 50%, 100% y 150% de oxígeno.	43
Figura 23.- Longitud de las recirculaciones.	44
Figura 24.- Relación de la velocidad y la magnitud de las recirculaciones.	44
Figura 25.- Vectores de velocidad.	45
Figura 26.- Vectores de velocidad.	46

Figura 27.- Plano que pasa por el centro de las recirculaciones.	47
Figura 28.- Gráfica de temperaturas sobre el centro de las recirculaciones.	48
Figura 29.- Contornos de densidad, extraídos de un plano que pasa por el centro de la boquilla del oxígeno y dos de metano, para 50%, 100% y 150% de oxígeno.	49
Figura 30.- Densidad a la salida del generador de vapor para cada una de las proporciones simuladas.....	49
Figura 31.- Contornos de las fracciones másicas para las especies químicas presentes en el proceso de combustión con defecto de 50% de oxígeno.	50
Figura 32.- Contornos de las fracciones másicas para las especies químicas presentes en el proceso de combustión con 100% de oxígeno teórico.	51
Figura 33.- Contornos de las fracciones másicas para las especies químicas presentes en el proceso de combustión con exceso de 150% de oxígeno.	51
Figura 34.- esquemas lineales de discretización.	61

Índice de tablas

Tabla 1: Condiciones de entrada de los gases.....	36
Tabla 2: Velocidad de entrada a la cámara de combustión.	37
Tabla 3.- Porcentaje de error.	40

Introducción

En la República Mexicana el 91% de la energía primaria se obtiene por la quema de algún combustible fósil o derivado de la refinación del petróleo, lo cual implica que las necesidades energéticas del país dependen en su mayor parte del petróleo.

México cuenta con reservas probadas de crudo por 12,352 millones de barriles, ocupando el lugar número 14 en el mundo, con el nivel de producción actual se calcula que dichas reservas durarán aproximadamente 11 años [PEMEX, 2014].

Las reservas petroleras son definidas como las cantidades estimadas de hidrocarburos (aceite, crudo, gas natural y líquidos de dicho gas) que pueden ser recuperadas comercialmente de acumulaciones conocidas en una fecha dada, por lo que es importante resaltar que las partes no recuperables de los hidrocarburos originales pueden ser consideradas como reservas. Dependiendo de las condiciones económicas, tecnológicas o de otra índole que puedan llegar a convertirlas en volúmenes recuperables (factores que determinan la certidumbre de las reservas) [PEMEX, 2014], estas Reservas son clasificadas de la siguiente manera:

- ✱ Reservas Probadas.- son cantidades de hidrocarburos que mediante datos obtenidos de geociencias y de ingeniería, demuestran con certidumbre razonable que serán recuperadas comercialmente en años futuros de yacimientos conocidos bajo condiciones económicas, métodos de operación y regulaciones gubernamentales existentes a una fecha específica.
- ✱ Reservas Probables.- son las reservas no probadas para las cuales el análisis de la información geológica y de ingeniería del yacimiento sugiere que son más factibles de ser comercialmente recuperables.
- ✱ Reservas Posibles.- son los volúmenes de hidrocarburos cuya información geológica y de ingeniería sugiere que es menos factible su recuperación comercial que las reservas probables.

Para poder recuperar el petróleo que hasta el momento no ha sido posible extraer existen diversos métodos térmicos en la industria petrolera. Una de las técnicas que se encuentra en etapa de desarrollo es la Generación de Vapor In Situ, que consiste en producir vapor en un pozo con hidrocarburos, mediante la inyección de un combustible y un oxidante en fase gaseosa, junto con agua en fase líquida que es evaporada al absorber la energía liberada en el proceso de combustión. Este proceso se realiza en un generador de vapor cercano al pozo, dicho vapor aumenta la presión y la temperatura del pozo, disminuyendo la viscosidad del crudo, haciendo factible la extracción de los hidrocarburos que éste contiene. Uno de los componentes principales, para el método de recuperación de hidrocarburos, es el generador de vapor que debe ser diseñado en su totalidad, iniciando con el estudio de los puntos críticos en el proceso de combustión.

Resumen y objetivo

Este trabajo se enmarca en el campo de la CFD (Computational Fluid Dynamics), donde se estudió el proceso de combustión de una llama difusiva turbulenta con el fin de analizar el diseño de un generador de vapor para el proceso de "Generación de Vapor In Situ" (propuesto por un grupo de trabajo del Instituto Politécnico Nacional, así como la geometría y acomodo de las boquillas de inyección).

La llama fue producida a presión atmosférica por la inyección de oxígeno puro mediante una boquilla central y metano por cuatro boquillas periféricas, se varió la velocidad de inyección del metano para lograr un exceso y un defecto de oxígeno (para el proceso de combustión), y así analizar las propiedades de la llama para poder tomar decisiones con respecto al diseño del generador de vapor. Dicho sistema se analizó mediante la simulación numérica del proceso de combustión, realizada con el software Phoenics que emplea el método de volúmenes finitos para resolver las ecuaciones de transporte que describen este proceso de combustión, la opción RANS (Reynolds-Average Navier-Stokes Equations) para el cierre de las ecuaciones generadas, además, se utilizó el SCRS (Simple Chemical Reaction System) y el modelo EBU (Eddy Break Up) para modelar el proceso de combustión en el generador de vapor.

Los resultados de las simulaciones obtenidas permitieron conocer la distribución de velocidades, densidad, fracciones másicas y sobre todo la distribución de temperaturas. Los valores de las predicciones de temperatura se compararon con los cálculos analíticos de temperatura de llama adiabática y con los datos obtenidos en el trabajo realizado por Rebeca Pupo (2011), el cual consiste en el cálculo de la temperatura de combustión adiabática de una reacción de combustión de metano puro y oxígeno, variando las fracciones molares.

Cada uno de los puntos anteriormente expuestos se desarrolla a lo largo de cinco capítulos y tres apéndices que componen el presente trabajo. En el primer capítulo se presenta una descripción del proceso de combustión, su clasificación, algunos modelos que explican este proceso y una clasificación de los diferentes tipos de llamas, posteriormente en el segundo capítulo, se describen las ecuaciones constitutivas que rigen el proceso de combustión de una llama difusiva turbulenta, las cuales no tienen solución analítica por lo que es necesario el uso de métodos numéricos y recursos computacionales para dar solución a éste sistema de ecuaciones, dichos métodos se describen en el tercer capítulo. En el cuarto capítulo se continúa con la descripción de la geometría, dominio de cálculo y mallado utilizado en las simulaciones junto con las consideraciones numéricas realizadas para cada una de las corridas. Los resultados obtenidos son presentados en el quinto capítulo, resultados que fueron analizados, dando paso a las conclusiones que se muestran en el sexto capítulo.

Capítulo 1

Combustión y llamas

En este capítulo se desarrollan los conceptos que conciernen a la descripción del conjunto de fenómenos que caracterizan el proceso de combustión, algunas opciones existentes para modelar este proceso y una clasificación de los diferentes tipos de llamas de acuerdo al régimen de flujo y a la mezcla de reactantes que se inyecta a la cámara de combustión.

1.1 Combustión

La combustión es el conjunto de procesos fisicoquímicos por los cuales se libera parte de la energía interna del combustible mediante una reacción de oxidación exotérmica que se realiza rápidamente, esta reacción se produce entre un combustible y un comburente. Los grados de la combustión varían ampliamente, desde la combustión lenta hasta la combustión rápida o detonación; la velocidad de combustión y la reacción de combustión dependen de la afinidad que presente el combustible con el comburente y de las condiciones en que se realice la combustión.

Una vez que se ha iniciado la combustión, luego de que se alcanzó la temperatura de ignición, la energía que se desprende debe ser suficiente para mantener el proceso. Los procesos de combustión se pueden clasificar en:

- Combustión completa: se produce cuando el combustible es oxidado hasta el máximo grado posible.
- Combustión incompleta: ocurre cuando no se alcanza el grado máximo de oxidación presentándose sustancias combustibles en los productos (*UHCs*), estas sustancias se denominan hidrocarburos no quemados.
- Combustión teórica o estequiométrica: es la combustión que se realiza con la cantidad de oxígeno estrictamente necesaria para producir la oxidación total del combustible sin que se produzcan *UHCs*. Esta combustión se denomina teórica porque en la práctica siempre se producen *UHCs*.

El proceso de combustión se puede modelar atendiendo a los aspectos que se muestran a continuación:

- ⊕ Según la dependencia del espacio: unidimensional, bidimensional, tridimensional.
- ⊕ Según la dependencia temporal: estacionario y transitorio.
- ⊕ Según la condición de mezclado: premezclados y separados (llamas de difusión).
- ⊕ Según la propagación: homogéneo (en reposo, bien agitado), onda de deflagración (subsónica) y onda de detonación (supersónica).
- ⊕ Según el régimen de flujo: laminar y turbulento.
- ⊕ Según la fase del combustible: gaseosa, condensada (con evaporación), y sólida.
- ⊕ Según la convección: sin convección, con convección natural o con convección forzada.

Según los efectos de compresibilidad: incompresible, compresible.

1.2 Modelo de combustión SCRS

El modelo denominado SCRS (Simple Chemical Reaction System), es una simplificación de la reacción de combustión que facilita los cálculos de cómputo. El SCRS postula que la combustión se lleva a cabo mediante la oxidación de un combustible y un oxidante teniendo como resultados solamente productos de combustión, sin especies intermedias.

Combustible + oxidante → productos.

Esta reacción es irreversible; es decir, ocurre en un solo sentido, por lo tanto, el SCRS hace referencia al carácter global del proceso de combustión, tomando en cuenta sólo las concentraciones de las especies finales.

$$Y_{com} + Y_{oxi} + Y_{pro} = 1 \quad (1.2.1)$$

$$Y_{pro} = 1 - Y_{oxi} - Y_{com} \quad (1.2.2)$$

$$Y_{com} = 0 \quad (\text{todo el combustible quemado})$$

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

Donde Y_{com} es la fracción másica de combustible, Y_{oxi} es la fracción másica de oxígeno y Y_{pro} es la fracción másica de productos de la combustión.

Los productos son representados por una sola fracción másica que caracterizará una mezcla de varias especies químicas presentes en el proceso de combustión, como una sola fracción másica de productos compuestos por dióxido de carbono y vapor de agua, denominada fracción de mezcla " ϕ_z ".

$$Y_{pro} = \phi_z \quad (1.2.3)$$

$$Y_{pro} = Y_{CO_2} + Y_{H_2O} \quad (1.2.4)$$

1.3 Modelo Eddy Break Up

Fue propuesto por primera vez por Spalding [Spalding, 1971], modificado posteriormente por distintos autores, el modelo EBU supone que en la reacción química, el factor limitante es la velocidad a la que los reactantes se mezclan a nivel molecular debido a la turbulencia, por lo tanto, es catalogado como un modelo basado en la descripción de la tasa de reacción en términos del mezclado turbulento.

La velocidad de mezcla puede ser representada mediante un término proporcional a la velocidad de disipación de las fluctuaciones de la cantidad escalar, que se puede modelar como:

$$\dot{w}_f = -C_{EBU} \bar{\rho} \frac{\tilde{\epsilon}}{\kappa} \sqrt{\tilde{Y}_i''} \quad (1.3.1)$$

donde C_{EBU} es una constante y \tilde{Y}_i'' es la varianza de Favre de la fracción másica del combustible. Esta varianza puede ser modelada mediante una ecuación de transporte, para escalares reactivos el término de reacción química da lugar a correlaciones no cerradas difíciles de modelar y que son importantes dentro del fenómeno de combustión turbulenta.

Una opción desarrollada por Magnussen y Hjertager [Magnussen and Hjertager, 1971], es representar a \tilde{Y}_i'' en función de la fracción másica de la especie química con menor presencia:

$$\dot{w}_f = -A_{EBU} \bar{\rho} \frac{\tilde{\epsilon}}{\kappa} \left(\tilde{Y}_c, \frac{\tilde{Y}_o}{s}, \frac{\tilde{Y}_p}{1+s} \right) \quad (1.3.2)$$

donde s es el coeficiente estequiométrico de reacción (este coeficiente se define como la masa de oxidante por unidad de combustible necesario para hacer reaccionar toda la mezcla), \tilde{Y}_c , \tilde{Y}_o , \tilde{Y}_p las fracciones másicas del combustible, oxidante y productos de la combustión, respectivamente. La constante A de la ecuación suele tomar valores entre cuatro y dos; pero, son ajustadas para configuraciones concretas.

La ausencia o presencia de formas muy simplificadas de efectos cinéticos, hacen el uso de este modelo desaconsejable cuando dichos efectos son relevantes en el fenómeno a modelar (como en los de formación de contaminantes, ignición o extinción de llama).

1.4 Llama

La llama es la zona o región en la que tiene lugar la reacción de combustión, esta reacción va acompañada de liberación de energía, los gases producidos adquieren temperaturas elevadas con lo que emiten radiación en parte luminosa. El frente de llama es la zona que marca la separación entre el gas quemado y el gas sin quemar, es aquí donde tienen lugar las reacciones de oxidación principales, el espesor del frente de llama puede ir desde menos de un milímetro hasta ocupar totalmente la cámara de combustión.

La propagación de la llama es el desplazamiento de ésta a través de la masa gaseosa, dicha propagación tiene lugar en el frente de llama, la velocidad de propagación va a depender de la transmisión de calor entre la llama y las zonas contiguas (gases quemados y no quemados). Cuando los gases sin quemar alcanzan la temperatura de ignición, entonces empezarán el proceso de combustión.

Existen diferentes tipos de llamas que se pueden clasificar según el régimen de flujo, en llamas laminares y turbulentas. También se diferencian las llamas en las que los reactantes arriban separados o perfectamente mezclados, llamas de difusión y llamas premezcladas respectivamente. Sin embargo en la práctica pueden presentarse llamas de tipo intermedio, es decir, llamas parcialmente premezcladas, o llamas en las que una de las corrientes es laminar y la otra turbulenta. A continuación se describen los cuatro tipos de llamas antes mencionados.

1.4.1 Llamas de premezcla laminar

En las llamas de premezcla laminar, como su nombre lo indica, el combustible se aporta mezclado a la cámara de combustión. Si la premezcla contiene todo el oxígeno necesario, se trata de una llama de premezcla total y en caso contrario se habla de una llama de premezcla parcial. En las llamas de premezcla se observa un cono interno de color azul debido a la presencia de radicales hidroxilo, cuya superficie constituye el frente de llama. La longitud de la llama se calcula asimilándola al cono interno anteriormente descrito.

No todas las proporciones de combustible-oxígeno son adecuadas para la combustión, para cada combustible existen límites de inflamabilidad, inferior y superior, fuera de los cuales la combustión no es posible, la presencia de gases inertes altera el valor de estos límites. Aunque la proporción de mezcla se halle dentro de los límites de inflamabilidad, no siempre se consiguen llamas estables, si se aumenta la velocidad de la mezcla de gases, la llama se separa de la boca de salida e incluso puede desprenderse y extinguirse; por el contrario, disminuyendo la velocidad puede retroceder y llegar incluso a prender en el inyector.

1.4.2 Llamas de premezcla turbulenta

En comparación con las llamas laminares en la combustión premezclada turbulenta el perfil del frente de llama no está definido, es mucho más corto y rugoso. Además los procesos son rápidos, y en cada punto e instante hay un valor de la propiedad diferente.

En cuanto a las llamas turbulentas, los problemas de estabilización son más complejos, ya que si bien la velocidad de propagación de la llama alcanza valores del orden de los metros por segundo, las velocidades de la mezcla son del orden de los cincuenta metros por segundo. En estos casos la estabilidad se asegura mediante la recirculación de los productos de combustión o intercalando obstáculos, que obliga a las venas de gases calientes a aportar calor hacia la base de la llama.

El flujo turbulento afecta a la velocidad de combustión de dos formas diferentes; según su escala espacial y según su intensidad. En el Apéndice A se caracteriza el flujo turbulento.

- ❖ » Cuando las escalas integrales de la turbulencia son pequeñas, del orden del espesor del frente de llama o menores, véase figura (1a); el efecto sobre los fenómenos de transporte es predominante frente a la distorsión ocasionada en el frente de llama. Se suele suponer que el espesor del frente de llama no se ve afectado, mientras que si se acentúan las fluctuaciones en los fenómenos de transporte másico y térmico en el mismo. Este régimen se conoce como de llama distribuida.
- ❖ » Cuando las escalas integrales son más grandes, véase figura (1b), se supone, por el contrario, que la turbulencia no afecta a los fenómenos de transporte en el frente de la llama, las reacciones químicas ocurren demasiado rápido como para ser afectadas por el campo turbulento, pero tienen poca influencia sobre la zona interna donde ocurre la reacción, se asume que distorsiona el frente de llama y aumenta su sección efectiva. Este régimen corresponde con el denominado de llamas plisadas o distorsionadas, aludiendo a un conjunto de llamas laminares moviéndose aleatoriamente.

Sin embargo pueden coexistir los dos efectos, apareciendo tres zonas de flujo, véase figura (2); una zona de productos sin quemar, otra de productos quemados, y una zona intermedia donde el frente de llama ha progresado dejándose algunas zonas sin quemar.

- ❖ » Existe un tercer caso, véase figura (1c), donde las reacciones químicas ocurren lentamente respecto a los fenómenos turbulentos provocando el mezclado de los reactantes con los productos de la reacción.

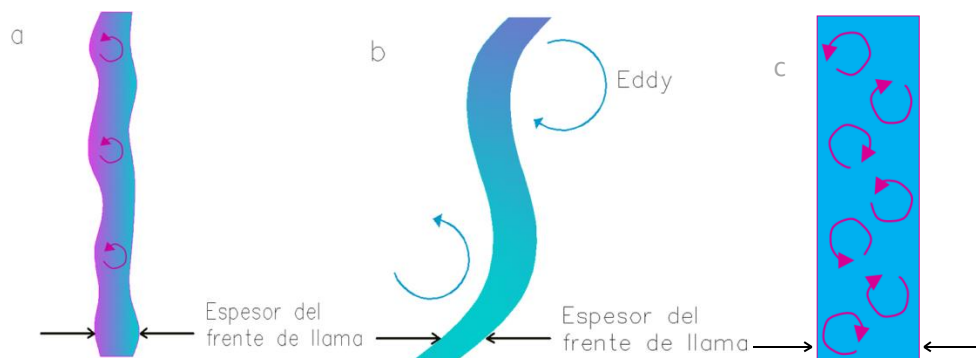


Figura 1.- Escalas turbulentas [José Ma. Desantes, 1998].

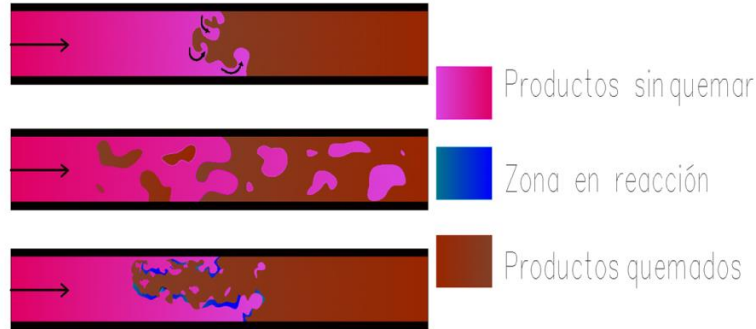


Figura 2.- Zonas de flujo [José Ma. Desantes, 1998].

En la figura (3) se muestra el diagrama de Borghi que permite clasificar los regímenes de combustión en función de los números adimensionales de Reynolds (Re), Karlovitz (Ka) y Damköler (Da), además relacionar intensidad de la turbulencia u' y la velocidad de llama laminar s_l en el eje de las ordenadas y en el eje de las abscisas encontramos la relación entre la escala integral L y el espesor del frente de llama laminar ϕ . En función de estos números se pueden establecer diferentes regímenes de combustión y por lo tanto los modelos que hay que utilizar para la simulación. Dependiendo de la concentración y la geometría la llama progresará a través de diferentes regímenes de combustión.

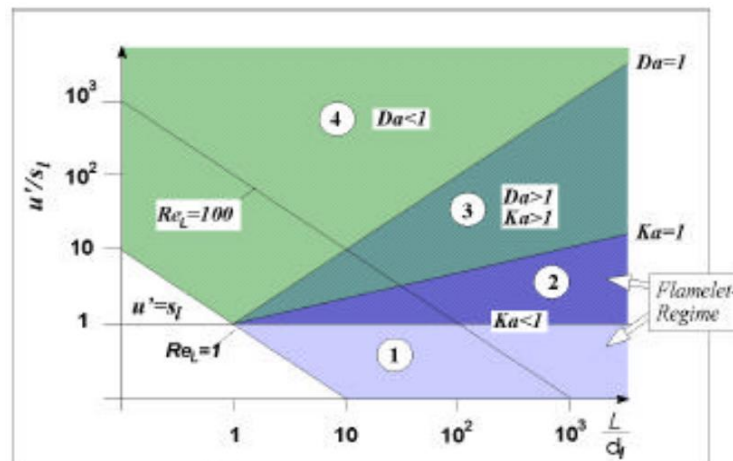


Figura 3.- Diagrama de Borghi.

- ◆ La zona 1 corresponde a niveles de turbulencia bajos, con frentes de llama estrechos en relación a la escala integral (frente de llama plisado, con aumento de la superficie efectiva).
- ◆ En la zona 2 se percibe la situación anterior con un nivel de turbulencia mayor. Al aumentar la intensidad de las fluctuaciones, las oscilaciones del frente de llama pueden generar mezcla sin quemar, véase fig. (2).

- ◆ Por el contrario en la zona 3, el frente de llama está formado por lengüetas de llama (flamelets) ensanchadas por efecto de las fluctuaciones turbulentas, las cuales entran dentro del frente de llama. Se incrementan la difusión de calor y la velocidad de llama. En esta zona existe la posibilidad de extinción de llama por enfriamiento de las lengüetas, si el alargamiento de estas predomina frente a su engrosamiento, lo que ocurre para números de Reynolds (Re) bajos y números de Lewis (Le) altos.
- ◆ En la zona 4 hay una llama distribuida, respecto a la zona 3, el mencionado ensanchamiento ha alcanzado un equilibrio al haberse hecho el tiempo característico de difusión menor que el de reacción.

El primero de los casos mencionados (de llama distribuida), sería adecuado para la región 3; a las regiones 1 y 2 les correspondería el segundo caso (de llama plisada), y la región 4 el tercer caso donde predominan los efectos en la cinética de reacción.

1.4.3 Llamas de difusión laminar

A diferencia de las llamas de premezcla, en las que el comburente y el oxidante se mezclan antes de llegar a la zona de llama, existen sistemas en los que los reactantes son inyectados por separado. Se desarrollan así las denominadas llamas de difusión, en las que el combustible puede ser un gas, una fase condensada y el oxidante puede ser un gas fluyente o una atmósfera en reposo. Estas llamas no presentan características propias como velocidad de propagación, espesor de llama, límites de ignición, etc.

La referencia a la difusión incide en que para este tipo de llamas los fenómenos de transporte molecular de masa y energía son los responsables de poner en contacto los reactivos y de mantener y controlar la llama, hasta el punto de que no es raro que una difusión-conducción deficiente impida el establecimiento de la llama o conduzca a su extinción. Como la difusión varía con la presión y la velocidad de combustión varía con el cuadrado de la presión, a presiones muy bajas, aunque el combustible y el oxígeno lleguen en corrientes separadas, la llama no se distingue de la de premezcla, véase figura (4). En régimen laminar la longitud de llama aumenta a medida que aumenta el caudal descargado o caudal térmico.

A diferencia del color violeta o azul-verdoso característico de las llamas de premezcla, las llamas de difusión van del amarillo brillante al rojo o anaranjado, ello es debido a la formación de partículas de hollín que fluyen a través de la zona de reacción, donde por lo general se queman debido a las temperaturas de la llama. La presencia de este confunde la apariencia de la altura, de hecho la altura luminosa de las llamas de los hidrocarburos es superior a la verdadera altura de la llama de difusión, su longitud es proporcional al caudal volumétrico.

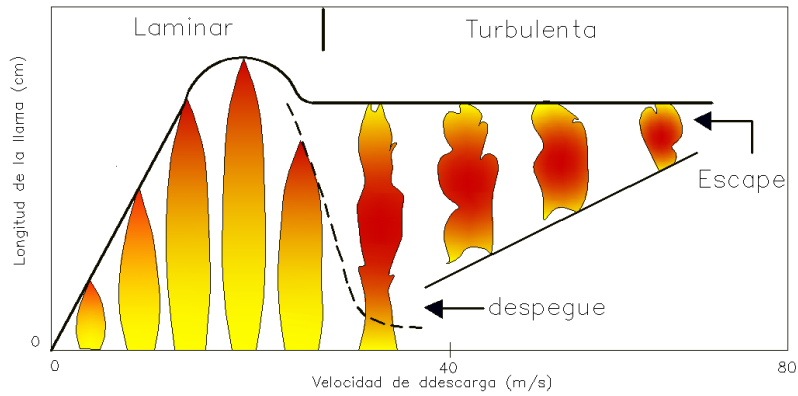


Figura 4.- Variación del carácter de una difusión gaseosa en función de la velocidad del chorro de combustible que muestra el despegue de llama experimental [I. Glassman, 1987].

El modelo cuantitativo de la llama de difusión de Burke y Schumanns [I. Glassman, 1987], describe el comportamiento de las llamas de difusión laminares, analizando la llama de difusión que se establece en una cámara de combustión que consiste en dos tubos coaxiales, véase figura (5).

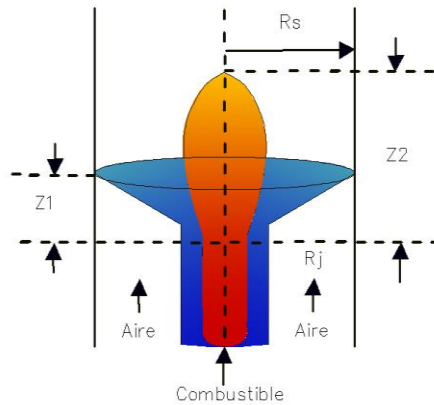


Figura 5.- Formas generales de la llama sub ventilada y sobre ventilada, las alturas reales varían con las condiciones de flujo [I. Glassman, 1987].

La forma de estas llamas es en forma de aguja a diferencia de las llamas premezcladas, que tienen una zona de reacción muy estrecha, las llamas de difusión tienen una región más amplia sobre la cual los cambios en la composición química y la reacción puede tener lugar.

El frente de llama se puede suponer que existe en el punto de máxima temperatura, y de hecho este punto corresponde a aquella en que se dan las concentraciones máximas de los principales productos (CO_2 y H_2O), este actúa como disipador, tanto para el combustible como para el oxidante, por lo tanto, la velocidad mayor que uno observaría se mueve desde el frente de la llama hacia el exterior.

1.4.4 Llamas de difusión turbulenta

En un régimen turbulento el transporte de calor y masa es mucho más efectivo, la llama es más corta, su forma es fluctuante y se genera ruido, pero lo principal es que la velocidad de quemado es mucho mayor porque el frente de llama tiene mucha mayor superficie.

En la mayoría de los casos la combustión es controlada por el mezclado por difusión de los reactantes, que puede ser descrito por medio del campo de fracción de mezcla. Esta forma conceptual de describir el proceso de combustión en términos del mezclado (medido por la fracción de mezcla) y el estado de reacción (completo, o en algunos casos, incompleto) es muy útil para comprender la combustión no premezclada turbulenta. El rango de velocidades en el que puede arder es mucho más extenso, son mucho más voluminosas para una misma potencia térmica y son más seguras, al no formarse mezcla reactiva hasta la salida del inyector.

La turbulencia también da lugar a deformaciones en la quema de superficie de la llama debido a que se produce el plegado y la superficie también se divide en piezas de diferentes tamaños tomando una forma irregular. Esto aumenta la superficie total de la llama y por lo tanto aumentan los gases combustibles quemados por unidad de tiempo. Debido a esto, las llamas turbulentas crecen a un ritmo mucho más rápido que el de las llamas laminares. Independiente de la fuerza total de la mezcla, ya que el combustible y el oxidante se difunden juntos en proporciones estequiométricas, la temperatura de la llama se acerca estrechamente a la temperatura adiabática estequiométrica. Para una situación adiabática existen dos temperaturas fundamentales para un combustible: una que corresponde a su valor estequiométrico y se produce en el frente de la llama y otra que se produce después de la mezcla de productos con el exceso de oxidante.

La longitud de una llama de difusión depende del régimen turbulento de la misma, para una combustión completa se considera un 30 % más elevada; esta longitud permanece aproximadamente constante, independientemente del caudal. Para aumentar la longitud de la llama se aumenta el diámetro del inyector, por lo tanto, su longitud depende del diámetro del inyector [Manuel Márquez Martínez, 1989].

Cuando existen llamas paralelas que provienen de inyectores próximos, la longitud de cada una de estas llamas se alarga con respecto a una llama aislada. Este efecto se representa en función del paso de los orificios (distancia entre ejes) relativo al diámetro del inyector, para disposición lineal o en cruz, véase figura (6).

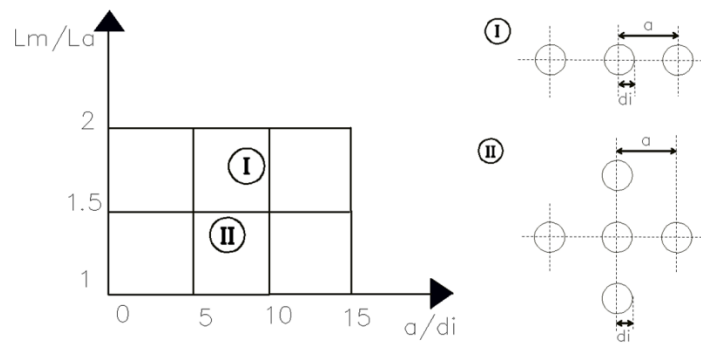


Figura 6.- Relación de la longitud de llamas múltiples (L_m) con respecto a la de llamas aisladas (L_a), en función de la disposición y separación de los orificios [Manuel Márquez Martínez, 1989].

Para variar las formas y la longitud de las llamas se adoptan chorros divergentes o chorros giratorios, estos últimos consiguen llamas cortas, llamas en bola o llamas dobles y llamas radiantes. En la figura (7) se representan formas típicas de llamas de difusión.

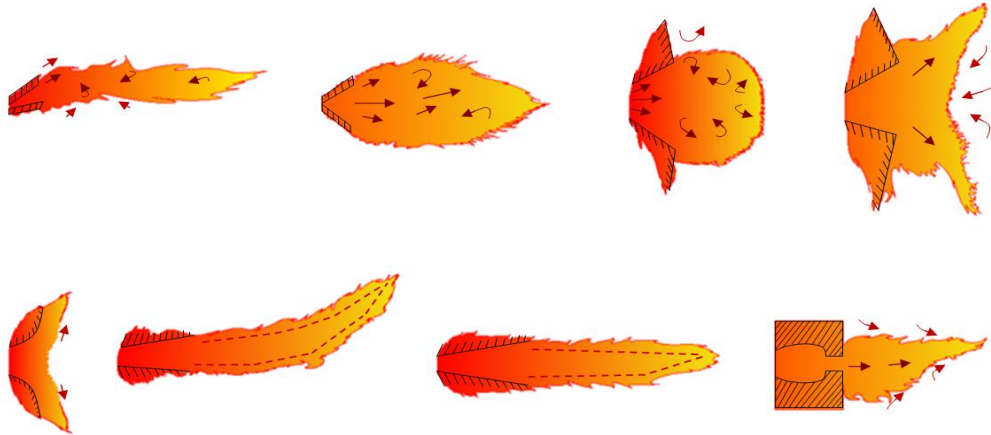


Figura 7.- Tipos de llama que pueden lograrse variando las características de mezclado recirculación y rotación [Manuel Márquez Martínez, 1989].

En el presente trabajo se usa la llama de difusión turbulenta, ya que al estudiar las características de cada una de las llamas en la clasificación dada, se comprueba que la llama difusiva turbulenta es la que reúne las características más apropiadas para los requerimientos del generador de vapor. Respecto a la llama de premezcla laminar es más segura al no producirse el efecto flashback, más estable que la llama de premezcla turbulenta debido a que las velocidades de la mezcla son muy altas afectando a la velocidad de combustión. La llama de difusión turbulenta tiene una zona de reacción más amplia sobre la cual los cambios en la composición química y la reacción son más efectivos, el rango de velocidades en que puede arder es mucho más extenso y son mucho más voluminosas para una misma potencia térmica respecto a las llamas de difusión laminar.

Capítulo 2

Ecuación de transporte

En este capítulo se presentan las ecuaciones constitutivas con las cuales modelamos el proceso de combustión de una llama difusiva turbulenta; la conservación de masa, la cantidad de movimiento, la conservación de energía, la conservación de las especies químicas y las utilizadas para cerrar el sistema de ecuaciones. Estas ecuaciones fundamentales rigen el fenómeno de forma general, tomando las restricciones correspondientes.

2.1 Ecuación de continuidad

La ecuación de continuidad representa la ley de conservación de la masa; la variación total de masa con respecto al tiempo de un sistema cerrado es igual a cero, por definición.

$$\frac{dm}{dt} = 0 \quad (2.1.1)$$

Nuestra propiedad extensiva, la masa, simbolizada por M está dada por:

$$M = \iiint_V \rho dV \quad (2.1.2)$$

Donde ρ y V son la densidad y el volumen respectivamente.

Utilizando el teorema de transporte de Reynolds para la ecuación (2.1.2) y sustituyendo en la ecuación (2.1.1), se llega a la ecuación de conservación de la masa para un volumen de control.

$$0 = \frac{\partial}{\partial t} \iiint_{vc} \rho dV + \iint_{s_{vc}} \rho \vec{v} \cdot \vec{n} dA \quad (2.1.3)$$

El primer término del lado derecho de la igualdad representa el cambio de masa dentro del volumen de control; el segundo término representa el flujo másico en la superficie del volumen de control.

Expresando a dA como $\vec{n} dS$, donde \vec{n} es la normal de la diferencial de superficie, figura (8).

$$0 = \frac{\partial}{\partial t} \iiint_{vc} \rho dV + \iint_{s_{vc}} \rho \vec{v} \cdot \vec{n} dS \quad (2.1.4)$$

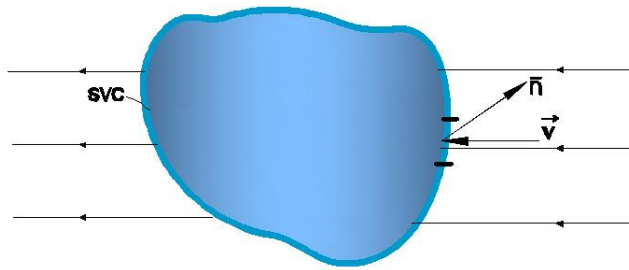


Figura 8.- Representación del vector \vec{n} (normal de la diferencial de superficie). Figura extraída de [Irving h. Shames, 1979].

Como tenemos una integral de volumen y otra de superficie se aplica el teorema de Gauss a la integral de superficie de la ecuación (2.1.4) para obtener dos integrales de volumen.

$$0 = \frac{\partial}{\partial t} \iiint_{vc} \rho dV + \iiint_{vc} (\nabla \cdot \rho \vec{v}) dV \quad (2.1.5)$$

Asumiendo que el volumen de control donde se realiza el análisis es infinitesimal, la integral es igual al argumento de la misma, resultando la ecuación diferencial de continuidad en su forma conservativa.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + (\nabla \cdot \rho \vec{v}) = 0 \quad (2.1.6)$$

2.2 Ecuación de la cantidad de movimiento

Partimos de la segunda ley de Newton que expresa que la fuerza resultante que actúa en un sistema es igual a la velocidad de cambio de la cantidad de movimiento del sistema.

$$\vec{F} = ma = m \frac{d\vec{v}}{dt} = \frac{d}{dt} (m\vec{v}) \quad (2.2.1)$$

Consideramos que la cantidad de movimiento es la propiedad extensiva:

$$\left. \frac{d}{dt} \right|_s (m\vec{v}) = \iiint_s \rho \vec{v} dV \quad (2.2.2)$$

La aplicación del teorema de transporte de Reynolds, a la ecuación (2.2.2), proporciona la ecuación de cantidad de movimiento para un volumen de control.

$$\sum \vec{F} = \frac{d}{dt} \left(\iiint_{vc} \vec{v} \rho dV \right) + \iint_{sc} \vec{v} (\rho \vec{v} \cdot \vec{n} dS) \quad (2.2.3)$$

El término $\sum \vec{F}$ es un vector resultante de la suma de todas las fuerzas que actúan sobre el volumen de control, incluye las fuerzas de superficie \vec{F}_s , más todas las fuerzas másicas \vec{F}_m .

$$\sum \vec{F} = \vec{F}_s + \vec{F}_m \quad (2.2.4)$$

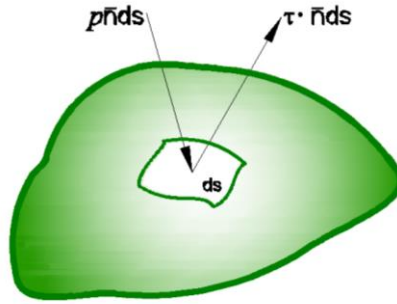


Figura 9.-Fuerzas de superficie. Figura extraída de [Irving h. Shames, 1979].

Las fuerzas superficiales o de contacto debidas a los esfuerzos normales y tangenciales se presentan en la figura (9).

$$\vec{F}_s = \iint_{svc} \vec{T} \cdot \vec{n} dS \quad (2.2.5)$$

Las fuerzas másicas o fuerzas de cuerpo actúan sobre todo el volumen, por ejemplo la gravedad y las fuerzas inerciales.

$$\vec{F}_m = \iiint_{vc} \rho B dV \quad (2.2.6)$$

Sustituimos las ecuaciones de las fuerzas superficiales (2.2.5) y másicas (2.2.6) en la ecuación (2.2.3).

$$\iiint_{vc} \rho B dV + \iint_{svc} \vec{T} \cdot \vec{n} dS = \frac{d}{dt} \left(\iiint_{vc} \vec{v} \rho dV \right) + \iint_{sc} \vec{v} (\rho \vec{v} \cdot \vec{n} dS) \quad (2.2.7)$$

Aplicando el teorema de Gauss y agrupamos en una sola integral de volumen:

$$\iiint_{vc} \left[\nabla \cdot \vec{T} + \rho B - \nabla \cdot \vec{v} (\rho \vec{v}) - \frac{\partial}{\partial t} (\rho \vec{v}) \right] dV = 0 \quad (2.2.8)$$

Se trabajo con volúmenes de control infinitesimal, por lo tanto, la integral es igual al argumento de la misma.

$$\nabla \cdot \vec{T} + \rho B - \nabla \cdot \vec{v} (\rho \vec{v}) - \frac{\partial}{\partial t} (\rho \vec{v}) = 0 \quad (2.2.9)$$

El tensor de esfuerzos \vec{T} , se expresa en términos de la presión hidrostática y el esfuerzo viscoso.

$$\vec{T} = -P \vec{\delta} + \vec{\tau} \quad (2.2.10)$$

Así $\vec{\delta}$ es un tensor identidad, delta de Kronecker y $\vec{\tau}$ el tensor de esfuerzos viscosos que podemos expresar como:

$$\vec{\tau} = \mu \left(\nabla \vec{v} + (\nabla \vec{v})^T \right) + \left(\mu_v + \frac{2}{3} \mu \right) (\nabla \cdot \vec{v}) \vec{\delta} \quad (2.2.11)$$

Donde μ es la viscosidad molecular del fluido y μ_v es la viscosidad volumétrica. Por lo regular se desprecia la viscosidad volumétrica y sustituimos las ecuaciones (2.2.10) en (2.2.11) y está en (2.2.9) obteniendo:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \vec{v}) + \nabla \cdot \vec{v}(\rho \vec{v}) = -\nabla P + \nabla \cdot \left[\mu \left(\nabla \vec{v} + (\nabla \vec{v})^T - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \vec{v}) \vec{\delta} \right) \right] \quad (2.2.12)$$

Ecuación general de cantidad de movimiento.

2.3 Ecuación de la conservación de la energía

La ecuación de conservación de la energía representa la primera ley de la termodinámica que establece que la energía total de la partícula fluida es constante, siempre que no existan aportes energéticos por transferencia de calor o de trabajo.

$$\Delta E = \dot{Q} - \dot{W}_k \quad (2.3.1)$$

El calor total agregado al sistema y el trabajo total hecho por el sistema sobre los alrededores durante un intervalo de tiempo se designan como \dot{Q} y \dot{W}_k respectivamente.

Al aplicar la ecuación de transporte de Reynolds, se obtiene:

$$\frac{d\dot{Q}}{dt} - \frac{d\dot{W}_k}{dt} = \iiint_{vc} e \rho dV + \iint_{svc} e(\rho \vec{v}) \cdot dA \quad (2.3.2)$$

El término e se expresa como la suma de los siguientes tipos específicos de energía almacenada por unidad de masa: energía interna, energía cinética y energía potencial, respectivamente.

$$e = u + \frac{v^2}{2} + \rho g \quad (2.3.3)$$

Se clasifica a \dot{W}_k en tres categorías:

1.- Trabajo de flujo, es la fuerza de tracción de los alrededores que actúan sobre la superficie de control.

$$\dot{W}_f = - \iint_{svc} P \vec{v} \cdot dA \quad (2.3.4)$$

Debido a que el producto de volumen específico \tilde{V} , y densidad ρ , es la unidad, se introduce $P \tilde{V}$, para conformar la siguiente expresión:

$$\dot{W}_f = - \iint_{svc} P \rho \tilde{V} \cdot dA \quad (2.3.5)$$

2.-Trabajo viscoso, solo se da en la superficie, ya que el de los esfuerzos en el interior se cancelan; y consiste en el producto de cada esfuerzo viscoso por la componente respectiva a la velocidad, véase figura (10).

$$\dot{W}_v = -\nabla \cdot \vec{v} \cdot \vec{\tau}_{ij} dV \quad (2.3.6)$$

Donde $\vec{\tau}_{ij}$ es el tensor de esfuerzos viscosos sobre el elemento.

De la ley de Newton de la viscosidad y las ecuaciones de de Navier-Stokes desarrollamos la ecuación y tenemos como resultado:

$$\dot{W}_v = -\left[\vec{v} \cdot \nabla P + \mu \nabla^2 \vec{v} + \frac{1}{3} \nabla(\nabla \cdot \vec{v})\right] dV \quad (2.3.7)$$

Definiendo el término de disipación viscosa Φ , lo sustituimos en la ecuación (2.3.7)

$$\Phi = \mu \nabla^2 \vec{v} + \frac{1}{3} \nabla(\nabla \cdot \vec{v}) \quad (2.3.8)$$

Entonces la ecuación (2.3.7) resulta:

$$\dot{W}_v = -[\vec{v} \cdot \nabla P + \Phi] dV \quad (2.3.9)$$

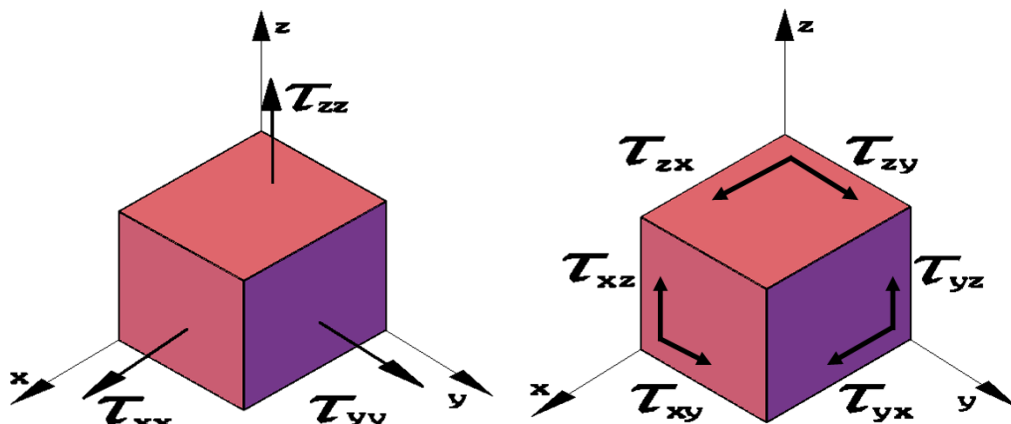


Figura 10.-Esfuerzos normales y tangenciales actuando sobre un elemento fluido.

3.- Trabajo de flecha (\dot{W}_s), no es considerado ya que el volumen en análisis se encuentra lejos de la flecha, pero sus efectos son tomados en cuenta en el trabajo de flujo y el trabajo viscoso.

El trabajo de las fuerzas gravitatorias ya ha sido incluido como energía potencial en la ecuación (2.3.3). Otros tipos de trabajo, como los debidos a fuerzas electromagnéticas son excluidos en este análisis.

Para \dot{Q} , partimos de la ley de Fourier, hacemos un balance de calor en las direcciones x, y, z.

$$\dot{Q} = \nabla \cdot (-\kappa \nabla T) dV \quad (2.3.10)$$

El término de trabajo de flujo de la ecuación (2.3.5) puede incorporarse a los términos de flujo de energía, ya que ambos incluyen integrales de superficie con el factor $\vec{v} \cdot \vec{n} dA$. La ecuación (2.3.2) resulta:

$$\frac{d\dot{Q}}{dt} - \frac{d\dot{W}_k}{dt} = \iiint_{vc} e \rho dV + \iint_{svc} e + P\vec{v}(\rho \vec{v}) \cdot \vec{n} dA \quad (2.3.11)$$

Expresando a dA como $\vec{n} dS$, donde \vec{n} es el vector normal de la diferencial de superficie, aplicando el teorema de Gauss se obtienen las dos integrales de volumen y se reemplaza $\vec{v} = \frac{1}{\rho}$. Debido a que se está trabajando con volúmenes de control infinitesimal, la integral es igual al argumento de la misma, resultando:

$$\frac{d\dot{Q}}{dt} - \frac{d\dot{W}_k}{dt} = \rho \frac{De}{Dt} + P\nabla \cdot \vec{v} + \vec{v} \cdot \nabla P dV \quad (2.3.12)$$

Ahora introducimos las ecuaciones (2.3.9) y (2.3.10) en la ecuación (2.3.12). Se agrupan todos los términos que se encuentran multiplicados por la viscosidad dinámica y serán denotados con Φ , término de disipación viscosa.

$$\rho \frac{De}{Dt} = \nabla \cdot (\kappa \nabla T) - P\nabla \cdot \vec{v} + \Phi \quad (2.3.13)$$

Donde es sustituida la propiedad termodinámica conocida como entalpia de la ecuación (2.3.14.) en la ecuación (2.3.13.)

$$h = e + \frac{P}{\rho} \quad (2.3.14)$$

Se obtiene la ecuación de la conservación de la energía en función de la temperatura:

$$\rho C_p \frac{DT}{Dt} = \nabla \cdot (\kappa \nabla T) + \frac{DP}{Dt} + \Phi \quad (2.3.15)$$

2.4 Conservación de las especies químicas

De las relaciones de un sistema multicomponentes:

$$\rho_{\bar{i}} = \rho Y_i \quad (2.4.1)$$

$$\vec{v}_{\bar{i}} = \vec{v} + \mathcal{V}_i \quad (2.4.2)$$

Siendo $\rho_{\bar{i}}$ la densidad de cada especie, y $\vec{v}_{\bar{i}}$ es la velocidad de la especie química, \vec{v} velocidad promedio de la masa y \mathcal{V}_i es la velocidad de difusión másica de la especie i .

En una mezcla constituida por N especies químicas, la fracción másica de una especie i esta dada por:

$$Y_i = \frac{m_i}{\sum_{i=1}^N m_i} = \frac{m_i}{m} \quad (2.4.3)$$

Donde m_i es la masa de la especie y m es la masa total de la mezcla. La suma de las fracciones másicas de las especies químicas que contiene una mezcla es igual a uno.

$$\sum_{i=1}^N Y_i = 1 \quad (2.4.4)$$

La ecuación de la conservación de especies químicas se obtiene al sustituir los términos correspondientes a la velocidad de variación y la entrada y salida del flujo másico de las especies químicas, en la ecuación de conservación de la masa ecuación (2.1.6).

Finalmente al realizar estas sustituciones se iguala a r_A tasa de reacción (EBU).

$$\frac{\partial \rho Y_i}{\partial t} + \nabla \cdot [\rho Y_i (\vec{v} + \mathcal{V}_i)] = r_A \quad (2.4.5)$$

Sustituimos el término de flujo difusivo $\nabla \cdot [\rho Y_i (\vec{v} + \mathcal{V}_i)]$ por $\nabla \cdot \vec{J}_i$ obteniendo

$$\frac{\partial \rho Y_i}{\partial t} = -\nabla \cdot \vec{J}_i + r_A \quad (2.4.6)$$

La suma de estas dos ecuaciones conduce a la ecuación de conservación de la masa; para poderla satisfacer se debe cumplir que:

$$r_A + r_B = 0; \quad \sum_{i=1}^N \vec{J}_i = 0 \quad (2.4.7)$$

2.5 Ecuaciones de estado y flujo difusivo

El sistema de ecuaciones generado con variables respectivas contiene incógnitas independientes, por este motivo debemos añadir ecuaciones, que serán las relaciones termodinámicas entre las variables de estado, que relacionen la densidad, presión y temperatura por expresiones para flujo difusivo.

La densidad de una mezcla en términos de la densidad de las especies que la constituyen se expresa de la siguiente forma:

$$\rho = \frac{1}{\sum_{i=1}^N \frac{Y_i}{\rho_i}} \quad (2.5.1)$$

Para un sistema multicomponentes, donde cada especie se modela como un gas ideal, la ecuación del gas ideal se escribe como:

$$P = \rho \mathcal{R}_u T \sum_{i=1}^N \frac{Y_i}{M_i} \quad (2.5.2)$$

La entalpía de la mezcla se define:

$$h = \sum_{i=1}^N Y_i h_i \quad (2.5.3)$$

Donde h_i es la entalpía de cada uno de los componentes el cual es igual a la suma de las entalpías térmicas y la energía liberada o absorbida, entalpía química, en el proceso. Esta entalpía de los componentes la podemos calcular con la siguiente expresión:

$$h_i = \Delta h_{f,i}^{\circ} + \int_{T^{\circ}}^T C_{p,p,i} dT \quad (2.5.4)$$

Siendo $C_{p,p,i}$ es el calor específico a presión constante de cada uno de las especies y $\Delta h_{f,i}^{\circ}$ la energía de formación. Para poder relacionar la entalpía y el calor específico con la temperatura es necesario usar expresión;

$$Cp = \left(\frac{\partial h}{\partial T} \right)_p \quad (2.5.5)$$

El flujo difusivo \vec{J}_A , es consecuencia de los gradientes de temperatura y presión. El coeficiente de difusividad binario se expresa como D_{AB} o D_{BA} dependiendo de la dirección de flujo. Este flujo difusivo es modelado según la ley de Fick.

$$\vec{J}_A = \rho \frac{W_A}{W_M} \sum_{BA}^N D_{AB} W_B X_B \quad (2.5.6)$$

Los subíndices A y B indican las especies químicas, X_B la fracción molar y W_M es igual a $\sum_{BA}^N X_A W_A$, este componente de flujo difusivo suele aproximarse con la expresión:

$$\vec{J}_A = - D_A^M \rho \frac{Y_A}{X_A} \nabla X_A \quad (2.5.7)$$

Donde D_A^M es el coeficiente medio de difusión de la especie A en la mezcla, este coeficiente se puede calcular mediante el coeficiente de difusión binario D_{AB} .

$$D_A^M = \rho \frac{1-Y_A}{\sum_{B \neq A}^N x_B D_{AB}} \quad (2.5.8)$$

Los números adimensionales usados en la solución del flujo difusivo son el número de Lewis, Prandtl y el número de Schmidt.

$$Le = \frac{\lambda}{\rho C_p} \quad (2.5.9)$$

$$Pr = \frac{c_p \mu}{\lambda} \quad (2.5.10)$$

$$Sc = \frac{v}{D} \quad (2.5.11)$$

Donde λ es la conductividad térmica, ρ la densidad, μ viscosidad dinámica y v la viscosidad cinemática. Para fluidos multicomponentes se expresa en número de Lewis en función de los números de Prandtl y Schmidt.

$$Le \equiv \frac{Sc}{Pr} \quad (2.5.12)$$

2.6 Promediado de las ecuaciones

Debido a la rápida variación en tiempo y espacio de las propiedades fluido dinámicas en régimen de flujo turbulento se hace necesario un análisis estadístico de las mismas, como se verá con más detalle en el apéndice A.

Entre las alternativas para la simulación del flujo turbulento reactivo, está el promedio de las ecuaciones instantáneas de conservación. En este método se promedian las fluctuaciones instantáneas de conservación en las escalas temporales y se resuelven ecuaciones de transporte para los valores medios de las propiedades del fluido. Dichas ecuaciones no son cerradas, por lo que se requieren modelos que cierren estos términos.

A las variables transportadas en el flujo, como la fracción másica de una especie o la entalpia, se representan con el símbolo Φ . Esta aproximación al flujo turbulento descompone las variables en una media más una fluctuación turbulenta, véase figura (11).

$$\Phi = \bar{\Phi} + \Phi' \quad (2.6.1)$$

$$\Phi = \tilde{\Phi} + \Phi'' \quad (2.6.2)$$

Donde los promedios de $\bar{\Phi}$ y $\tilde{\Phi}$ están definidos como:

Promedio de Reynolds

$$\bar{\Phi} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \Phi^{(i)} \quad (2.6.3)$$

Promedio de Favre

$$\tilde{\Phi} = \frac{1}{\bar{\rho}} \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_t^{t+T} \rho^{(i)} \Phi^{(i)} dt \quad (2.6.4)$$

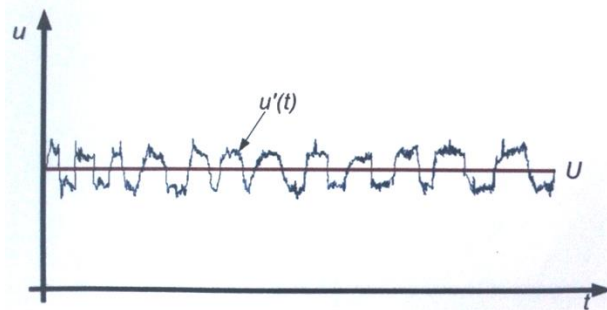


Figura 11.- Las variables del sistema se descomponen en un valor medio y otro fluctuante debido a la turbulencia. Figura extraída de [José Ma. Desantes, 1998].

Siendo N el número de experimentos (realizados en las mismas condiciones), $\Phi^{(i)}$ la muestra i del conjunto de relaciones N de un experimento y $\bar{\rho}$ representa la densidad promedio de Reynolds. Estos tipos de promedio cumplen las siguientes propiedades:

$$\begin{aligned}\overline{\Phi'} &= 0 & ; & & \overline{\Phi'_i \Phi'_j} &\neq 0 \\ \overline{\Phi''} &= 0 & ; & & \overline{\Phi''} &\neq 0 \\ \bar{\rho} \overline{\Phi''} &= 0\end{aligned}$$

Usando las definiciones de los promedios de Reynolds y de Favre obtenemos:

$$\widetilde{\rho\Phi} = \bar{\rho}\overline{\Phi} \quad (2.6.5)$$

Al aplicar el promediado de Favre, a las ecuaciones de transporte instantáneas, se obtienen las formas más sencillas de las ecuaciones resultantes en las que no se incluyen correlaciones de las fluctuaciones de las densidades.

Aplicando el promedio de Favre a las ecuaciones instantáneas de conservación de masa, cantidad de movimiento, conservación de energía y especies química se obtiene:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + (\nabla \cdot \rho \vec{v}) = 0 \quad (2.6.6)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \vec{v}) + \nabla \cdot \vec{v}(\rho \vec{v}) = \underbrace{-\nabla P + \nabla \cdot \left[\mu \left(\nabla \vec{v} + (\nabla \vec{v})^T - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \vec{v}) \delta \right) \right]}_I \underbrace{\nabla \cdot (\rho \vec{v}'' \vec{v}'')}_{II} - \nabla \cdot P + \bar{\rho} \vec{g} \quad (2.6.7)$$

$$\frac{\partial \rho \tilde{Y}_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \tilde{Y}_i) = \underbrace{\nabla \cdot \bar{\Gamma}_i \nabla \tilde{Y}_i}_I - \underbrace{\nabla \cdot (\rho \vec{v}'' Y_i'')}_{II} + \bar{r}_A \quad (2.6.8)$$

$$\frac{\partial \rho \tilde{h}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \tilde{h}) = \underbrace{-\nabla \cdot \tilde{J}_h}_I - \underbrace{\nabla \cdot (\rho \vec{v}'' h'')}_{II} \quad (2.6.9)$$

Usando el promedio de Favre en la parte homogénea de las ecuaciones se obtiene:

$$\frac{\partial \rho \tilde{\phi}_z}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \tilde{\phi}_z) = \underbrace{\nabla \cdot (\bar{\Gamma} \nabla \tilde{\phi}_z)}_I - \underbrace{\nabla \cdot (\rho \vec{v}'' \phi_z'')}_{II} \quad (2.6.10)$$

Las ecuaciones anteriormente mostradas tienen la forma de las correspondientes ecuaciones instantáneas, con la diferencia de tener un término adicional $\overline{\vec{v}'' \phi''}$, que nos representa físicamente el transporte convectivo de ϕ debido a los movimientos turbulentos. En el caso de

que el flujo sea turbulento, el término I de las ecuaciones anteriores por lo regular es muy pequeño en comparación con II , por lo que se considera despreciable, haciendo que las ecuaciones (2.6.7), (2.6.8), (2.6.9) y (2.6.10) se escriban como:

$$\frac{\partial(\rho\vec{\tilde{v}})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\vec{\tilde{v}}\vec{\tilde{v}}) = \nabla \cdot (\overline{\rho\vec{v}''\vec{v}''}) - \nabla \cdot P + \overline{\rho\vec{g}} \quad (2.6.11)$$

$$\frac{\partial(\rho\tilde{Y}_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\vec{\tilde{v}}\tilde{Y}_i) = -\nabla \cdot (\overline{\rho\vec{v}''\tilde{Y}_i''}) + \overline{r_A} \quad (2.6.12)$$

$$\frac{\partial\rho\tilde{h}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\vec{\tilde{v}}\tilde{h}) = -\nabla \cdot (\overline{\rho\vec{v}''h''}) \quad (2.6.13)$$

$$\frac{\partial\rho\tilde{\phi}_z}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\vec{\tilde{v}}\phi_z) = -\nabla \cdot (\overline{\rho\vec{v}''\phi_z''}) \quad (2.6.14)$$

Si la velocidad del flujo es baja, generalmente se supone que las fluctuaciones presentes en el régimen de flujo son despreciables.

Por lo tanto los valores medios de la densidad y la tasa de reacción química pueden ser expresados en función de la presión de referencia P_0 .

$$\bar{\rho} = P_0 \left(R_u T \sum_{i=1}^n \frac{Y_i}{W_i} \right)^{-1} \quad (2.6.15)$$

$$\frac{\partial\rho\tilde{h}}{\partial t} + \nabla \cdot \overline{r_A}(P, \rho, \phi_i) = r_A(P, \bar{\rho}, \tilde{\phi}_i) \quad (2.6.16)$$

Donde $\tilde{\phi}_i$ en esta expresión, nos representa la fracción másica de la especie química y la entalpia.

Debido a que el flujo es turbulento, el término $\overline{\rho\vec{v}''\phi''}$, de las ecuaciones (2.6.7), (2.6.8) y (2.6.9) son desconocidos por lo que es necesaria su modelización. El cierre del término $\overline{\rho\vec{v}''\vec{v}''}$ de la ecuación promedio de la cantidad de movimiento (2.6.7) se trata en el apéndice B del presente trabajo. Para realizar el cierre de las ecuaciones (2.6.7), (2.6.8), (2.6.9) y (2.6.10) es necesario conocer el valor medio de la tasa de formación de la especie química $\overline{r_A}$, y la densidad media $\bar{\rho}$.

Estas cantidades se encuentran en función de otras propiedades del fluido y régimen de flujo.

$$\overline{r_A} = r_A(\tilde{T}, \bar{\rho}, \tilde{\phi}_1, \dots, \tilde{\phi}_N) \quad (2.6.17)$$

$$\bar{\rho} = \rho(\tilde{T}, \bar{\rho}, \tilde{\phi}_1, \dots, \tilde{\phi}_N) \quad (2.6.18)$$

En primera instancia se puede modelar la tasa de formación de las especies químicas mediante series de Taylor en torno a los valores medios; sin embargo, este método tiene el inconveniente de que se deben modelar un gran número de correlaciones de alto orden de la temperatura, además de que la convergencia de la serie de Taylor no es adecuada.

Otra aproximación es la evaluación de la tasa de formación con valores medios, pero esta aproximación solo puede ser válida para reacciones que son muy lentas comparadas con los cambios en el campo de flujo turbulento local.

Capítulo 3

Método de solución

En el capítulo anterior se mostraron las ecuaciones que rigen el fenómeno en estudio, este sistema de ecuaciones resultante no tiene solución analítica, por lo que es necesario recurrir a un método numérico y al uso de recursos computacionales para poder dar una solución a este sistema. El método numérico utilizado se describe a lo largo del presente capítulo.

3.1 Método de volúmenes finitos

Hemos definido las ecuaciones de continuidad, cantidad de movimiento, conservación de energía y conservación de especies químicas; las cuales se pueden representar por medio de la ecuación general de transporte, la cual mostramos a continuación denotando la variable independiente con $\tilde{\phi}$:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\tilde{\phi}) + \nabla \cdot (\rho\vec{V}\tilde{\phi}) - \nabla \cdot (\Gamma_{\phi}\nabla\tilde{\phi}) = \bar{S}_{\phi} \quad (3.1.1)$$

Donde Γ_{ϕ} es el coeficiente de difusión y \bar{S}_{ϕ} es el término fuente. Los términos de la ecuación (3.1.1) del lado izquierdo son el término temporal, convectivo y el de difusión respectivamente.

Los términos Γ_{ϕ} y \bar{S}_{ϕ} están especificados para cada variable $\tilde{\phi}$.

Dicha ecuación se puede discretizar por medio del método de volúmenes finitos, método que consiste en dividir el dominio de trabajo en pequeños volúmenes de control; véase figura (12), asociando un punto nodal a cada uno de los volúmenes. De una manera similar se discretiza el tiempo en intervalos temporales.

La ecuación diferencial se integra en cada uno de los volúmenes de control especificando perfiles de variación de la variable independiente entre los puntos de la malla e intervalos temporales, lo cual nos da como resultado una ecuación discretizada que relaciona los valores de la variable independiente $\tilde{\phi}$ para un determinado punto de grupos nodales. Esta ecuación representa el principio de conservación de $\tilde{\phi}$ en un volumen finito de la misma manera que la ecuación diferencial, ecuación general de transporte, lo hace para un volumen infinitesimal.

La ecuación algebraica para un nodo P se puede expresar de manera general como:

$$a_p\tilde{\phi}_p = \sum_{i,I=E,W,N,S,H,L} a_i\tilde{\phi}_I + a_{\tau}\tilde{\phi}_{\tau} + \beta \quad (3.1.2)$$

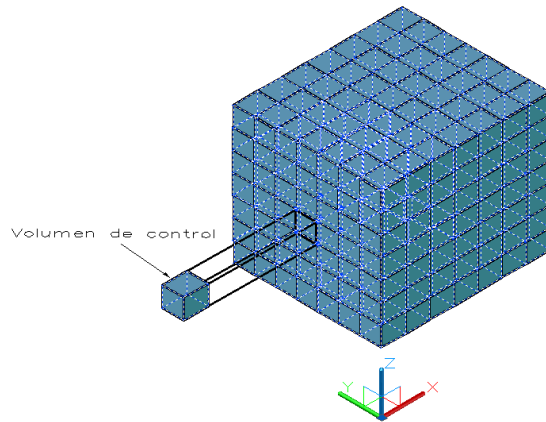


Figura 12.- Discretización del dominio en pequeños volúmenes de control.

Donde el subíndice I nos representa a las celdas vecinas, i las caras entre la celda P y sus vecinas, τ es el valor del intervalo temporal anterior y el termino fuente se representa con β . La deducción detallada de esta ecuación se puede consultar en diversos libros de mecánica de fluidos computacional.

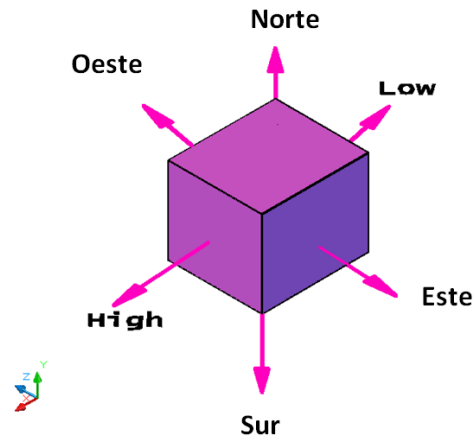


Figura 13.- Notación de una celda y las celdas vecinas.

En la figura (13) se muestra la notación de una celda cualquiera y sus vecinas. Dada una celda P , sus vecinas se denotan con las iniciales de los puntos cardinales en las direcciones x y y , con high y low en la dirección z .

En el caso de la malla cartesiana, escalonada ("staggered") y uniforme (celdas de dimensiones espaciales iguales), se puede emplear por sencillez un volumen de control bidimensional, como el que se muestra en la figura (14) (El espesor de la celda en la dirección z se puede considerar la unidad.)

En una malla escalonada, los cambios en las propiedades se encuentran definidos en el centro de la celda, mientras las componentes de velocidad, en cada una de las direcciones, se encuentran desplazadas en las caras de la celda. A su vez, el tiempo también se discretiza. Las celdas en la dirección temporal se denominan intervalos temporales. La celda P en el paso temporal se denota como τ .

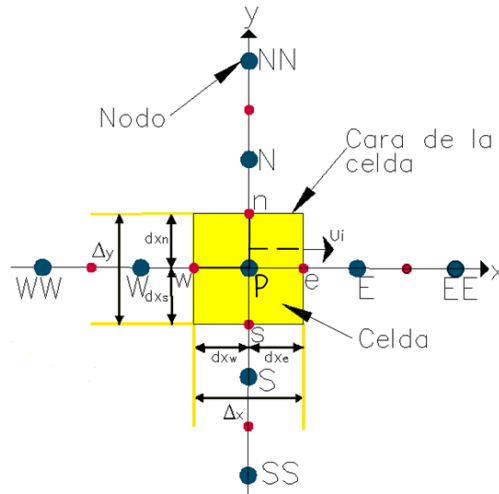


Figura 14.- Celda bidimensional.

A continuación, se presentan los términos de la ecuación (3.1.2). Definiendo tres expresiones F , D y Pe como:

$$F = \rho \tilde{v}_i; \quad D = \frac{\Gamma}{\delta_i}; \quad Pe = \frac{F}{D} \quad (3.1.3)$$

Donde \tilde{v}_i es la velocidad promedio en la cara i , δ_i es la distancia entre los nodos que incluyen la cara i y Pe es el número de Peclet, el cual es una relación entre la difusión y la convección. Las expresiones para F y D representan los efectos de los términos convectivo y difusivo, respectivamente, de la ecuación general de transporte (3.1.1).

Los coeficientes a_i de la ecuación (3.1.2) son:

$$a_i = D_i f(|Pe|)_i + \max(-F_i, 0) \quad (3.1.4)$$

Los valores F y D en la cara de la celda de la ecuación (3.1.4) son:

$$F_i = (\rho \tilde{v}_i) \Delta_i; \quad D_i = \frac{\Gamma_i \Delta_i}{\delta_i}; \quad i = n, s, e, w \quad (3.1.5)$$

Donde Δ_i es la longitud de cara i .

Para poder determinar el valor de F_i es necesario conocer $\rho \tilde{v}_i$ en la cara de la celda.

El cálculo del término convectivo de la ecuación de transporte (3.1.1) requiere también del conocimiento de la variable escalar $\tilde{\phi}$, en la cara de la celda.

La velocidad \tilde{v}_i está calculada en la cara de la malla escalonada, pero ρ y $\tilde{\phi}$ están calculadas en el nodo y es necesario que se interpolen a la cara para calcular los coeficientes de a_i de la ecuación discretizada (3.1.2).

La obtención de estas variables en la cara de las celdas es de suma importancia para la precisión y la convergencia de la solución. El cálculo de ρ y $\tilde{\phi}$ da paso a los llamados esquemas de discretización.

La función $f(|Pe|)$ de la ecuación (3.1.4) es dependiente del esquema de interpolación; por ejemplo, en el esquema de diferencias desplazadas, $f(|Pe|) = 1$. Para el sistema híbrido (véase apéndice B):

$$f(|Pe|) = \max(0.1 - 0.5 |Pe|) \quad (3.1.6)$$

En el apéndice B se muestran estos sistemas de discretización lineales, estos son usados en la presente tesis para la discretización del término convectivo de las ecuaciones de energía, cantidad de movimiento, conservación de especies químicas y modelo de turbulencia.

El coeficiente para el término transitorio es:

$$a_T = \frac{\rho \Delta_x \Delta_y}{\Delta t} \quad (3.1.7)$$

Para el cálculo del término D_i , ecuación (3.1.5), se necesita obtener el coeficiente de difusión Γ en la cara de la celda. Este coeficiente no es necesariamente una constante, probablemente puede ser función de valores variables que se conocen en los nodos (por ejemplo la temperatura) y por lo tanto es necesario interpolarlo en la cara.

Esta interpolación puede ser aritmética o armónica. Por ejemplo para la cara w estas interpolaciones son:

$$\Gamma_w = \frac{\Delta_x (\Gamma_P + \Gamma_w)}{2 \delta_{xw} \Delta t} ; \Gamma_w = \frac{2 \delta_{xw} \Delta t}{\Delta_x \left(\frac{1}{\Gamma_P} + \frac{1}{\Gamma_E} \right)} \quad (3.1.8)$$

El término fuente de la ecuación general (3.1.1), \bar{S}_ϕ , se linealiza como:

$$\bar{S}_\phi = \bar{S}_{\phi,c} + \bar{S}_{\phi,u} \tilde{\phi}_P \quad (3.1.9)$$

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

Con lo anteriormente expuesto los términos B y a_p de la ecuación (3.1.2) son:

$$B = \bar{S}_{\phi,c} + \Delta_x \Delta_y + a_T \tilde{\phi}_T \quad (3.1.10)$$

$$a_p = a_n + a_s + a_e + a_w + a_T - \bar{S}_{\phi,u} + \Delta_x \Delta_y \quad (3.1.11)$$

La ecuación es aplicada en cada una de las celdas que conforman el dominio, para cada $\tilde{\phi}$ y para cada paso temporal Δ_t , por lo que se tiene como resultado un sistema de ecuaciones lineales (Los coeficientes a pueden depender, directa o indirectamente, de $\tilde{\phi}$ por lo que el sistema realmente es pseudo-lineal). Para resolver este sistema se puede utilizar cualquier método de resolución de ecuaciones lineales.

El cálculo de velocidades a partir de la ecuación de cantidad de movimiento tiene el inconveniente de que la presión, cuyo gradiente aparece como término fuente en dicha ecuación, no tiene una

ecuación propia para poder calcular; una solución ampliamente usada, es transformar la ecuación de continuidad en una ecuación para el cálculo de presión.

Entre los algoritmos iterativos que se basan en este procedimiento, están los de la familia simple (Semi-Implicit-Method for Pressure-Linked Equations) [S.v. Pantankar, 1980].

El algoritmo utilizado para resolver el problema de acoplamiento de la velocidad-presión, en la presente tesis, pertenece a esta familia.

El proceso de solución del sistema de ecuaciones es iterativo y durante este, 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 tendiendo a cero.

Para procurar esta convergencia, se utiliza un método de relajación para alguna de las propiedades o variables dependientes.

Los dos tipos de relajación empleados son la inercial y la lineal.

La primera es usada 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:

$$\bar{S}_{\phi,r} = \frac{\rho V_p}{\Delta t_f} (\tilde{\phi}^{(n-1)} - \tilde{\phi}^{(n)}) \quad (3.1.12)$$

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 que está dada por:

$$\tilde{\phi}_P^{(n)} = \alpha \tilde{\phi}_P^{(sol)} + (1 + \alpha) \tilde{\phi}_P^{(n-1)} \quad (3.1.13)$$

α Es el factor de relajación, el superíndice sol se refiere al valor de las propiedades proporcionado por el "solver" en la iteración actual. El factor de relajación α toma valores entre 0 y 1.

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

En este trabajo se usa el código de fluido-dinámico computacional PHOENICS para resolver las ecuaciones que describen la dinámica del flujo: continuidad, cantidad de movimiento, conservación de energía, conservación de especies químicas junto con los efectos de la turbulencia que tiene sobre estos.

Capítulo 4

Configuración y consideraciones realizadas para la simulación

En los capítulos anteriores se han estudiado los conceptos y ecuaciones que modelan el proceso de la combustión de una llama difusiva. La configuración geométrica del generador, las condiciones de operación y los parámetros utilizados para realizar las simulaciones se presentarán a lo largo de este capítulo.

4.1 Configuración geométrica

Con el propósito de iniciar el diseño de un generador de vapor que formará parte de un sistema de “Generación de Vapor In Situ”, se han realizado las simulaciones del proceso de combustión de una mezcla generada por un chorro central de oxígeno y cuatro chorros periféricos de metano. Tanto la llama como la configuración geométrica del generador fueron elegidas por un equipo de investigación del Instituto Politécnico Nacional (IPN), el cual tiene bajo su cargo la construcción del modelo físico de dicho generador.

La llama está confinada con una geometría del sistema que tiene una longitud de 1.5 [m], un radio de 0.0508 [m]. El arreglo consiste en una boquilla central con un diámetro de 16.6 [mm], por donde se ingresa el oxígeno y cuatro boquillas periféricas de 5.9 [mm], por las cuales se inyecta el metano, véase figura (15). La distancia entre el eje de la boquilla central y las periféricas es de 33.87 [mm].

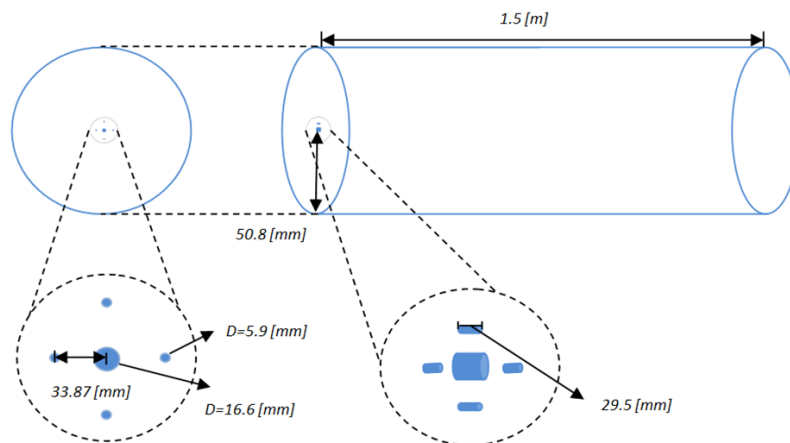


Figura 15.- Configuración del generador de vapor

4.2 Condiciones de Frontera y Consideraciones Numéricas

Las condiciones a la frontera aplicadas fueron:

- Límite adiabático e impermeable
- Condición de no deslizamiento, véase figura (16).

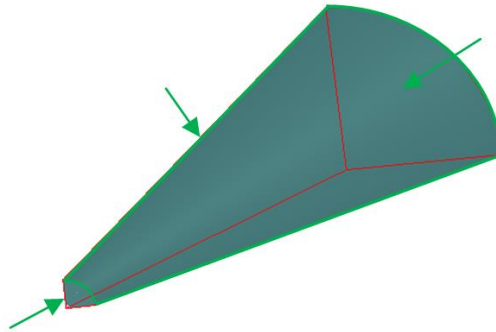


Figura 16.- Condición de no deslizamiento.

El dominio de cálculo para la simulación es de sólo un cuarto de la cámara de combustión, debido a la simetría existente del fenómeno en estudio. Para dicho estudio se realizó la simulación con dos boquillas, una central de 8.3 [mm], por donde se ingresa el oxígeno y solo una boquilla periférica de diámetro de 5.9 [mm], por la cual se inyecta el metano una temperatura de 300 [K], véase tabla (1).

Tabla 1: Condiciones de entrada de los gases.

<i>Gases</i>	<i>Temperatura [K]</i>	<i>Densidad $\left[\frac{Kg}{m^3}\right]$</i>
<i>CH₄</i>	300	0.0505
<i>O₂</i>	300	1.007

Para simular el proceso de combustión en el generador de vapor se optó por el modelo EBU (Eddy Break Up), además se consideró un proceso de combustión completo, en donde se tiene como productos el dióxido de carbono y vapor de agua, sin pérdidas de calor (adiabático). El sistema simple de reacción química utilizado para el proceso se muestra a continuación:



Se calcularon balances molares respectivamente, aumentando y disminuyendo la proporción estequiométrica en valores de 5 % para lograr un defecto y un exceso de 50% de oxígeno en la reacción, llevando a cabo las simulaciones del proceso de combustión obteniendo 21 simulaciones. Las velocidades de inyección del oxígeno permanecieron constantes, mientras que la velocidad del metano fue variando, véase tabla (2). Para el análisis se ha usado una malla conformada por 280 nodos en dirección axial, 35 en la radial y 40 angularmente, todos uniformemente distribuidos, véase figura (17). Para elegir este mallado se realizó una independencia de malla donde se hicieron diversas simulaciones con un número mayor de celdas, hasta obtener un valor constante en las propiedades y así disminuir el tiempo de cálculo.

Tabla 2: Velocidad de entrada a la cámara de combustión.

<i>Porcentaje de oxígeno teórico</i>	<i>Velocidad de O₂ [$\frac{m}{s}$]</i>	<i>Velocidad de CH₄ [$\frac{m}{s}$]</i>
50%	10	19.790
55%	10	17.991
60%	10	16.492
65%	10	15.223
70%	10	14.136
75%	10	13.194
80%	10	12.369
85%	10	11.641
90%	10	10.995
95%	10	10.416
100%	10	9.895
105%	10	9.424
110%	10	8.996
115%	10	8.604
120%	10	8.246
125%	10	7.916
130%	10	7.612
135%	10	7.330
140%	10	7.068
145%	10	6.824
150%	10	6.597

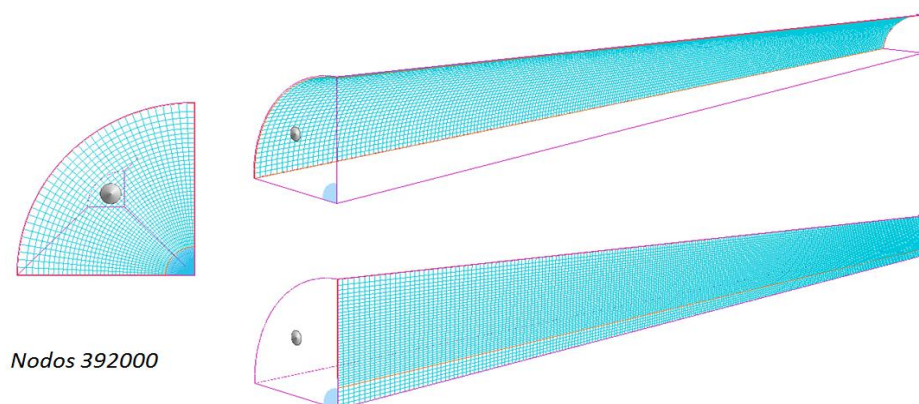


Figura 17.- Mallado del dominio de cálculo para el proceso de combustión.

Capítulo 5

Resultados

A continuación se presentan los valores obtenidos por la simulación, así como el cálculo analítico de temperatura, los cuales serán analizados a lo largo del presente capítulo. Los resultados de las distribuciones de temperatura se compararon con cálculos analíticos y con los datos obtenidos por Rebeca Pupo [2011].

5.1 Propiedades de flujo

Como se mencionó en el capítulo anterior, las simulaciones fueron realizadas en una cuarta parte del dominio total del generador; no obstante, en las siguientes imágenes se muestran los planos que cortan el dominio completo, esto con la finalidad de apreciar mejor la geometría, comportamiento y las propiedades de la llama. Solo se presentan las imágenes de tres casos los cuales son los críticos para defecto y exceso de oxígeno, además del estequiométrico.

5.1.1 Temperatura

La temperatura adiabática de llama obtenida en la simulación fue de 5240 K (con la relación estequiométrica), esta temperatura se ubica entre el chorro de oxígeno y los chorros de metano para cada uno de los casos simulados, véase figura (18).

La distribución de los contornos de temperatura se observa a todo lo largo y ancho de la cámara de combustión como se puede apreciar en la figura (18). Para un defecto de oxígeno (50%) la temperatura máxima se encuentra en el frente de llama; mientras que para un exceso de oxígeno (150%) la temperatura máxima se adhiere a las paredes, aproximadamente en la parte central del generador de vapor, esto es consecuencia de la disminución del flujo de metano para satisfacer la demanda de oxígeno; en la relación estequiométrica ocurre lo contrario ya que se extiende hasta la salida del generador haciéndose más eficiente el proceso de combustión, debido a que al ser una mezcla perfecta no existe presencia de reactantes en los productos, eliminando las pérdidas de energía.

Para las simulaciones con defecto y con exceso de oxígeno, observadas en la distribución de los contornos de temperatura, con defecto de oxígeno hay metano sin quemar y con exceso de oxígeno hay presencia de este en los productos, lo que provoca una disminución de energía liberada en el generador de vapor.

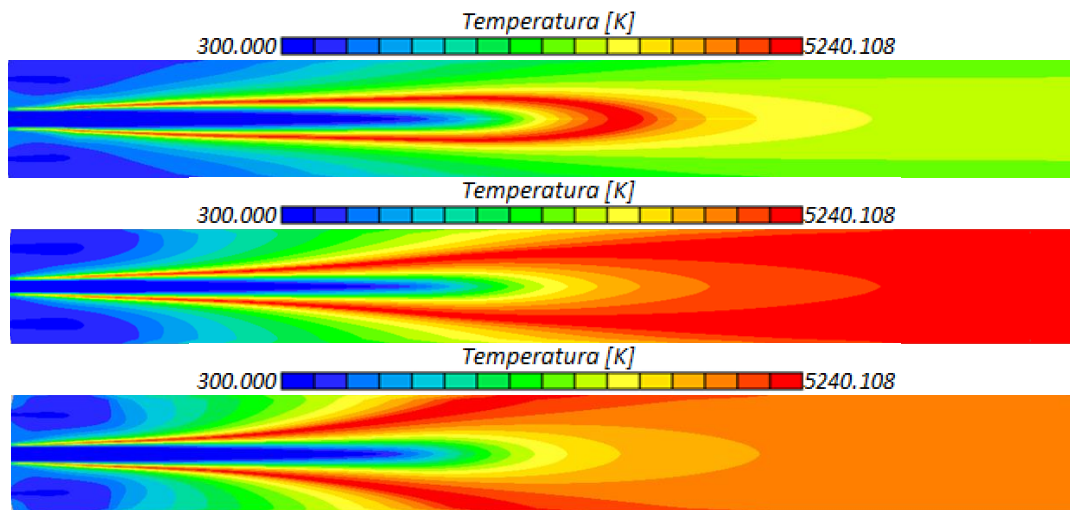


Figura 18.- Contornos de temperatura, extraídos de un plano que pasa por el centro de la boquilla del oxígeno y dos de metano, para 50%, 100% y 150% de oxígeno.

La temperatura adiabática de llama simulada a la salida del generador de vapor es cercana a una temperatura de combustión adiabática reportada de 5004 K [Pupo, 2011], y a una temperatura adiabática de llama calculada de 5019 K [Russell y Adebisi, 2000]. En la figura (20) se presenta el cálculo de la temperatura adiabática de llama, además de las predicciones de temperatura con la simulación a la salida del generador de vapor y las temperaturas reportadas por R. Pupo; en ella se observa que la tendencia de los datos es semejante solo que el punto máximo reportado por Pupo se encuentra ligeramente mayor en el eje de las abscisas debido a que no realizó el cálculo con la fracción estequiométrica. Se calculó el porcentaje de error de los datos obtenidos de las simulaciones a la salida del generador de vapor, contra los datos obtenidos del cálculo analítico tomados como referencia, véase tabla (3).

Las temperaturas usadas para generar la gráfica de la figura (21) fueron obtenidos del centro de la llama, véase figura (19). En la zona número uno se observa un intervalo sin pendiente donde todas las líneas de las proporciones de oxígeno calculadas tienen el mismo valor, ya que éste se inyecta a 300 K, durante el proceso de combustión que corresponde a la zona número dos la pendiente de la gráfica se vuelve positiva, las reacciones metano-oxígeno comienzan a producirse lentamente a una temperatura próxima a 600 K, tomando un curso más rápido cuando se superan los 800 K finalmente en la zona número tres se alcanza la temperatura máxima, la cual tiene una localización distinta para cada proporción, se nota un desfase en cada línea de acuerdo a la distancia donde se alcanza la máxima temperatura debido a que en cada simulación ésta tiene una ubicación diferente dentro de la cámara de combustión.

Tabla 3.- Porcentaje de error.

Y	TALL c	TALL s	%
0.5	4341	4396	1.267
0.476	4465	4485	0.443
0.455	4555	4595	0.872
0.435	4646	4679	0.712
0.417	4739	4776	0.785
0.4	4808	4884	1.579
0.385	4901	4971	1.428
0.37	4953	5033	1.615
0.357	4991	5105	2.284
0.345	5008	5132	2.468
0.333	5019	5140	2.411
0.323	4974	5064	1.810
0.313	4927	4993	1.330
0.303	4861	4911	1.024
0.294	4798	4818	0.413
0.286	4746	4763	0.358
0.278	4690	4699	0.200
0.27	4630	4661	0.673
0.263	4572	4612	0.872
0.256	4517	4546	0.639
0.25	4464	4499	0.778

Anteriormente se mencionó que para 50% de oxígeno la temperatura de combustión adiabática se localiza a la mitad del generador de vapor, véase figura (19), y posteriormente disminuye al mezclarse con otros gases; dentro de la gráfica caen las líneas por la disminución de temperatura de los gases a la salida del generador de vapor, estas temperaturas se observan en la parte posterior de la gráfica. En la relación estequiométrica se aprecia que las líneas toman valores positivos hasta llegar a la temperatura máxima y no caen, tomando los valores más altos respecto a las líneas de las demás simulaciones. Para un exceso de 50% de oxígeno la temperatura máxima se aprecia al final de la línea, ya que la temperatura de combustión adiabática es desfasada hacia las paredes de la cámara de combustión.

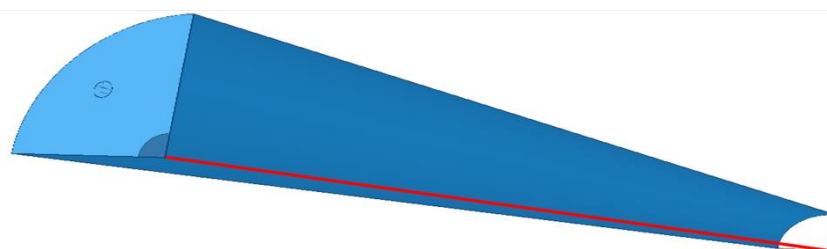


Figura 19.- Plano del centro de la llama.

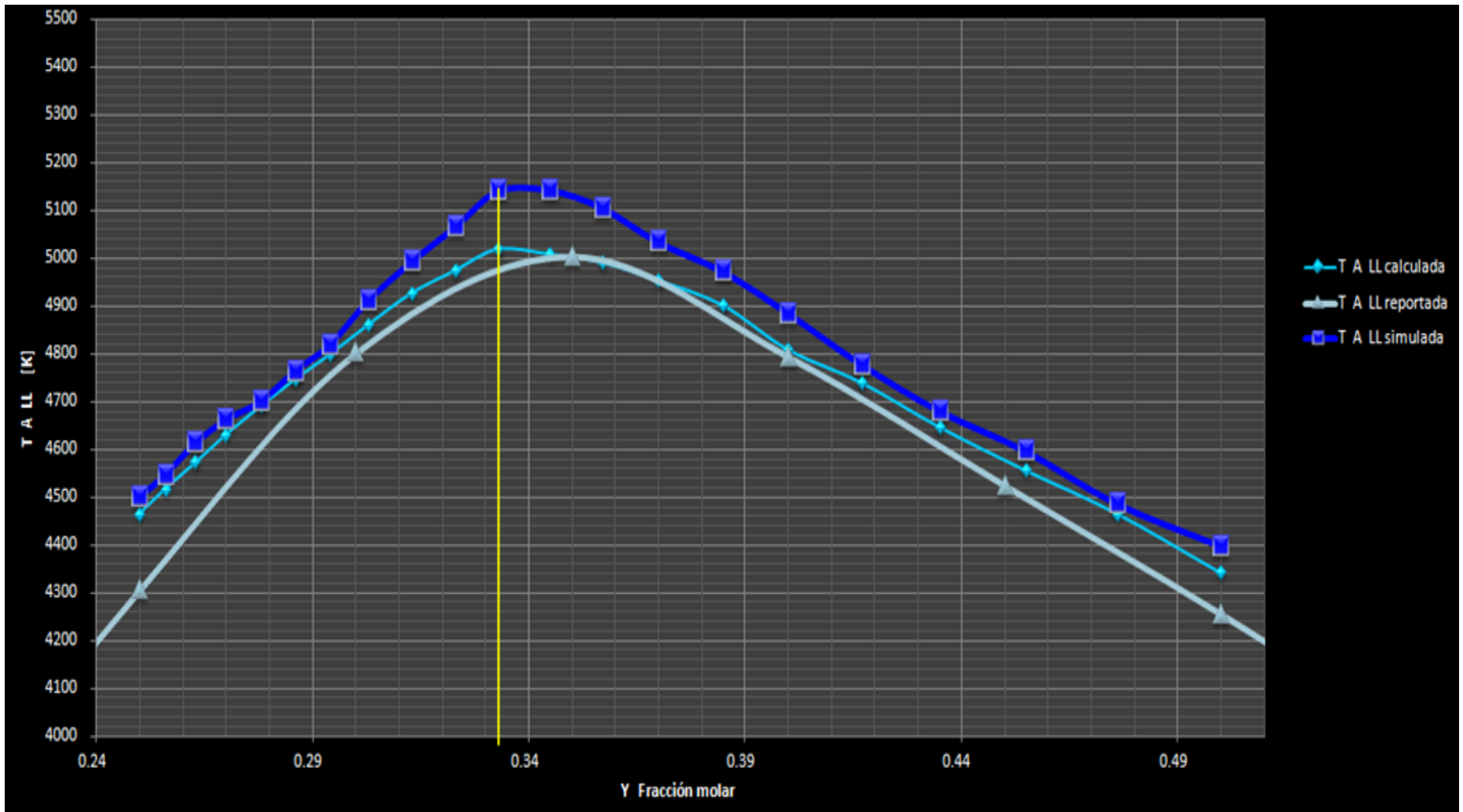


Figura 20.- Gráfica de temperatura adiabática de llama para cada una de las proporciones simuladas.

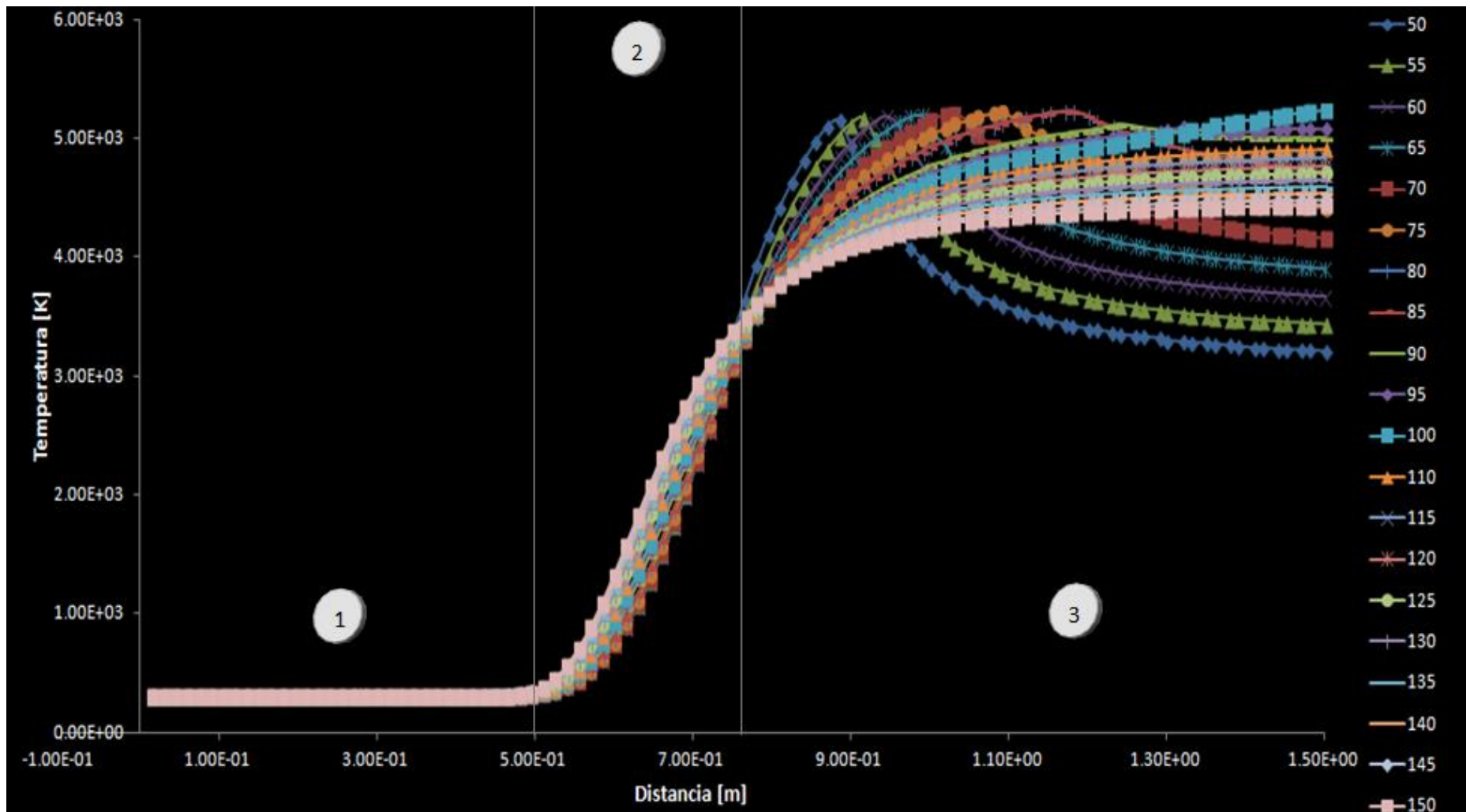


Figura 21.- Gráfica de temperatura a la salida del generador de vapor para cada una de las proporciones simuladas.

5.1.2 Velocidad

La velocidad de inyección del metano fue variando para satisfacer las relaciones molares calculadas, mientras que la velocidad de alimentación de oxígeno se mantuvo constante; para un defecto de 50% de oxígeno, la velocidad en el chorro de metano es la máxima, conforme la velocidad de inyección del metano va disminuyendo, para equilibrar la relación hasta llegar a la estequiométrica y posteriormente a un exceso de 50% de oxígeno, la influencia del chorro de oxígeno hacia los chorros de metano va en aumento, véase figura (22). Los chorros de metano son arrastrados y se unen al flujo del chorro de oxígeno, conforme se alejan de las boquillas van disminuyendo su velocidad debido a la expansión dentro de la cámara de combustión.

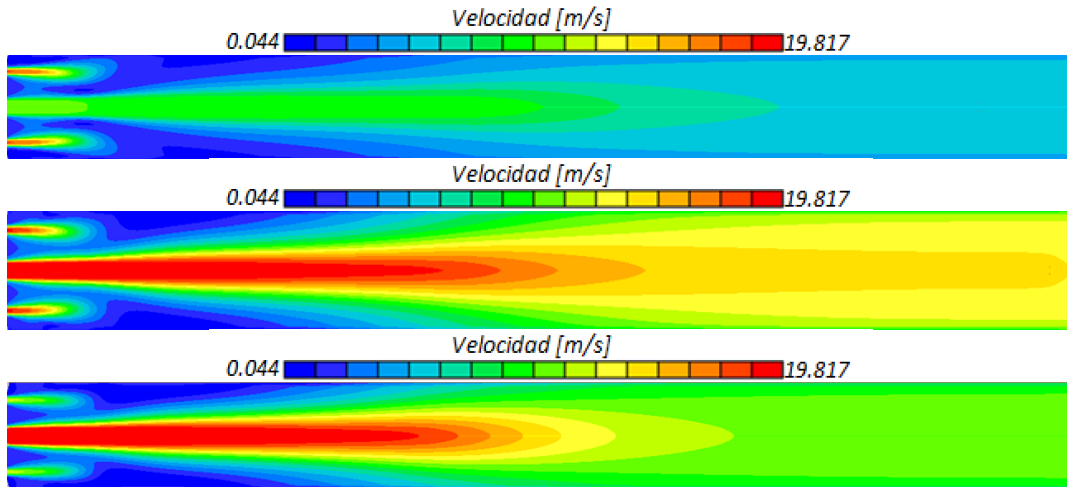


Figura 22.- Contornos de velocidad, extraídos de un plano que pasa por el centro de la boquilla del oxígeno y dos de metano, para 50%, 100% y 150% de oxígeno.

En la gráfica de la figura (24) se aprecia la relación entre la velocidad y la longitud de las recirculaciones observadas en las figuras (25) y (26). En el eje de las ordenadas se encuentra la relación de la longitud de las recirculaciones medida como se muestra en la figura (23) y el diámetro de la boquilla de oxígeno. En el eje de las abscisas encontramos la relación entre la velocidad de inyección del metano y la velocidad de inyección del oxígeno (el flujo de alimentación de oxígeno permanece constante). Se observa que a determinada velocidad las recirculaciones no aumentan su magnitud como en los casos con 110%, 120%, 130%, 140% y 150% de oxígeno.

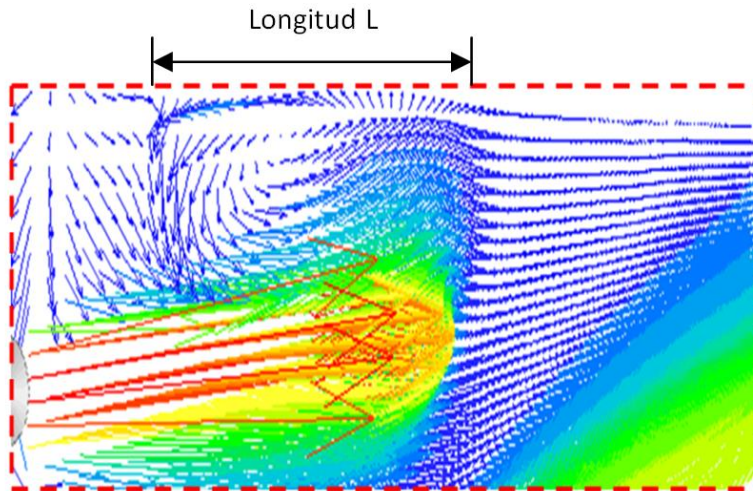


Figura 23.- Longitud de las recirculaciones.

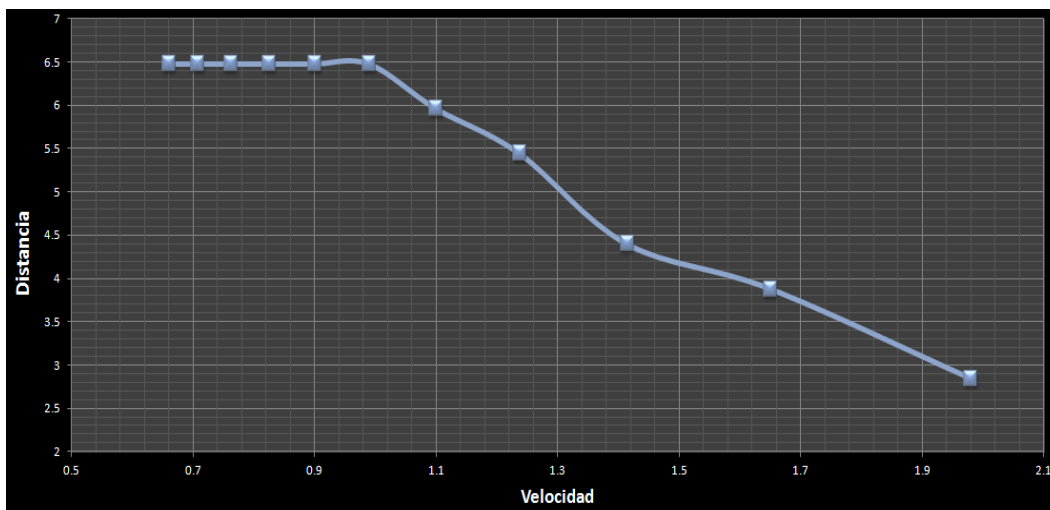
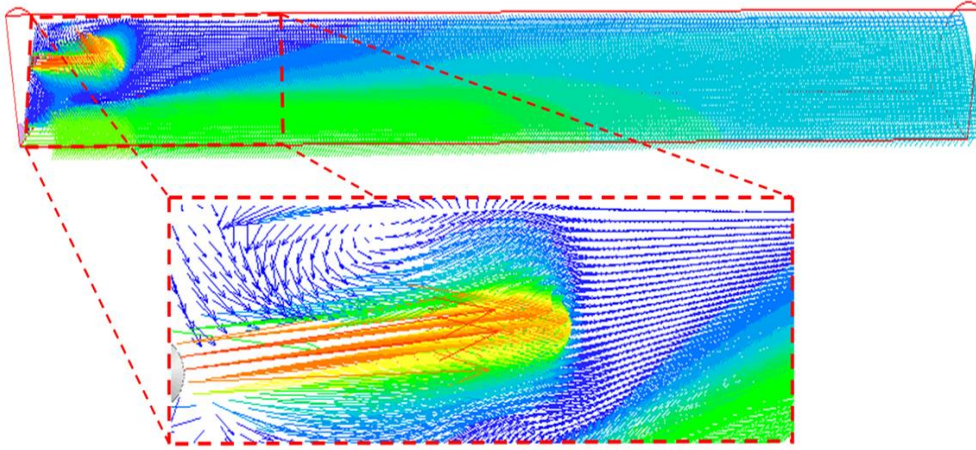
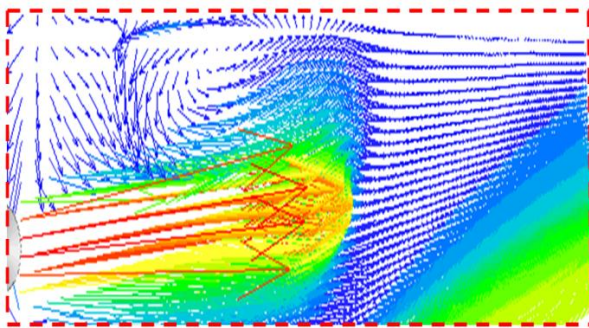


Figura 24.- Relación de la velocidad y la magnitud de las recirculaciones.

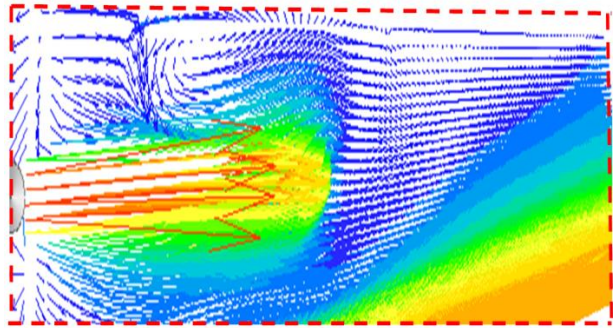
Los vectores de velocidad indican una recirculación que abarca la zona de las boquillas de metano y la pared para las simulaciones con 50%, 60%, 70% y 80% de oxígeno, debido al arrastre que ejerce el chorro central de oxígeno sobre los chorros periféricos de metano y a la configuración geométrica en la cámara de combustión, al disminuir el caudal en las boquillas de metano la magnitud de la fuerza de arrastre del chorro de oxígeno es mayor provocando que la recirculación crezca, como se observa en las figuras (25) y (26); además se generó una recirculación más pequeña delante del chorro de metano como en los casos con 90%, 100%, 110%, 120%, 130%, 140% y 150% de oxígeno. Dichas recirculaciones contienen una alta concentración de metano con una temperatura inferior a los 1000K, debido a que la zona de reacción se ubica entre el chorro de oxígeno y el de metano.



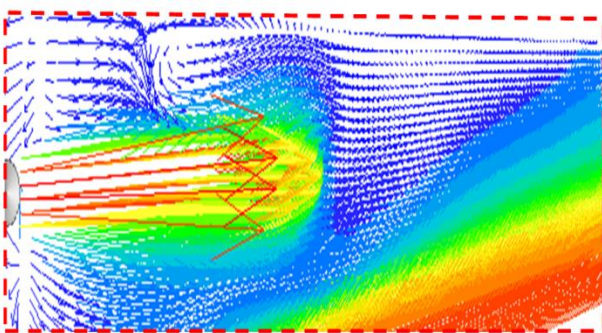
50% de oxígeno teórico



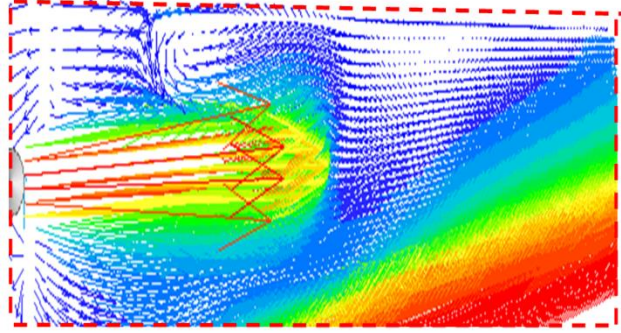
60% de oxígeno teórico



70% de oxígeno teórico

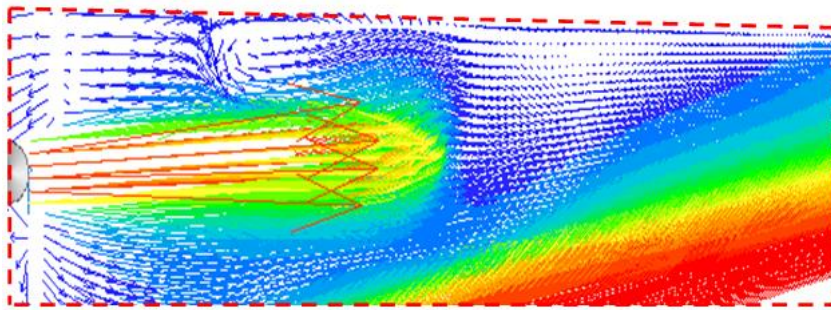


80% de oxígeno teórico

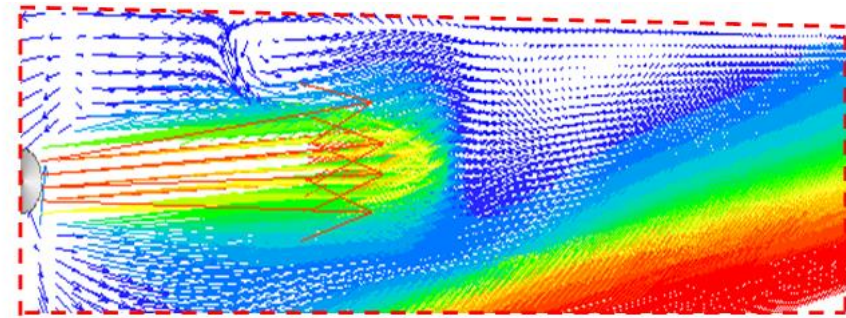


90% de oxígeno teórico

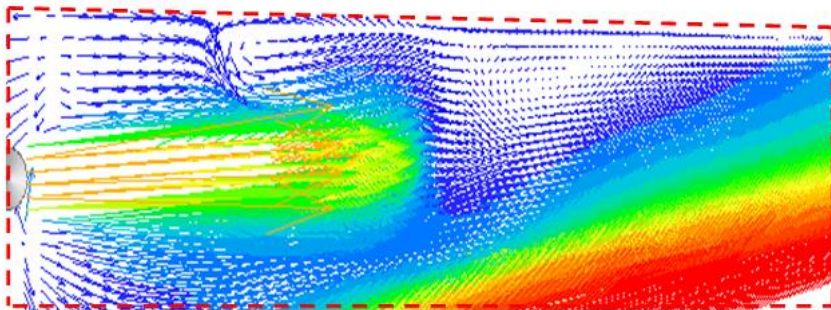
Figura 25- Vectores de velocidad



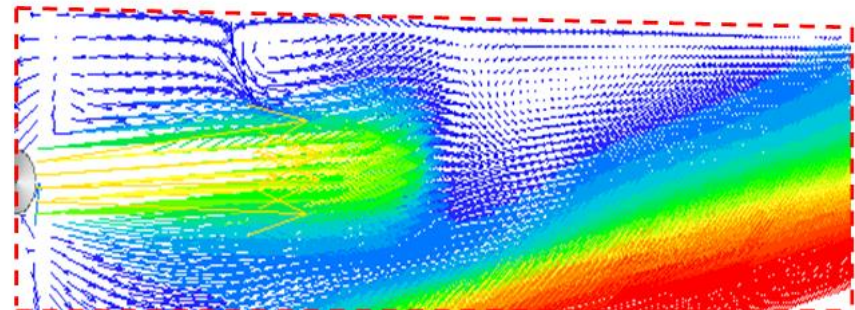
100% de oxígeno teórico



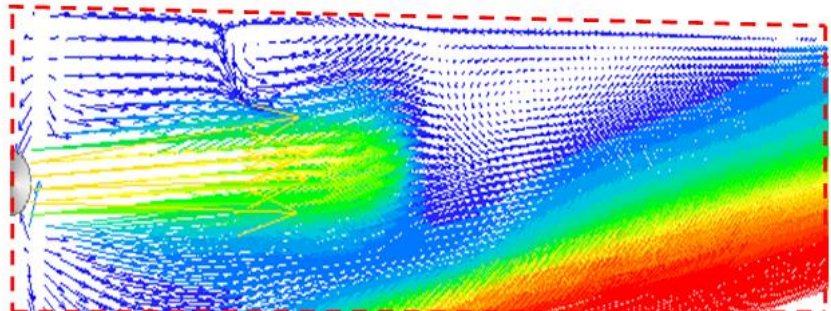
110% de oxígeno teórico



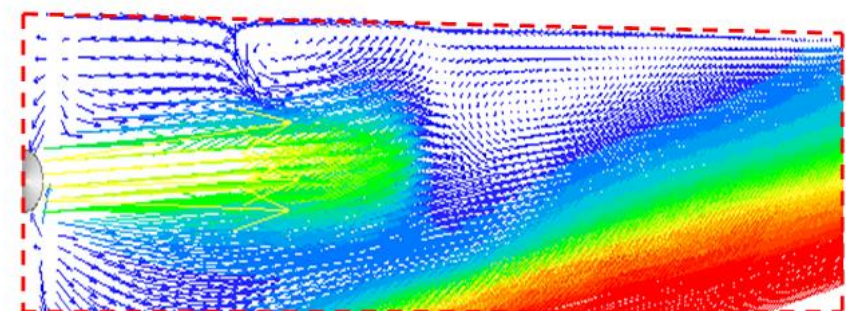
120% de oxígeno teórico



130% de oxígeno teórico



140% de oxígeno teórico



150% de oxígeno teórico

Figura 26.- Vectores de velocidad.

Se realizó el estudio de las temperaturas en el centro de las recirculaciones, véase figura (27). En la gráfica de la figura (28), se observa un descenso en la temperatura a la entrada del generador de vapor que representa la temperatura en la recirculación alcanzado los 600 K. Posteriormente esta temperatura aumenta, para los casos con defecto de oxígeno la temperatura máxima se alcanza a la salida del generador de vapor, ya que el plano donde se toman las temperaturas no toca el frente de llama, así mismo se contempla una temperatura mayor de entre estos casos para la relación estequiométrica; para defecto de oxígeno se presenta un punto máximo antes de descender y tomar el valor de la temperatura de los gases de combustión, esto debido a que en estos casos el frente de llama se abre y se pega a la pared.

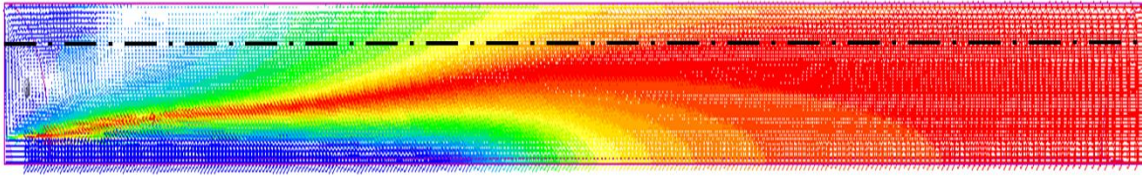


Figura 27.- Plano que pasa por el centro de las recirculaciones.

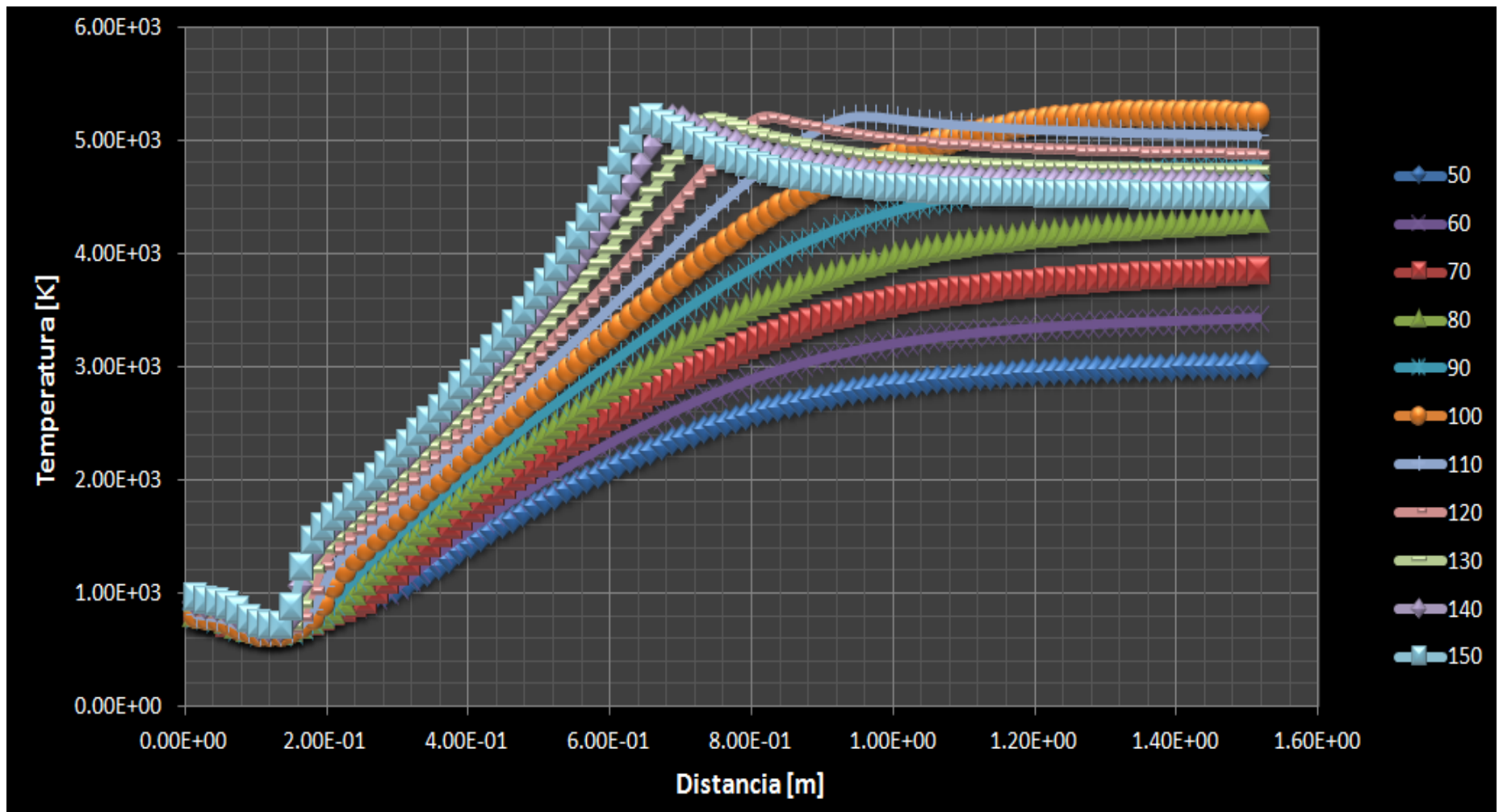


Figura 28.- Gráfica de temperaturas sobre el centro de las recirculaciones.

5.1.3 Densidad

En la figura (29) se observa que al descender la presencia de oxígeno y metano la densidad disminuye, al mismo tiempo aumenta la concentración de los productos de combustión (dióxido de carbono y vapor de agua), véase figuras (31, 32 y 33) al igual que la temperatura; por lo tanto, en la zona donde solamente se encuentran los productos, la temperatura alcanza su valor más alto y el valor más bajo en la densidad, esto se analiza comparando las gráficas de las figuras (20) y (30).

Para la primera distribución predomina una alta densidad en el primer tercio de la cámara de combustión, en la segunda distribución la distancia que alcanza la densidad de los chorros de metano disminuye y la del chorro de oxígeno aumenta, en la última distribución se aprecia una mayor disminución en la distancia que alcanza la densidad de los chorros de metano, todo esto debido a la afluencia de los chorros de metano y a la temperatura de los gases de combustión.

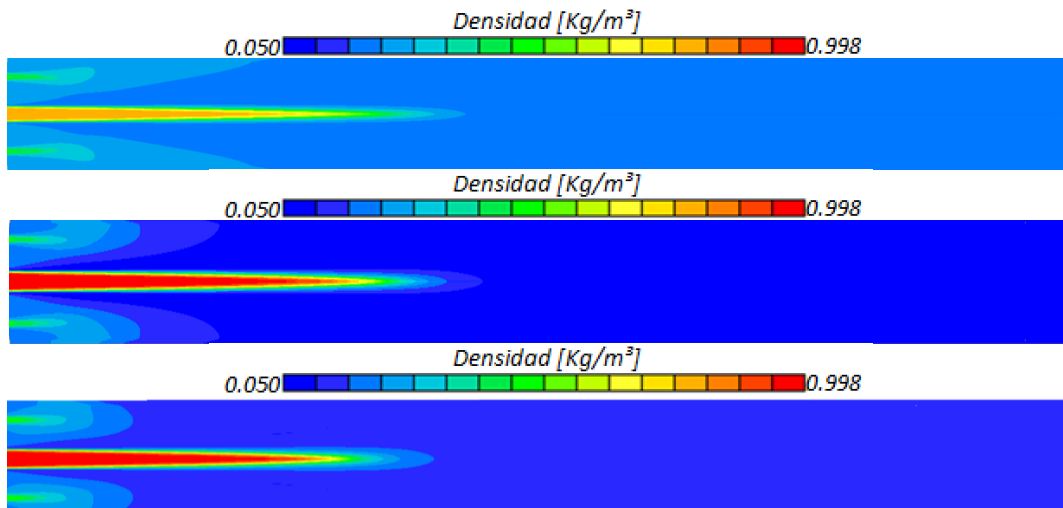


Figura 29.- Contornos de densidad, extraídos de un plano que pasa por el centro de la boquilla del oxígeno y dos de metano, para 50%, 100% y 150% de oxígeno.

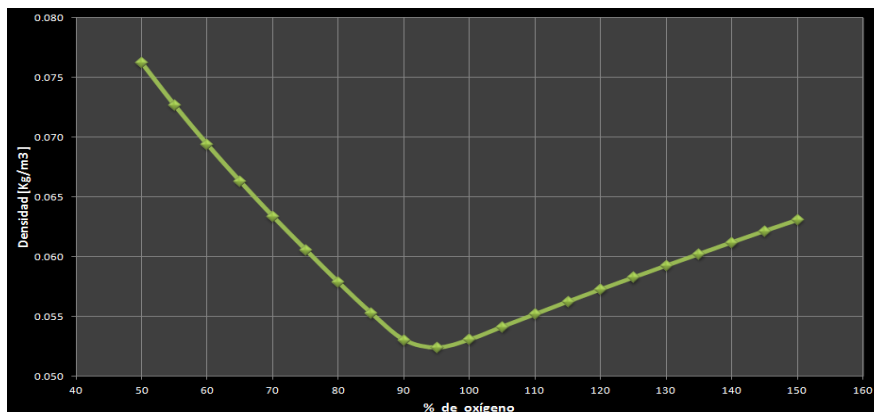


Figura 30.- Densidad a la salida del generador de vapor para cada una de las proporciones simuladas.

5.1.4 Fracciones másicas.

La zona donde se lleva a cabo el proceso de combustión se ubica en la fracción másica más alta de productos (compuestos por dióxido de carbono y vapor de agua), dicho proceso inicia muy cerca de las boquillas.

Las fracciones másicas de las especies químicas son presentadas en las figuras (31, 32 y 33), donde se observa que para la simulación con defecto de 50% de oxígeno al final del generador de vapor la presencia de metano es considerable, ya que al estar en exceso dentro de la relación estequiométrica éste no reaccionó por completo y se encuentra después de la zona de reacción como producto de la combustión, mientras que la cantidad de oxígeno es nula al final del generador.

Para la simulación con 100% de oxígeno teórico la fracción másica de productos es mayor después del frente de llama donde el oxígeno y el metano son consumidos en su totalidad y a la salida del generador sólo existen productos de combustión.

La cantidad de metano observada en la simulación con exceso de 150% de oxígeno es menor que en las dos simulaciones anteriores, además se aprecia que los productos de combustión tienen una presencia menor a la salida del generador, la fracción másica de oxígeno en la misma región es considerable debido a que reaccionó todo el metano por el exceso de oxígeno presente en la reacción y éste se encuentra dentro de los productos de combustión.

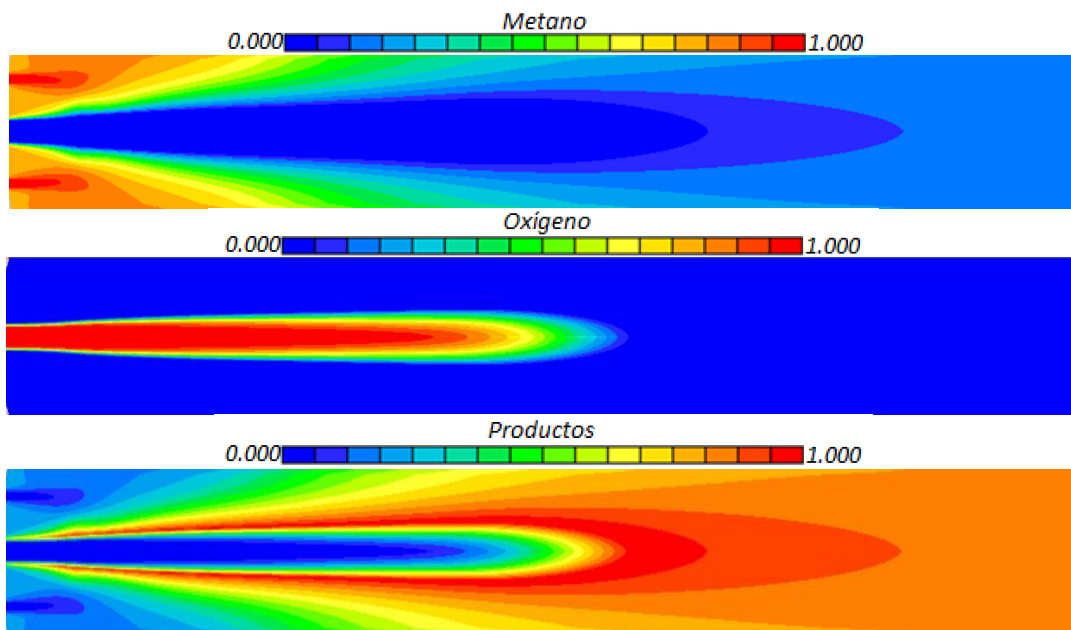


Figura 31.- Contornos de las fracciones másicas para las especies químicas presentes en el proceso de combustión con defecto de 50% de oxígeno.

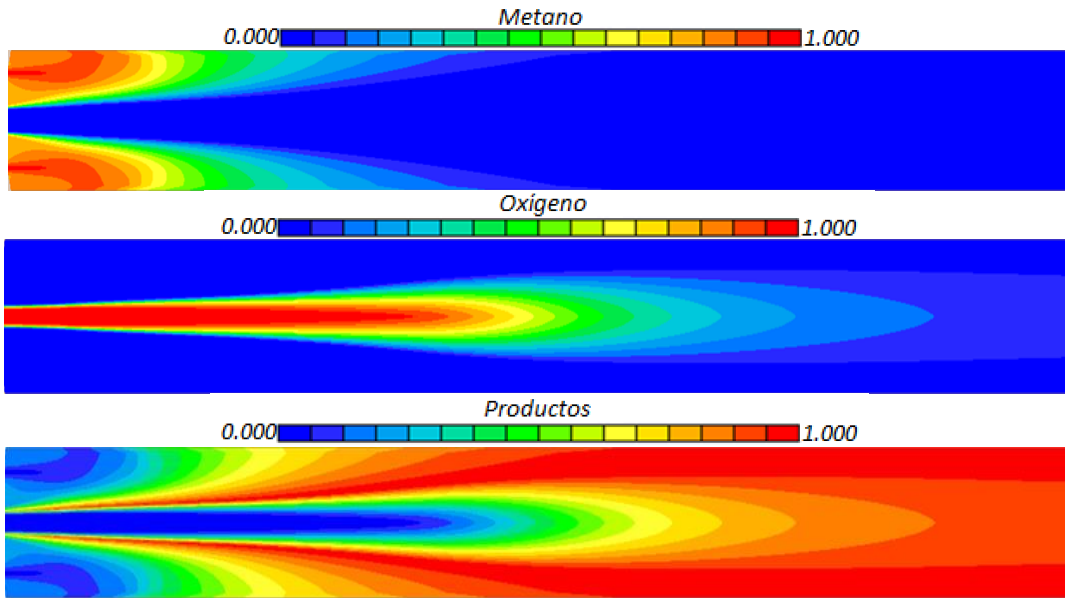


Figura 32.- Contornos de las fracciones másicas para las especies químicas presentes en el proceso de combustión con 100% de oxígeno teórico.

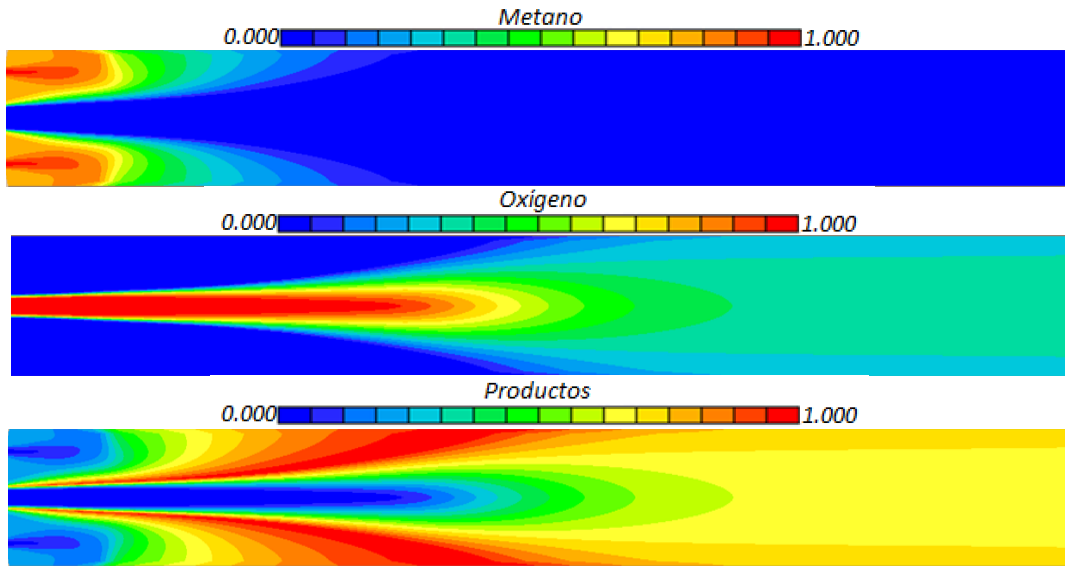


Figura 33.- Contornos de las fracciones másicas para las especies químicas presentes en el proceso de combustión con exceso de 150% de oxígeno.

Conclusiones

En este trabajo se ha simulado numéricamente el proceso de combustión de una llama difusiva turbulenta de metano y oxígeno puro, variando la velocidad de inyección del combustible. Se utilizó el método de volúmenes finitos con el que se resuelven las ecuaciones constitutivas en términos del promediado de Favre que modelan el fenómeno y el modelo de turbulencia $\mathcal{K} - \varepsilon$ para el cierre de las ecuaciones. Posteriormente se analizaron las distribuciones de temperatura, velocidad, densidad y fracciones másicas de las especies químicas presentes en el proceso de combustión.

Con el análisis de los datos obtenidos de las simulaciones se concluye que la temperatura de llama adiabática más alta entre todas las relaciones molares estudiadas fue de 5240K con la proporción estequiométrica. Estos resultados concuerdan con la temperatura de combustión adiabática calculada de 5219 K y con una temperatura de combustión adiabática reportada de 5004 K [Pupo, 2011]. Al variar la velocidad de inyección de metano para alcanzar un defecto de oxígeno hay presencia de metano sin quemar y con exceso de oxígeno hay presencia de éste en los productos, por lo que se generó pérdida de calor disminuyendo la temperatura de los gases de combustión a la salida del generador de vapor, sin embargo durante el proceso de combustión se alcanzó una temperatura cercana a la temperatura de llama adiabática estequiométrica para todos los casos.

Los vectores de velocidad indican una recirculación entre las boquillas de metano y la pared, para los casos con una proporción superior a 85% de oxígeno se generó una recirculación más pequeña delante de la primera recirculación. Tanto para defecto como para exceso de oxígeno dichas recirculaciones contienen una concentración muy alta de metano, esto se debe al arreglo de las boquillas, y una temperatura que alcanza los 600 K ya que la zona de reacción se ubica entre el chorro de oxígeno y el de metano, además se observó que la velocidad máxima para las recirculaciones es de 3.752 m/s. Se analizó la relación entre la velocidad y la longitud de las recirculaciones, demostrando que a una velocidad de inyección de metano mayor que 9.895 m/s las recirculaciones aumentan su longitud, (velocidad utilizada en el caso estequiométrico).

Se realizó el estudio de las temperaturas en el centro de las recirculaciones, donde se observa un descenso en la temperatura a la entrada del generador de vapor que representa la temperatura en la recirculación, posteriormente esta temperatura aumenta siguiendo el perfil de combustión para cada caso.

Sugerencias

Para continuar con el diseño del generador de vapor se sugiere:

- ❖ Modelar la combustión usando un modelo de radiación.
- ❖ El diseño de un sistema de inyección de agua.

Apéndice A

Turbulencia

En este apéndice se definen las características para considerar que un flujo se encuentra en régimen turbulento, los niveles de modelización de esta; además del modelo $\kappa - \varepsilon$, usado para la solución del problema presentado en esta tesis. Es indispensable mencionar que las ecuaciones que se usan consideran al flujo turbulento como un medio continuo.

A.1. Concepto

La definición del flujo turbulento es muy compleja, no hay una definición concisa y exacta de qué es un flujo turbulento, pero sí que existen una serie de características comunes a todos los flujos turbulentos:

Irregularidad.- Todos los flujos turbulentos son irregulares, aleatorios y caóticos. El flujo está formado por innumerables torbellinos de muy diferente escala, donde los torbellinos más grandes son del orden del tamaño característico de la geometría del flujo, mientras que los más pequeños son de un orden mucho menor que los anteriores y son disipados a energía interna por los esfuerzos viscosos. Cuanto mayor es el número de Reynolds del flujo, menor es el tamaño de las estructuras más pequeñas. Otro fenómeno que muestra la complejidad de los flujos turbulentos es la fluctuación rápida de las variables (como velocidad, temperatura, presión, etc.) con el tiempo, generalmente en torno a una medida que puede ser independiente del tiempo en el caso de flujo estacionario.

Difusividad.- En un flujo turbulento la difusividad aumenta. El hecho de que el flujo sea caótico y aleatorio hace que el fluido se mezcle intensamente entre sí. Debido a que se intensifica el intercambio de cantidad de energía y movimiento entre partículas y paredes, se retrasa el desprendimiento de la capa límite y se produce una mayor transferencia de calor y fricción en los flujos turbulentos que en los laminares.

Altos números de Reynolds.- El valor efectivo de número de Reynolds depende del tipo de aplicación. A medida que el Reynolds aumenta, el flujo laminar comienza a complicarse (generalmente deja de ser estacionario para convertirse en oscilatorio).

Tridimensionalidad.- Existen flujos turbulentos que al ser promediados en el tiempo resultan planos y otros cuyas escalas de fluctuaciones más grandes, resultan bidimensionales; sin embargo, a medida que se descende en el tamaño de las escalas del amplio espectro que caracteriza al flujo

turbulento, se encuentra que el movimiento asociado a estas escalas pequeñas es siempre tridimensional.

Disipación.- Los flujos turbulentos son disipativos, lo que significa que la energía cinética contenida en los torbellinos de menor tamaño es transformada en energía interna. Se produce un fenómeno de transferencia de energía desde las escalas más grandes a las pequeñas, proceso conocido como la cascada de energía. Los torbellinos o fluctuaciones turbulentas de tamaños característicos más grandes reciben la energía del flujo medio, estos torbellinos transfieren su energía prácticamente sin pérdidas a torbellinos más pequeños y así sucesivamente hasta llegar a torbellinos de un tamaño muy pequeño cuya energía es disipada por la viscosidad (disipación viscosa).

Un flujo turbulento se presenta debido a pequeñas perturbaciones, vórtices, que posteriormente crecen hasta una cierta amplitud alcanzando un nuevo estado; el nuevo estado puede ser a su vez, inestable frente a otras perturbaciones y crecer hasta pasar a otro estado; por último, el flujo se convierte en una superposición de perturbaciones aleatorias hasta alcanzar la condición de flujo turbulento.

En un flujo turbulento existe una gran variedad de escalas, que corresponden a la variedad de tamaños de vórtices, torbellinos, que en este existen. Estos vórtices son afectados por los gradientes de velocidad del flujo medio dominante y por la interacción existente entre los demás vórtices. Este proceso de división continua hasta que la escala de los torbellinos es tan diminuta que el número de Reynolds de los mismos no es lo suficientemente grande para que la inestabilidad persista. La energía cinética contenida en estos pequeños vórtices se transforma en energía térmica debido a la disipación viscosa. Esta variedad de tamaños de torbellinos se pueden agrupar en tres escalas.

Macro escala. Es la escala asociada a los vórtices más grandes presentes en el flujo. Las características de estos grandes torbellinos dependen de las condiciones de contorno del flujo y presentan un marcado carácter anisótropo.

Escala intermedia. Son escalas inferiores a la macro escala pero en las que aun no existe una disipación de energía.

Micro escala. Es la escala más pequeña, en la que se tiene una disipación de energía. Los vórtices presentes en esta escala presentan un carácter, contrario del torbellino en la macro escala, isótropo (Escala Kolmogórov).

A.2 Niveles de modelización.

La modelización matemática del flujo turbulento se lleva a cabo usando las ecuaciones constitutivas de mecánica de fluidos para un medio continuo. Estas ecuaciones tienen soluciones analíticas para algunos casos especiales, pero en general es imposible obtener soluciones para la mayor parte de los problemas que se presentan en ingeniería. La rápida evolución en los ordenadores y la creación de algoritmos específicos ha generado un gran avance en la solución numérica de dichos problemas dando lugar a la dinámica de fluidos computacional (CFD, Computational Fluid Dynamics).

DNS (Direct Numerical Simulation)

La resolución directa en las ecuaciones de Navier-Stokes (DNS), es la más evidente y exacta de predecir un flujo turbulento. En este tipo de simulación no se hacen aproximaciones ni promediados al resolver todas las escalas espaciales y temporales presentes en el flujo y los errores que en esta simulación son causa de la forma en que se realizó la discretización numérica. A pesar de su precisión, el costo computacional para poder realizar las simulaciones es muy alto y además solo se puede aplicar a geometrías sencillas.

LES (Large Eddy Simulation)

Dentro de las escalas espaciales y temporales presentes en los flujos turbulentos las más efectivas para el transporte de propiedades son las grandes escalas, mientras las demás escalas son muy débiles.

La simulación de grandes torbellinos (LES) simula estas escalas mayores y los efectos de las demás escalas se suman a las de mayor magnitud. A escalas menores es de esperar que los movimientos turbulentos sean menos dependientes del problema y se puedan modelar de forma más general. Existen diversos métodos de aproximación para las escalas pequeñas, los más simples son: el de longitud de mezcla, proporcional al tamaño de la malla y el modelo de smagorinsky. Aun haciendo esta consideración la simulación exige una gran capacidad computacional y tiempo de cálculo, que no se compara al DNS, pero que aún hace a este tipo de simulación costosa.

RANS (Reynolds-Average Navier-Stokes Equations)

Los RANS son modelos basados en aproximar los esfuerzos aparentes de Reynolds (ó de Favre en el caso de flujos compresibles). Los modelos RANS a su vez se dividen en modelos RANS de primer orden y de segundo orden. Los RANS de primer orden asumen una forma para el tensor de esfuerzos de Reynolds igual al tensor de esfuerzos viscoso (lo que se conoce con el nombre de aproximación de Boussinesq), introduciendo una viscosidad cinemática turbulenta (Eddy viscosity).

Los distintos modelos RANS de primer orden se catalogan en función del número de ecuaciones diferenciales que se necesitan resolver a la hora de obtener la viscosidad turbulenta. Así, existen modelos algebraicos (ó de 0 ecuaciones, como el modelo de longitud de mezcla de Prandtl), de una ecuación (ej. Spalart-Allmaras) y de dos ecuaciones (ej. modelo $\mathcal{K} - \varepsilon$). En cuanto a los RANS de segundo orden modelizan términos de las ecuaciones de evolución de cada uno de los esfuerzos de Reynolds (Reynolds-Stress Transport models (RST), por lo que este modelo añade 6 ecuaciones diferenciales a resolver) o usan esas ecuaciones de evolución para aproximar los esfuerzos de Reynolds de una forma más precisa que con el modelo de Boussinesq (ej. Algebraic Reynolds-Stress models (ARS) define una ley para los esfuerzos de tipo no lineal).

En los flujos ingenieriles se está más interesado en el comportamiento del flujo medio que en los detalles de las fluctuaciones existentes, con lo que se adopta una aproximación estadística de dichas fluctuaciones. Promediando las ecuaciones de conservación en periodos de tiempos más amplios que el tiempo característico de las fluctuaciones.

A continuación se mostrara el promediado de la ecuación de conservación de masa y cantidad de movimiento en un flujo incompresible y estacionario.

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \nabla \cdot (uu) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} + \nu(\nabla \cdot \nabla u) \quad (\text{A.1})$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + \nabla \cdot (vu) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} + \nu(\nabla \cdot \nabla v) \quad (\text{A.2})$$

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \nabla \cdot (wu) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} + \nu(\nabla \cdot \nabla w) \quad (\text{A.3})$$

Se descompone la variable instantánea en la suma de su valor medio y su fluctuación

($u = U + u'$; $u = \mathcal{U} + u'$; $v = \mathcal{V} + v'$; $w = \mathcal{W} + w'$; $p = P + p'$). Para poder estudiar las fluctuaciones introducimos la descomposición de u y p en las ecuaciones de conservación y de movimiento. La ecuación de continuidad toma en cuenta que $\nabla \cdot \bar{U} = \nabla \cdot U$, recalando que el flujo es incompresible y estacionario

$$\nabla \cdot U = 0 \quad (\text{A.4})$$

Sustituyendo el promedio y fluctuación de la velocidad en las ecuaciones (A.1), (A.2), (A.3), y realizando la aritmética de variables fluctuantes se obtienen las siguientes ecuaciones:

$$\underbrace{\frac{\partial u}{\partial t}}_{(I)} + \underbrace{\nabla \cdot (\mathcal{U}U)}_{(II)} + \underbrace{\nabla \cdot (\overline{u'u'})}_{(III)} = -\underbrace{\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x}}_{(IV)} + \underbrace{\nu(\nabla \cdot \nabla U)}_{(V)} \quad (\text{A.5})$$

$$\underbrace{\frac{\partial v}{\partial t}}_{(I)} + \underbrace{\nabla \cdot (\mathcal{V}U)}_{(II)} + \underbrace{\nabla \cdot (\overline{v'u'})}_{(III)} = -\underbrace{\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x}}_{(IV)} + \underbrace{\nu(\nabla \cdot \nabla \mathcal{V})}_{(V)} \quad (\text{A.6})$$

$$\underbrace{\frac{\partial \mathcal{W}}{\partial t}}_{(I)} + \underbrace{\nabla \cdot (\mathcal{W}U)}_{(II)} + \underbrace{\nabla \cdot (\mathcal{W}'u')}_{(III)} = -\underbrace{\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x}}_{(IV)} + \underbrace{v(\nabla \cdot \nabla \mathcal{W})}_{(V)} \quad (\text{A.7})$$

El término (III), que no aparece en las ecuaciones instantáneas, es el promedio de las fluctuaciones presentes en el flujo. A las ecuaciones (A.5), (A.6) y (A.7) se les llama ecuaciones de Reynolds que se pueden reescribir de la siguiente forma:

$$\frac{\partial \mathcal{U}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathcal{U}U) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} + v(\nabla \cdot \nabla \mathcal{U}) - \frac{\overline{\partial u'^2}}{\partial x} - \frac{\overline{\partial u'v'}}{\partial y} - \frac{\overline{\partial u'w'}}{\partial z} \quad (\text{A.8})$$

$$\frac{\partial \mathcal{V}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathcal{V}U) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} + v(\nabla \cdot \nabla \mathcal{V}) - \frac{\overline{\partial u'v'}}{\partial x} - \frac{\overline{\partial v'^2}}{\partial y} - \frac{\overline{\partial v'w'}}{\partial z} \quad (\text{A.9})$$

$$\frac{\partial \mathcal{W}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathcal{W}U) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} + v(\nabla \cdot \nabla \mathcal{W}) - \frac{\overline{\partial u'w'}}{\partial x} - \frac{\overline{\partial v'w'}}{\partial y} - \frac{\overline{\partial w'^2}}{\partial z} \quad (\text{A.10})$$

Estos nuevos términos se pueden expresar como una matriz que lleva por nombre tensor de esfuerzos de Reynolds, que representa la relación entre las fluctuaciones que se tienen en una dirección con las que se tienen en otra.

$$(\text{Tensor de esfuerzos de Reynolds}) = \bar{\rho} \begin{bmatrix} \overline{u'u'} & \overline{u'v'} & \overline{u'w'} \\ \overline{u'v'} & \overline{v'v'} & \overline{v'w'} \\ \overline{u'w'} & \overline{v'w'} & \overline{w'w'} \end{bmatrix}$$

Es importante resaltar que se considera isotropía del flujo, dando como resultado que el tensor sea simétrico. Ahora las seis nuevas incógnitas se deben relacionar con las ya existentes, resolviendo una ecuación de transporte por cada una por lo que es necesario un modelo de turbulencia (o cierre de las ecuaciones).

A.3 Modelos de viscosidad turbulenta.

Un método alternativo para poder medir los esfuerzos de Reynolds, cuya notación indicial es $\overline{u'_i u'_j}$, es el modelo que se basa en el concepto de la existencia de una viscosidad turbulenta, en la que se supone, en la misma manera que en un flujo laminar, que los esfuerzos viscosos son proporcionales al gradiente de velocidad. En un flujo turbulento los esfuerzos generados por las fluctuaciones son proporcionales al gradiente de velocidades media. Esta relación existente entre los esfuerzos de Reynolds y las variables medias es:

$$\overline{\rho u'_i u'_j} = -\bar{\rho} \nu_T \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) + \frac{2}{3} \left(\bar{\rho} \mathcal{K} + \bar{\rho} \nu_T \frac{\partial \bar{u}_k}{\partial x_k} \right) \delta_{ij} \quad (\text{A.11})$$

Donde $\nu_T = \frac{\mu_T}{\bar{\rho}}$ es la viscosidad turbulenta. Esta viscosidad, a diferencia de la viscosidad molecular $\nu = \frac{\mu}{\bar{\rho}}$, no es una propiedad del fluido, sino es una característica del régimen de flujo, y puede tener variaciones significativas dentro de un punto a otro en el mismo flujo.

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

$$\overline{\rho u'_i u'_\alpha} = -\bar{\rho} \frac{\nu_T}{S_{CT}} \frac{\partial \bar{\phi}_\alpha}{\partial x_j} \quad (\text{A.12})$$

Donde S_{CT} es el número de Schmidt/Prandtl turbulento.

La viscosidad turbulenta puede calcularse de diversas formas dando lugar a una variedad de modelos con un número de variable de ecuaciones diferenciales. Entre los más usados de estos modelos son los de la familia $\mathcal{K} - \varepsilon$.

A.3.1 Modelo $\mathcal{K} - \varepsilon$.

Modelo de viscosidad turbulenta, donde la viscosidad es puesta en función de dos nuevas variables, \mathcal{K} y ε . A continuación se presenta la ecuación de conservación de \mathcal{K} .

$$\begin{aligned} \underbrace{\frac{\partial \rho \mathcal{K}}{\partial t}}_{\substack{\text{Cambio de} \\ \mathcal{K} \text{ respecto} \\ \text{al tiempo} \\ (I)}} + \underbrace{\nabla \cdot (\rho \mathcal{K} U)}_{\substack{\text{Transporte} \\ \text{de } \mathcal{K} \text{ por} \\ \text{convección} \\ (II)}} = - \underbrace{\nabla \cdot (-\bar{p}' u')}_{\substack{\text{Transporte} \\ \text{de } \mathcal{K} \text{ por cambio} \\ \text{de presión} \\ (III)}} + \underbrace{\nabla \cdot (2\mu \overline{u'_i e'_{ij}})}_{\substack{\text{Transporte} \\ \text{de } \mathcal{K} \text{ debido a} \\ \text{esfuerzos viscosos} \\ (IV)}} \\ - \underbrace{\nabla \cdot \rho \frac{1}{2} (\overline{u'_i \cdot u'_i u'_j})}_{\substack{\text{Transporte de } \mathcal{K} \\ \text{por esfuerzos} \\ \text{de Reynolds} \\ (V)}} - \underbrace{2\mu \overline{e'_{ij} \cdot e'_{ij}}}_{\substack{\text{Cambio} \\ \text{de } \mathcal{K} \text{ por} \\ \text{disipación} \\ (VI)}} - \underbrace{\rho \overline{u'_i u'_j} \cdot E_{ij}}_{\substack{\text{Producción} \\ \text{turbulenta} \\ (VII)}} \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

Donde $e_{ij} = E_{ij} + e'_{ij}$

$$e_{xx} = \frac{\partial U}{\partial x} + \frac{\partial u'}{\partial x}; \quad e_{xy} = 0.5 \left(\frac{\partial U}{\partial y} + \frac{\partial U}{\partial x} \right) + 0.5 \left(\frac{\partial u'}{\partial y} + \frac{\partial v'}{\partial x} \right)$$

El término (VI) es la disipación de energía debido a los remolinos más pequeños existentes en el régimen de flujo turbulento. Este término es siempre negativo al igual que (III), (V) y (VII), esto se debe al transporte de la propiedad que se tiene en un punto del flujo y sus vecinos. El término $\varepsilon = 2\nu \overline{e'_{ij} e'_{ij}}$ es conocido como la tasa de disipación de energía turbulenta y es el término con mayor valor en la ecuación.

Se puede establecer una ecuación de transporte para \mathcal{K} y ε ; además usar estas variables para definir una escala de velocidades y la longitud característica.

$$v = k^{\frac{1}{2}} ; I = \frac{k^{\frac{3}{2}}}{\varepsilon} ; \mu_T = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon}$$

$$\underbrace{\frac{\partial \rho \mathcal{K}}{\partial t}}_{\text{Cambio de } \mathcal{K} \text{ respecto al tiempo (I)}} + \underbrace{\nabla \cdot (\rho \mathcal{K} U)}_{\text{Transporte de } \mathcal{K} \text{ por convección (II)}} = \underbrace{\nabla \cdot \left(\frac{\mu_T}{\sigma_\kappa} \nabla \kappa \right)}_{\text{Transporte de } \mathcal{K} \text{ por difusión (III)}} + \underbrace{2\mu_T E_{ij} \cdot E_{ij}}_{\text{Cambio por producción de } \mathcal{K} \text{ (IV)}} - \underbrace{\rho \varepsilon}_{\text{Cambio por destrucción de } \mathcal{K} \text{ (V)}} \quad (\text{A.14})$$

$$\underbrace{\frac{\partial \rho \varepsilon}{\partial t}}_{\text{Cambio de } \varepsilon \text{ respecto al tiempo (I)}} + \underbrace{\nabla \cdot (\rho \varepsilon U)}_{\text{Transporte de } \varepsilon \text{ por convección (II)}} = \underbrace{\nabla \cdot \left(\frac{\mu_T}{\sigma_\varepsilon} \nabla \varepsilon \right)}_{\text{Transporte de } \varepsilon \text{ por difusión (III)}} + \underbrace{C_{I_\varepsilon} \frac{\varepsilon}{\kappa} 2\mu_T E_{ij} \cdot E_{ij}}_{\text{Cambio por producción de } \varepsilon \text{ (IV)}} - \underbrace{C_{2_\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{\kappa}}_{\text{Cambio por destrucción de } \varepsilon \text{ (V)}} \quad (\text{A.15})$$

Estas ecuaciones contienen cinco incógnitas ajustables, para las cuales el modelo $\mathcal{K} - \varepsilon$ utiliza valores obtenidos mediante ajuste para un amplio rango de flujos turbulentos. Los valores se muestran a continuación.

$$C_\mu = 0.0845 \quad \sigma_\kappa = 1 \quad \sigma_\varepsilon = 1.314 \quad C_{I_\varepsilon} = 1.44 \quad C_{2_\varepsilon} = 1.92$$

Apéndice B

Esquemas de discretización.

Se presentan los diversos sistemas lineales de discretización del término convectivo de la ecuación general de transporte presentada en el tercer capítulo del presente trabajo.

En la formulación de la ecuación discretizada (3.1.1), se necesita conocer la densidad y la variable escalar ϕ , en cada una de las caras de la celda. Estas variables se calculan en el nodo de cada celda, por lo que es necesario interpolar entre estas para conocer su valor en las caras. Dicha interpolación de ϕ y ρ da lugar a los diversos esquemas de discretización lineales.

La determinación de los valores en las caras, mencionados anteriormente, es de suma importancia para la precisión y convergencia del cálculo numérico.

Los esquemas de discretización se describirán en base al sistema de celdas que se puede apreciar en la figura (B.1). Como ejemplo se obtendrá el valor de ϕ en las caras e de las celda P. En esta cara la velocidad se considera, sin pérdida de la generalidad, positiva $\mathcal{U}e > 0$.

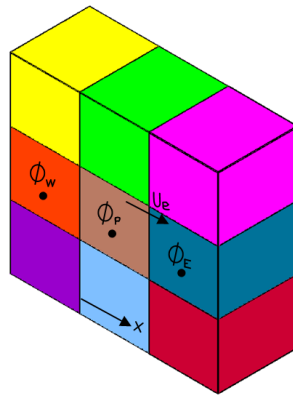


Figura 34.- esquemas lineales de discretización.

B.1 esquemas lineales de discretización.

Diferencias desplazadas de primer orden.

En este esquema se supone que el valor de la variable ϕ en la cara e es igual al valor que tiene el nodo adyacente aguas arriba, es decir, para $\mathcal{U}e > 0$.

$$\phi_e = \phi_P \quad (\text{B.1})$$

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

Diferencias centradas

Las diferencias centradas suponen la variación lineal de ϕ entre los nodos P y E ; por lo tanto el valor en la cara e es

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

La precisión que el esquema tiene es de segundo orden pero tiene el inconveniente de no estar acotado por lo que se pueden presentar inestabilidades numéricas. El límite de estabilidad de este esquema viene dado en función del número de Peclet, ecuación (3.1.3), el cual es un parámetro comparativo entre el proceso convectivo y el difusivo.

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

Híbrido

Este esquema fue introducido por Spalding, 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 está en función del número de Peclet que tenga la celda.

Si ($Pe > 2$), se usan diferencias desplazadas (B.1).

Si ($Pe \leq 2$), se usan diferencias centradas (B.2).

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

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

Apéndice C

Datos al simulador.

```
<html><head><title>Q1</title>
<link rel="stylesheet" type="text/css"
href="/phoenics/d_polis/polstyle.css">
</head><body><pre><strong>
TALK=T;RUN( 1, 1)
```

Q1 created by VDI menu, Version 2009, Date 24/09/09
CPVNAM=VDI;SPPNAM=Core

IRUNN = 1 ;LIBREF = 0

Group 1. Run Title-

TEXT(LLAMA DE METANO: EBU)

Group 2. Transience

STEADY = T

Groups 3, 4, 5 Grid Information

* Overall number of cells, RSET(M,NX,NY,NZ,tolerance)

RSET(M,120,95,128,3.92891E-06)

* Cylindrical-polar grid

CARTES=F

Group 6. Body-Fitted coordinates

* X-cyclic boundaries switched

Group 7. Variables: STOREd,SOLVEd,NAMED

* Non-default variable names

NAME(142)=EPKE

NAME(145)=PROD ;NAME(146)=OXID

NAME(147)=FUEL ;NAME(148)=RHO1

NAME(149)=TMP1 ;NAME(150)=MIXF

* Solved variables list

SOLVE(P1,U1,V1,W1,MIXF)

* Stored variables list

STORE(TMP1,RHO1,FUEL,OXID,PROD,EPKE)

STORE(VPOR)

* Additional solver options

SOLUTN(P1,Y,Y,N,N,N)

TURMOD(KEMODL)

Group 8. Terms & Devices

NEWRH1 = T

Group 9. Properties

PRESS0 =78000;

RHO1 = GRND

RHO1A =16. ;RHO1B =32.

RHO1C =28.

ENUL =1.57968E-05

CP1 = GRND10

CP1A =2223. ;CP1B =1500.

CP1C =1032.506836 ;CP1D =0.

TMP1 = GRND

TMP1A =2223. ;TMP1B =1012.506836

TMP1C =1040.00

TMP2A =0.2;TMP2B =5.0E+07

TMP2C =0.

PRT(EP)=1.314

Group 10. Inter-Phase Transfer Processes

Group 11. Initialise Var/Porosity Fields

FIINIT(P1)=1.0E+01 ;FIINIT(U1)=0.0

FIINIT(V1)=0. ;FIINIT(W1)=0.0

FIINIT(KE)=1.0E-01 ;FIINIT(EP)=1.0E-02

FIINIT(EPKE)=1.001E-10

FIINIT(PROD)=0.0 ;FIINIT(OXID)=0.0

FIINIT(FUEL)=1.0 ;FIINIT(RHO1)=0.5

FIINIT(TMP1)=300. ;FIINIT(MIXF)=1.0

No PATCHes used for this Group

INIADD = F

Group 12. Convection and diffusion adjustments

No PATCHes used for this Group

Group 13. Boundary & Special Sources

This patch is attached to object B6

INLET(META, LOW, -1, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 1)

VALUE(META, P1, 9.927)

VALUE(META, U1, 0.)

VALUE(META, V1, 0.)

COVAL(META, W1, FIXVAL, 19.790)

VALUE(META, KE, 0.1)

VALUE(META, EP, 100.)

VALUE(META, EPKE, 0.)

COVAL(META, PROD, FIXVAL, 0.)

COVAL(META, OXID, FIXVAL, 0.)

COVAL(META, FUEL, FIXVAL, 1.)

```

VALUE(META, RHO1, 0.50485)
COVAL(META, TMP1, FIXVAL, 300.)
COVAL(META, MIXF, FIXVAL, 1.0)
EGWF = T
*****

Group 14. Downstream Pressure For PARAB
*****

Group 15. Terminate Sweeps
LSWEEP = 3000
SELREF = F
*****

Group 16. Terminate Iterations
*****

Group 17. Relaxation
RELAX(P1 ,LINRLX,0.1 )
RELAX(U1 ,FALSDT,1.0E-02 )
RELAX(V1 ,FALSDT,1.0E-02 )
RELAX(W1 ,FALSDT,1.0E-02 )
RELAX(KE ,FALSDT,1.0E-03 )
RELAX(EP ,FALSDT,1.0E-03 )
RELAX(RHO1,LINRLX,1.0e-3 )
RELAX(MIXF,LINRLX,0.5 )
RELAX(TMP1,LINRLX,0.01 )
KELIN = 3
*****

Group 18. Limits
VARMAX(U1)=100. ;VARMIN(U1)=-100.
VARMAX(V1)=100. ;VARMIN(V1)=-100.
VARMAX(W1)=100. ;VARMIN(W1)=-100.
VARMAX(KE)=40. ;VARMIN(KE)=0.0001
VARMAX(EP)=5.0E+05 ;VARMIN(EP)=0.00001
VARMAX(RHO1)=10.0 ;VARMIN(RHO1)=0.00
VARMAX(TMP1)=1.0E+5 ;VARMIN(TMP1)=300.
VARMAX(MIXF)=1. ;VARMIN(MIXF)=0.0
*****

Group 19. EARTH Calls To GROUND Station
GENK = T
*****

Group 20. Preliminary Printout
*****

Group 21. Print-out of Variables
OUTPUT(P1 ,Y,Y,Y,Y,Y)
OUTPUT(V1 ,Y,Y,Y,Y,Y)
OUTPUT(W1 ,Y,Y,Y,Y,Y)
*****

Group 22. Monitor Print-Out
IXMON = 21 ;IYMON = 12 ;IZMON = 45
NPRMON = 100000
NPRMNT = 1
TSTSWP = -1

```

Group 23.Field Print-Out & Plot Control

NPRINT = 6000

NPLT = 1

ISWPRF = 1 ;ISWPRL = 100000

ITABL = 1

No PATCHes used for this Group

Group 24. Dumps For Restarts

GVIEW(P,-0.634317,-0.048462,0.771552)

GVIEW(UP,0.064061,0.991306,0.114931)

> DOM, SIZE, 1.570775E+00, 0.508000E-01, 1.500000E+00
> DOM, MONIT, 4.974121E-01, 1.719265E-02, 1.883863E-01
> DOM, SCALE, 1.000000E+00, 1.000000E+00, 1.000000E+00
> GRID, RSET_X_1, 35, 1.000000E+00
> GRID, RSET_Y_2, 35,-0.800000E+00
> GRID, RSET_Y_1, 5,1.0e+00
> GRID, RSET_Z_1, 280,-8.000000E-01

> OBJ, NAME, PLACASO
> OBJ, POSITION, 0.000000E+00, 0.008300, 0.000000E+00
> OBJ, SIZE, 1.570775E+00, 0.425000E-01, 0.000000E+00
> OBJ, GEOMETRY, polcubet
> OBJ, TYPE, PLATE

> OBJ, NAME, B6
> OBJ, POSITION, 6.991470E-01, 3.091000E-02, 0.000000E+00
> OBJ, SIZE, 5.900000E-03, 5.900000E-03, 0.000000E+00
> OBJ, DOMCLIP, NO
> OBJ, ROT-ANGLE, -4.005877E+01, 0.000000E+00, 0.000000E+00
> OBJ, GEOMETRY, cylinder
> OBJ, GRID, NO
> OBJ, TYPE, USER_DEFINED
> OBJ, PATCHES, META

> OBJ, NAME, ENTRADA
> OBJ, POSITION, 0.000000E+00, 0.000000E+00, 0.000000E+00
> OBJ, SIZE, 1.570775E+00, 8.300000E-03, 0.000000E+00
> OBJ, GEOMETRY, polcu5t
> OBJ, GRID, NO
> OBJ, TYPE, INLET
> OBJ, DENSITY, 1.007
> OBJ, VELOCITY, 0.,0.,10.1
> OBJ, INLET_MIXF, 0.
> OBJ, KE_IN, 0.1
> OBJ, EP_IN, 100.0

> OBJ, NAME, SALIDA1
> OBJ, POSITION, 0.000000E+00, 0.000000E+00, 1.500000E+00
> OBJ, SIZE, 1.570775E+0, 0.508000E-01, 0.000000E+00
> OBJ, GEOMETRY, polcubet
> OBJ, VISIBLE, NO
> OBJ, TYPE, OUTLET
> OBJ, PRESSURE, 0.
> OBJ, COEFFICIENT, 1.
> OBJ, TURBULENCE, 0. ,0.

> OBJ, NAME, SALIDA2
> OBJ, POSITION, 0.000000E+00, 0.508000E-01, 0.000000E+00
> OBJ, SIZE, 1.570775E+00, 0.000000E+00, 1.5E+00
> OBJ, GEOMETRY, polcubet
> OBJ, TYPE, PLATE
 > OBJ, GEOMETRY, polcubet
 > OBJ, TYPE, USER_DEFINED
 > OBJ, PATCHES, ENTRAIT

STOP

</pre></body></html>

Glosario

$UHCs$(Uburned hydrocarbons) hidrocarburos no quemados.
SCRS.....(Simple Chemical Reaction System) sistema simple de reacción química.
Yfracción molar.
ϕ_zfracción de mezcla.
C_{EBU}constante EBU.
\tilde{Y}_i''varianza de Favre de la fracción másica del combustible.
\dot{w}_fvelocidad de mezcla.
scoeficiente estequiométrico de reacción.
\tilde{Y}fracción másica.
Renúmero adimensional de Reynolds.
Kanúmero adimensional de Karlovits.
Danúmero adimensional de Damköler.
u'intensidad de la turbulencia.
Lescala integral.
s_lvelocidad de llama laminar.
φespesor del frente de llama laminar.
Lenúmero dimensional de Lewis.
Mmasa.
ρdensidad.
Vvolumen.
\vec{V}velocidad.
\vec{F}fuerza.
aaceleración.
\vec{F}_sfuerzas de superficie.
\vec{F}_mfuerzas másicas.
\vec{T}tensor de esfuerzos.
$\vec{\tau}$esfuerzo viscoso.
$\vec{\delta}$delta de Kronecker.
μviscosidad molecular del fluido.
μ_vviscosidad volumétrica.
\dot{Q}calor.
\dot{W}_ktrabajo.
eenergía almacenada.
\mathcal{V}^2velocidad de la masa puntual.
ggravedad.
Ppresión.
\tilde{V}volumen específico.
\dot{W}_ftrabajo de flujo.
\dot{W}_vtrabajo viscoso.
$\vec{\tau}_{ij}$tensor de esfuerzos viscosos.
Φdisipación viscosa.
\dot{W}_strabajo de flecha.

κ	conductividad térmica.
T	temperatura.
h	entalpía.
C_p	calor específico.
r_A	tasa de reacción (EBU).
\mathcal{R}_u	constante universal de los gases ideales.
$\Delta h_{f,i}^\circ$	energía de formación.
\vec{J}_A	flujo difusivo.
D_A^M	coeficiente medio de difusión.
D_{AB}	coeficiente de difusión binario.
Pr	número adimensional de Prandtl.
Sc	número adimensional de Schmidt.
λ	conductividad térmica.
ν	viscosidad cinemática.
$\bar{\Phi}$	promedio de Reynolds.
$\tilde{\Phi}$	promedio de Favre.
$\tilde{\phi}$	variable independiente.
Γ_ϕ	coeficiente de difusión.
\bar{S}_ϕ	término fuente.
I	celdas vecinas.
τ	valor del intervalo temporal anterior.
β	término fuente para un nodo.
\tilde{u}_i	velocidad promedio.
δ_i	distancia entre los nodos.
Pe	número dimensional de Peclet.
F	efecto del término convectivo.
D	efecto del término difusivo.
Δ_i	longitud de cara i .
$\bar{\rho}$	tensor de esfuerzos de Reynolds.
ν_T	viscosidad turbulenta.
Sc_T	número de Schmidt/Prandtl turbulento.
ε	tasa de disipación de energía turbulenta.

Referencias

- 1.-Brizuela E. A. y Bilger R.W., *Combustion and flame*, 1996. 104 y 208p.
- 2.- Bernard Lewis y Guenther von Elbe, *Combustion, Flames and Explosions of Gases*,academic press, 1987.
- 3.-José Ma. Desantes Fernández y Magín Lapuerta Amigó, *Fundamentos de combustión*, Universidad Politécnica de Valencia, 1998.
- 4.- Manuel Márquez Martínez, *Combustion y quemadores*, Marcombo Boixareu, Barcelona, 1989.
- 5.- I. Glassman, *Combustión*, Academic Press, San Diego, 1987, 2ª edición.
- 6.- Kenneth Kuan-yun Kuo John Wiley, *Principles of combustion*, 2005.
- 7.- Kenneth Kuan-yun Ku John Wiley o, *Fundamentals of Turbulent and Multi-Phase Combustion* 1977.
- 8.- Spalding D., *Mixing and chemical reaction in steady con_ned turbulent flames. Thirteenth symposium (international) on combustion*, The combustion institute, 1971, 649-657p.
- 9.- Magnussen B. and Hjetager B., *On the mathematical modeling of turbulent combustion with special emphasis on shoot formation and combustión*, Sixth symposium (International) on combustion, The combustion institute, 1971. 649-657p.
- 10.- Irving h. Shames ,*Mechanics of fluids*, Mc Graw Hill, 1979, 3ª edición.
- 11.- Versteeg HK y Malalasekera W., *Introducción a la dinámica de fluidos computacional*.
- 12.- I. Martinez, *Termodinámica básica y aplicada*,Dossat, 1992. 354 a393 p.
- 13.- Russell L. D. and Adebisi G. A., *Termodinámica Clásica*.Adison-Wesley Longman, México, 2000 primera edición.
- 14.- R.B.Bird, W.E. Stewart y E. Lightfoot, *Fenómenos de transporte*, Reverté, 1978.
- 15.- Joel Henry Ferziger, *Computational methods for fluids dynamics*, Springer-Verlag, 1996.
- 16.-S.V. Pantankar, *Numerical heat tranfer and fluid flow*, Hemisphere Publishing Corporation, 1980.
- 17.- Clive Fletcher, *Computational Techniques for Fluid Dynamics 1*, Springer, 1999.
- 18.- By Titus Petriila, Damian Trif, *Basics of Fluid Mechanics and Introduction to Computational Fluid Dynamics*, Springer, 2005.
- 19.- T. J. Chung, *Computational Fluid Dynamics*, Cambridge, 2002.