



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
PROGRAMA DE MAESTRÍA Y DOCTORADO EN INGENIERÍA
MAESTRIA EN DISEÑO DE ING. MECÁNICA – TERMOFLUIDOS

FORMACIÓN DE NO_x EN UNA LLAMA DE DIFUSIÓN INVERSA

TESIS
QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:
MAESTRO EN INGENIERÍA

PRESENTA:
ARMANDO TERRAZAS FUENTES

TUTOR PRINCIPAL
DR WILLIAM VICENTE Y RODRIGUEZ, INSTITUTO DE INGENIERÍA

CIUDAD DE MÉXICO, AGOSTO, 2021



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.

JURADO ASIGNADO:

Presidente: Dr. Santillán Gutiérrez Saúl Daniel

Secretario: Dr. López Parra Marcelo

1 er. Vocal: Dr. Vicente y Rodríguez William

2 do. Vocal: Dr. Ferrer Pérez Jorge Alfredo

3 er. Vocal: Dr. Ramírez Reivich Alejandro C.

Lugar o lugares donde se realizó la tesis: Unidad de Alta Tecnología, Campus Juriquilla UNAM, Querétaro.

TUTOR DE TESIS:

DR WILLIAM VICENTE Y RODRIGUEZ

Agradecimientos

Se agradece el soporte técnico proporcionado por el Ing. Fernando Maldonado Salgado del Área de servidores Unix-Linux del Instituto de Ingeniería UNAM.

Agradecimiento especial para mi familia, ya que sin ellos no estaría donde estoy.

Índice

1	Motivación.....	6
2	Introducción	7
2.1	Estado del Arte.....	9
3	Ecuaciones de gobierno	16
3.1	Fluidos compresibles e incompresibles.....	16
3.2	Ecuación de conservación de masa	16
3.3	Ecuación de conservación cantidad de movimiento.....	16
3.4	Ecuación de la conservación de la energía.....	22
3.5	Conservación de las especies químicas.....	23
3.6	Aspectos físicos de la turbulencia	25
3.7	Función de densidad de probabilidad conjunta y su ecuación de transporte.....	31
3.7.1	Cinética química	36
3.8	Ecuación de estado	37
3.9	Mecanismo global de reacción	38
3.10	Formación de NOx en la combustión.....	39
3.11	Mecanismos de formación de los NOx	41
3.12	Formación NOx térmico.....	42
3.13	Formación NOx del combustible	42
3.14	Formación de NOx súbito.....	43
3.15	Formación de NO2.....	44
3.16	Formación de N2O.....	44
3.17	Ecuaciones de Formación de NOx.....	44
4	Método de solución.....	47
4.1	Solución de la aerodinámica	47
4.2	Método de Volúmenes Finitos	49
4.3	Mallado.....	50
4.4	Método de Monte Carlo	55
4.5	Monte Carlo para la FDP.....	56
4.6	Técnica del paso fraccionado (reglas de la simulación)	57
4.7	Monte Carlo – Volumen Finito	60
5	Simulación de una llama de difusión inversa.....	61

5.1	Solución al Mecanismo global de reacción	62
5.2	Mallado.....	63
5.3	Solución al Modelado NOx.....	65
6	Resultados.....	66
7	Conclusiones y recomendaciones para trabajos futuros.....	79
8	Referencias.....	80

1 Motivación

La humanidad ha hecho uso de los combustibles fósiles como fuente de energía desde el descubrimiento del fuego, y se ha tenido su época de apogeo desde 1859 con el primer pozo petrolero del mundo a la época actual. Debido a este auge se ha llevado a una mayor cantidad de contaminaciones al medio ambiente, generando problemas ambientales como la disminución de la capa de ozono, los efectos de los gases invernadero, el cambio climático global y las lluvias ácidas. En consecuencia, la comunidad científica ha buscado otras opciones para la generación de energía por medio de fuentes con menor impacto al ambiente, como lo son las fuentes de energía renovables. El uso de dichas fuentes renovables ha ido aumentando año con año gracias a progreso de estas tecnologías, pero aún no han sido capaces de soportar las grandes cantidades de demanda energética, por lo que aun la quema de combustibles fósiles es la primera fuente de energía a nivel mundial. Desde hace un par de décadas los gobiernos y las entidades internacionales se han comprometido en ir regulando de manera más estricta las emisiones contaminantes al medio ambiente producto de la generación de energía por medio del consumo de combustibles fósiles, en especial las regulaciones emitidas por el Banco Mundial (World Bank) con respecto a la regulación de Óxidos de Nitrógeno (NOx) y Óxidos de Carbono (COx).

Debido a esta necesidad de obtención de energía de forma más eficiente y con una menor concentración de emisiones contaminantes, se han realizado diversos estudios, que en conjunto con los apoyos gubernamentales son una opción económicamente viable para un desarrollo mundial sostenible.

A lo largo de los últimos años, cada país tiene su propia regulación de las emisiones permitidas y cada vez se endurecen más con respecto a los contaminantes permitidos.

Como ejemplo claro, tenemos la reciente revisión de la norma NOM-168 para la regulación de las emisiones permitidas en las plantas de generación de energía por parte de la SEMARNAT en el año 2016 después de la Reforma Energética.

2 Introducción

La combustión es toda reacción química de carácter exotérmico, la cual se produce entre el oxígeno y un material oxidable, y habitualmente, se manifiesta por incandescencia o llama. Desde el punto de vista de la teoría clásica, la combustión se refiere a las reacciones de oxidación, que se producen de forma rápida, de materiales llamados combustibles, formados fundamentalmente por carbono (C) e hidrógeno (H) y en algunos casos por azufre (S), en presencia de oxígeno, denominado el comburente y con gran desprendimiento de calor.

Para que la reacción de combustión se mantenga, son necesarios tres factores:

- **Combustible:** es cualquier material capaz de liberar energía cuando se oxida de forma violenta con desprendimiento de calor.
- **Comburente:** es cualquier sustancia que en ciertas condiciones de temperatura y presión puede combinarse con un combustible, provocando así una combustión. Actúa oxidando al combustible, y por lo tanto siendo reducido por este último.
- **Calor:** energía en tránsito que se reconoce solo cuando se cruza la frontera de un sistema termodinámico.

El proceso de combustión se realiza en tres fases:

1. En una primera fase se produce una pre-reacción en la que los hidrocarburos se descomponen para reaccionar con el oxígeno, formando unos compuestos inestables que reciben el nombre de radicales.
2. La segunda fase es la de oxidación, en la cual se libera la mayor parte del calor.
3. En la tercera se completa la oxidación y se forman los productos estables que serán los componentes de los gases de combustión.

La reacción de combustión no se produce en todos y cada uno de los puntos del sistema simultáneamente y de la misma forma. La zona reactiva (donde se sitúa la llama) se produce donde hay reactivos y es muy sensible a la temperatura.

Se pueden distinguir tres tipos de combustión

- *Combustión completa o perfecta:* Se tiene una mezcla pobre, es decir existe una mayor cantidad de aire que de combustible. Los componentes se oxidan completamente, formando dióxido de carbono (CO₂) y agua líquida (H₂O) y teniendo mezcla de aire de sobra.

- *Combustión estequiométrica¹ o neutra*: Es una combustión completa en la que se ha empleado la cantidad exacta de aire obtenida a partir de las relaciones cuantitativas de las moléculas que intervienen en cada reacción.
- *Combustión incompleta*: Se tiene una mezcla rica, es decir, existe una mayor cantidad de combustible que de aire. En este caso los gases de combustión contienen compuestos parcialmente oxidados llamados “no quemados”, como: monóxido de carbono (CO), partículas de carbono, hidrógeno, etc.

La llama es la masa gaseosa en combustión que se eleva de los cuerpos que arden y despiden luz de diversos colores (en ella se llevan proceso como el de precalentamiento de los reactantes, la ignición y la combustión). La quema de combustibles fósiles tiene una gran variedad de usos, tanto en la industria como para el uso doméstico.

Gracias al análisis y estudios científicos sobre el proceso de combustión se han identificado 3 tipos de llama con diferentes características. Es por esto que se han realizado diversos estudios para estudiar y comprender mejor el proceso de la llama, tanto la llama difusiva, como la llama de pre-mezcla.

La llama de difusión es el tipo de llama en el que el combustible y comburente se mezclan durante la combustión. El combustible está completamente rodeado por el aire. La combustión tiene lugar en una zona muy delgada, donde el combustible se encuentra con el oxígeno en la proporción estequiométrica, y entre los valores de los límites de flamabilidad pobre y rico. En el interior de la llama estequiométrica, solamente existe combustible no quemado, mientras que en el exterior solamente existe el aire.

Mientras que la llama de pre-mezcla es en la que el combustible y comburente están mezclados antes de la combustión. La zona de reacción ocurre teniendo una mezcla dentro de los límites de flamabilidad pobre y rico.

En la última década se ha comenzado a estudiar una forma de llama nombrada Llama de Difusión Inversa (IDF)², la cual consiste en un chorro central donde se inyecta oxidante y alrededor de éste se ingresa combustible a la zona en la que se realizara el proceso de combustión. Para la llama IDF existen dos tipos principales de configuración geométrica del quemador que las genera, el primero de ellos es un arreglo Coaxial (CoA) donde un chorro de oxidante se encuentra rodeado completamente por un chorro de combustible (inyectores anulares); la segunda

¹ **Estequiometria**: es el cálculo de las relaciones cuantitativas entre los reactivos y productos en el transcurso de una reacción química.

² **IDF**: Por sus siglas en inglés “Inverse Diffusive Flame”.

configuración de quemador consiste en un chorro central de aire rodeado por múltiples chorros de combustible (CAP).

2.1 Estado del Arte

Diversos estudios que han experimentado con este tipo de llama han concluido que la estructura de la llama IDF se puede considerar como una llama dual, es decir tiene ciertas características de la llama difusiva y otras más de la llama premezclada. Su comportamiento depende de la configuración del quemador y su geometría, además de las velocidades con las que son inyectados el comburente y el combustible, y la relación aire/combustible entre ambos. Otra conclusión que se ha obtenido, es que la temperatura alcanzada en llamas IDFs son superiores a las que se pueden tener en las llamas difusivas normales (NDF) y se obtienen menos residuos de la combustión como el hollín. Con respecto a la llama premezclada, la llama IDF no presenta el fenómeno de regreso del frente de llama (Flashback) lo que ayudaría a proteger a un equipo del posible daño que pueda causar este fenómeno; además, la llama generada es mucho más estable y el rango de flamabilidad es más amplio.

El estudio y experimentación con este tipo de llama se ha desarrollado recientemente. Se han podido encontrar varios artículos resultados, así como con simulación numérica de la llama de difusión inversa. A continuación, se presentan algunos de los artículos encontrados en la literatura abierta, y que son de mayor relevancia.

(Sze et al., 2006) realizaron experimentación con una llama de difusión inversa con la configuración CAP y Coaxial para comparar la apariencia, distribución de temperatura, y el índice de emisiones NO_x, utilizando como combustible Gas licuado del petróleo con una composición de 70% butano y 30% propano. El estudio se llevó a cabo en dos partes por cada configuración, en el primero se variaba el número de Reynolds del aire entre 1000 y 4500, mientras que el flujo de combustible se mantenía fijo. En el segundo, se mantenía fijo el flujo de aire mientras que el flujo de combustible se variaba para una concentración para obtener una tasa aire/combustible relativo entre 1.0 y 2.0. Se encontró que en la configuración CAP, la llama consiste en dos zonas, una zona de arrastre inferior y una zona superior de mezcla y combustión. En la configuración Coaxial se encontró que la llama es similar a la de difusión en la mayoría de los casos. La llama de dos zonas en configuración Coaxial solo se observó con un número de Reynolds mayor a 2500. La distribución de temperatura de las llamas es similar cuando se tiene una razón de equivalencia entre 1.0 y 1.2 para $Re=2500$. La temperatura de la llama es mayor en la configuración CAP. Los perfiles de temperatura obtenidos mostraron un núcleo frío en la llama cuando la longitud de ésta era pequeña y que desaparecía conforme

dicha distancia aumentaba. Concluyeron que hay una mezcla aire-combustible más intensa en la configuración CAP que en la Coaxial. En cuanto a el índice de emisiones de NO_x, se obtuvo una curva con forma de campana para ambas configuraciones con un valor máximo de 3.2 g/kg con una razón de equivalencia de 1.2 para la configuración CAP, y 3 g/kg con una razón de equivalencia relativa de 2.2 para la configuración coaxial. Se observó que la concentración de oxígeno en la línea central se puede utilizar como indicador del proceso de combustión. Esta cae a su valor mínimo entre 50-60 mm en la llama CAP, mientras que en la llama CoA el valor mínimo ocurre alrededor de los 100 mm. Esto indica que el aire y la mezcla de combustible se queman alrededor de la altura de 50 mm en la llama CAP, mientras que el mezclado está muy limitado en la llama CoA.

(Dong et al., 2007) realizaron un estudio experimental para optimizar la combustión con una llama de difusión inversa con una configuración CAP. El estudio se basó en la variación de la proporción de los diámetros de inyectores de aire y los inyectores de combustible ($d_{\text{aire}}/d_{\text{combustible}}$). Se investigaron 3 razones de aire/combustible de las anteriormente mencionadas, pequeña, moderada y grande. Los resultados mostraron que el diámetro de aire más pequeño produce una llama azul con mejores características térmicas, mayor temperatura de llama, y un rango mayor de estabilidad con respecto al número de Reynolds del aire. Por parte de las emisiones se encontró, que con un diámetro menor de aire con respecto al de combustible, se produce más productos incompletos de la combustión, como el CO y el HC, pero menos NO_x, lo cual se le atribuyó al menor volumen de zona de alta temperatura y menor tiempo de residencia de la llama. También, describen como en la zona de la base de la llama no ocurre la mezcla aire/combustible, esto debido al rápido cambio en las concentraciones de las composiciones y el incremento rápido de la temperatura de la llama. CO, CO₂ y O₂ permanecen en niveles constantes en la zona de reacción. La zona post-llama se caracteriza por la presencia entrante de aire que rodea a la llama, lo cual convierte el CO de la zona de reacción a CO₂. El pico de temperatura de llama, de más de 1900 K, está en la zona de reacción y la zona de reacción post-llama e indica que el mecanismo de térmico de NO es sobresaliente. El índice EINO_x, que mide las concentraciones de los NO_x, incrementa al incrementar la razón de equivalencia debido al incremento en la temperatura de llama (T_f) y el incremento en el tiempo de residencia de las altas temperaturas prolongadas en la reacción post-llama. El EINO_x decrece con mayor incremento de la razón de equivalencia equivalente debido a la disminución de la temperatura de llama. La estructura dual, azul y de triple capa de las IDFs producen más NO_x que los flujos laminares parciales de metano/aire en una llama de pre-mezcla, pero produce menos que una llama turbulenta parcial de metano/aire en llama de premezcla cuando la razón equivalente es menor de 1.4 y mucho menos NO_x que las llamas amarillas de las IDFs.

(Dong et al., 2007) Para la segunda parte de su estudio, utilizaron el mismo concepto, pero variaron la razón de equivalencia, el número de Reynolds del aire y el combustible, y la razón entre el volumen del aire y el volumen del combustible. Los resultados demostraron que con el quemador con un d_{aire} más pequeño se puede producir una llama estable azul de IDF con un mayor rango al variar el Re del aire, esto debido al decremento de la mezcla aire/combustible inducida a la turbulencia en el cuello de la llama, y además un mayor rango de razón de equivalencia con el mismo rango de flujo del aire debido a un arrastre más fuerte del aire cubriendo la región post-llama. Ellos descubrieron además que no hay mezcla de aire/combustible en la zona de la base de la llama.

(Kashir et al., 2015) realizaron una simulación numérica para conocer el impacto de concentraciones de hidrogeno en una llama de difusión inversa. Basaron su simulación a partir de la técnica de simulación de Grandes Escalas "Large Eddy simulation" (LES), aplicada a un quemador con llama de difusión inversa con un combustible de metano licuado y concentraciones de 30% y 80% de H_2 . El quemador tiene dos números de giro de 0.667 y 1.33 que son aplicados en el inyector central de aire, esto significa que el momento que se le aplica al aire para mejorar la premezcla es casi el doble con respecto al otro. Se demostró, además, que los resultados utilizando LES son mejores computacionalmente en comparación con el modelo "Unsteady Reynolds Averaged Simulation" (URAS). Los resultados mostraron que la longitud de penetración del inyector es reducida con el aumento en la concentración de hidrogeno, lo que conlleva un decremento en la longitud de llama, también. Otro hallazgo, es que el eje mayor de los vórtices estructurales se alinea con el flujo direccional, es decir, los vórtices se aplanan y el tamaño lateral de la región de mezcla se reduce. En cuanto a emisiones, se encontró que hubo un descenso notable en la fracción másica del monóxido de carbono al aumentar el hidrogeno.

(Zhen et al., 2011) realizaron un estudio experimental para investigar los efectos de la longitud en los inyectores con respecto a las emisiones contaminantes y el comportamiento de la radiación de ruido utilizando un Multi Inyector de combustible para una llama de Difusión Inversa (MIDF). Se utilizaron 2 quemadores MIDF, uno con un inyector largo y el otro con un inyector corto, operando con las mismas condiciones de aire y combustible. Los resultados mostraron diferencias significativas en cuanto a la apariencia de la llama, la temperatura central de la misma, las concentraciones de monóxido y dióxido de carbono y su radiación de ruido. El inyector corto produce una llama con menor altura y un núcleo potencial más pequeño debido a la mezcla mejorada de aire/combustible. También, conduce a una combustión completa y más rápida en el cono de la reacción interna debido a la mezcla aire/combustible que es más fuerte y rápida. La longitud de los inyectores

afecta las concentraciones de CO y CO₂, se obtienen mayores picos con los inyectores cortos, lo cual confirma que la combustión es más rápida y más completa con la llama de los inyectores cortos. La intensidad del ruido de la radiación en la llama varía con la altura de la llama. La de mayor intensidad se encuentra en el cono de reacción interno, mientras que la más débil en las partes baja y alta de la llama. El ruido de radiación más alta es el resultado del incremento de los componentes de ruido de baja frecuencia, lo que conlleva una mayor fluctuación en la razón de liberación de calor asociado a la llama de los inyectores largos.

(Miao et al., 2016) presentaron los resultados del estudio experimental respecto a las características en la transferencia de calor en una llama de difusión inversa en contacto en la parte superior con una placa horizontal de cobre. Se utiliza una configuración CAP con un inyector central de aire y 12 inyectores de combustible alrededor. El flujo de calor en el punto de estancamiento y la distribución radial del flujo de calor fueron medidos con un sensor. Para el estudio se varió el número de Reynolds, la razón de equivalencia y la distancia del inyector a la placa. El área promedio del flujo de calor se calculó a partir del flujo de calor radial dentro de una distancia radial de 50 mm del punto de estancamiento de la llama, con un número de Reynolds variando entre 2000, 2500 y 3000 para razón de equivalencia de 0.8-1.8. Como resultado se obtuvo que para una razón de equivalencia de 1.2 o mayor, el área promedio de flujo de calor incrementa al incrementar el número de Reynolds o la razón de equivalencia, mientras que la eficiencia de transferencia de calor decrece al incrementar estos dos parámetros. La mayor eficiencia de transferencia de calor ocurrió con un número de Reynolds para el aire de 2000 y una razón de equivalencia de 1.2. Con razones de equivalencia menores, la eficiencia de transferencia de calor incrementa al decrecer la razón de equivalencia. Se realizaron experimentos similares, pero con una llama de pre-mezcla y se concluyó que la eficiencia de transferencia de calor es equiparable o incluso mejor en la llama de IDF que en la de pre-mezcla.

(Elbaz y Roberts, 2014) experimentaron con una llama de difusión inversa (IDF) con un arreglo circunferencial con inyectores de combustible metano, al cual tomaron imágenes de alta velocidad a 10kHz y mediciones con 2D PIV a lo largo de la longitud completa de la llama. Se mantuvo fijo el flujo de combustible, mientras se varió el Re del aire del inyector central en 4 diferentes rangos de velocidad. Se observó una estructura de doble llama compuesta entre una región baja con arrastre de combustible, y una zona alta con intensa mezcla de combustión. Los resultados mostraron que incrementando la razón de velocidad del combustible incrementa el arrastre de combustible hacia el inyector de aire, mejorando la mezcla entre el aire y el combustible. Gracias a las imágenes tomadas, se encontraron 3 tipos de estructura en las llamas IDF: "Breaks, Closures & Growing Kernels". En las primeras

velocidades, los breaks ocurren en las regiones altas en contrapeso con las Closures. Las llamas Growing kernels se encuentran justo antes de la fusión de la región OH. Al incrementar las velocidades, también se incrementan las llamas Growing Kernels en la zona axial baja de la salida del inyector. En toda la longitud de la llama, el principal eje de velocidad de deformación compresiva exhibe una orientación preferida de alrededor de 45° con respecto a la dirección del flujo. En relación con la observación, es que la reacción no tiende a alinearse normal a la dirección del eje de velocidad de deformación de compresión máxima, que es diferente de lo que se ha observado en la parte de la punta de las llamas de Difusión normal.

(Kaplan y Kailasanath, 2001) realizaron una simulación numérica de una llama de difusión inversa y una llama de difusión para comparar los efectos de la configuración del campo de flujo en las características del hollín. Ambas llamas son en régimen laminar, con un quemador coaxial, y de combustible utilizaron metano. Se utilizaron tres diferentes relaciones de velocidad de aire con el combustible. El modelo numérico resuelve las ecuaciones de Navier-Stokes, acoplado con submodelos para la formación de hollín y la transferencia térmica radial mediante un esquema de reacciones químicas reducidas "Skeletal" que toma encuentra 16 especies químicas y 35 reacciones (con una velocidad de reacción tipo Arrhenius). Los resultados se compararon con un trabajo experimental anterior y se concluyó que son aceptables ya que la variación es menor del 10% para la concentración de especies y temperaturas. Como resultados obtenidos, se concluye que las IDF generan menor hollín que las llamas de difusión, y la formación de hollín es directamente proporcional a la relación de velocidad de aire/combustible.

(Dong et al., 2007) realizó una investigación experimental para determinar la factibilidad de utilizar es una llama para calentamiento por contacto. la cual es una llama de difusión inversa (IDF) en un arreglo con compuertas circundantes (CAP), en el cual se proporciona aire por el inyector central con un diámetro de 4, 6, y 9 mm y gas butano por el arreglo de los inyectores circundantes. La razón de equivalencia es de 1.4, el flujo volumétrico del aire es de 4.9 [l/min], mientras que el flujo volumétrico del butano es de 0.17 [l/min]. Se van a estudiar 3 razones entre el volumen del aire y el volumen del butano 116, 50 y 20. El experimento busca encontrar la estructura IDF más favorable para el calentamiento por contacto. Se estudiaron 7 estructuras de IDF. Se identifica que la estructura térmica de IDF se puede dividir en cuatro zonas, las cuales son la base de la llama, que es fría y no presenta reacción química; la zona de mezcla, la cual incluye el cuello de la llama, donde la mezcla de aire/combustible es completa; la zona de combustión, la cual se refiere al cono interno y la zona post-llama. La zona post-llama se caracteriza por tener una reacción química en la etapa temprana y dilución de aire en la posterior.

También se encontró que la IDF se auto-estabiliza en un rango amplio de valores para número de Reynolds del aire y la razón de equivalencia. En cuanto a emisiones, la formación de CO decrece cuando incrementa la razón de equivalencia mientras que para la formación de NOx incrementa concordantemente. Los valores de NOx presentes en el quemador IDF son comparables con las llamas de premezcla. En cuanto a la tasa de transferencia de calor se concluyó, que en una llama IDF es mucho mayor a la que se tiene en una llama premezclada debido a la turbulencia que se presenta en el cuello de la llama.

Planteamiento del Problema

Se han realizado simulaciones numéricas bidimensionalmente para llamas laminares y quemadores de configuración coaxial. Sin embargo, aún no se ha realizado el análisis y simulación numérica para la formación de NOx por parte de una (IDF)³ con flujo turbulento. Esto se debe a la complejidad de la aerodinámica de la llama y la dificultad de representar el fenómeno de combustión turbulenta.

En un trabajo anterior se llevó a cabo la simulación numérica para representar la IDF con flujo turbulento como parte de una tesis para doctorado en la UNAM. El presente trabajo tomará como base dicho estudio, y se concentrará en la formación de NOx.

Objetivo

Analizar numéricamente la formación de NOx en una llama de difusión inversa turbulenta.

Objetivos Específicos

Implementar un modelo numérico que represente adecuadamente la interacción entre la cinética química y la turbulencia en la llama de difusión inversa difusiva turbulenta.

Validar el modelo numérico mediante datos experimentales de temperatura.

Establecer y programar un modelo formación y destrucción de NOx en una llama de difusión inversa turbulenta.

La llama a simular es la estudiada experimentalmente por (Dong et al., 2007). Este tipo de llama es una llama de difusión inversa (IDF) con un arreglo de compuestas circundantes (CAP) como se ilustra en la Figura 1.

³ **IDF**: Por sus siglas en inglés "Inverse Diffusive Flame".

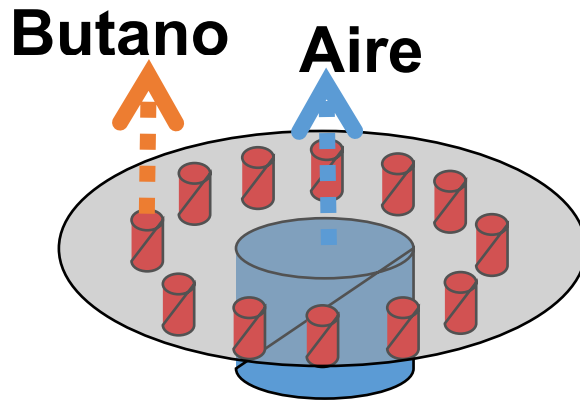


Figura 1: Sistema de combustión CAP experimentado por (Dong et al., 2007).

El diámetro del inyector central de aire es de 6 mm con un Reynolds de 8000. Alrededor de éste, tiene un arreglo de 12 inyectores con un diámetro de 2.4 mm, los cuales inyectan combustible Butano con un Reynolds de 475.5. La distancia entre el inyector central de aire y el centro de cada inyector de butano es de 8 mm ilustrado en Figura 2. Se tiene además una razón equivalente⁴ de 1.8.

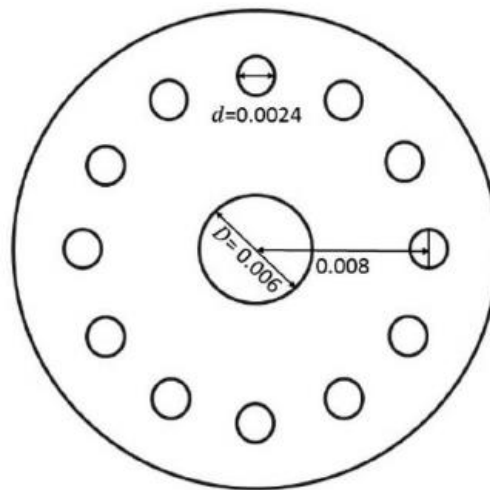


Figura 2: Dimensiones quemador CAP por (Dong et al., 2007).

⁴ **Razón Equivalente**: definido como: [razón volumétrica usada para la llama de butano/aire] / [razón volumétrica estequiométrica de butano/aire].

3 Ecuaciones de gobierno

A continuación, se presentan las ecuaciones que gobiernan el movimiento del fluido reactivo dentro de una llama de difusión inversa, es decir, conservación de masa, cantidad de movimiento y energía. Hay que considerar que el flujo es turbulento y la geometría es multidimensional. Primeramente, se presentan las ecuaciones (instantáneas) que gobiernan el flujo y después, dada la naturaleza del flujo que es turbulento, la alternativa utilizada en esta tesis, la de Ecuaciones Promediadas es introducida en la segunda parte. Las ecuaciones de conservación se presentan para un sistema de coordenadas cartesiano.

3.1 Fluidos compresibles e incompresibles

Aquellos flujos donde las variaciones en densidad son insignificantes o bien si el fluido tiene una densidad aproximadamente constante se denominan *incompresibles*; cuando las variaciones en densidad dentro de un flujo no se pueden despreciar, se llaman *compresibles*.

3.2 Ecuación de conservación de masa

La ecuación de conservación de masa se puede expresar como:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla(\rho \vec{v}) = 0 \quad (3.1)$$

donde ρ y v , son respectivamente la densidad y la velocidad instantánea de la mezcla de reacción.

3.3 Ecuación de conservación cantidad de movimiento

Con la aplicación del teorema de transporte de Reynolds, se tiene la expresión general para conservar la cantidad de movimiento lineal cuando se aplica a un volumen de control:

$$\sum \vec{F} = \int_{VC} \rho \vec{g} dV + \int_{SC} \sigma_{ij} \cdot \vec{n} dA = \int_{VC} \frac{\partial}{\partial t} (\rho \vec{V}) dV + \int_{VC} (\rho \vec{V}) \vec{V} \cdot \vec{n} dA \quad (3.2)$$

donde σ_{ij} es el tensor de esfuerzo. La ecuación (3.2) se aplica a volúmenes de control fijos y en movimiento, siempre que \vec{V} sea la velocidad absoluta (vista desde un observador fijo).

Para generar una ecuación diferencial para la conservación de cantidad de movimiento lineal, se hace la suposición que el volumen de control disminuye a tamaño infinitesimal. En el límite, todo el volumen de control disminuye a un punto en el flujo.

Una forma más general del teorema de divergencia se aplica no sólo a vectores, sino también a otras cantidades, como los tensores:

Teorema de divergencia extendido:

$$\int_{Vol} \vec{\nabla} \cdot G_{ij} dV = \oint_A G_{ij} \cdot \vec{n} dA \quad (3.3)$$

Específicamente, si en el teorema de divergencia extendido en la ecuación (3.3) G_{ij} se sustituye con la cantidad $(\rho \vec{V}) \vec{V}$, un tensor de segundo orden, el último término en la ecuación (3.2) se convierte en:

$$\int_{SC} (\rho \vec{V}) \vec{V} \cdot \vec{n} dA = \int_{VC} \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{V} \vec{V}) dV \quad (3.4)$$

donde $\vec{V} \vec{V}$ es un producto vectorial llamado producto exterior (producto tensorial de dos vectores) del vector de velocidad consigo mismo. De manera similar, si en la ecuación (3.2) se sustituye con el tensor de esfuerzo σ_{ij} , el segundo término en el lado izquierdo de la ecuación (3.4) se convierte en:

$$\int_{SC} \sigma_{ij} \cdot \vec{n} dA = \int_{VC} \vec{\nabla} \cdot \sigma_{ij} dV \quad (3.5)$$

Por lo tanto, las dos integrales de superficie de la ecuación (3.5) se convierten en integrales de volumen, cuando se aplican las ecuaciones (3.3) y (3.4). Si se combinan y reordenan términos de las ecuaciones anteriores, la ecuación (3.2) se reescribe como:

$$\int_{VC} \left[\frac{\partial}{\partial t} (\rho \vec{V}) + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{V} \vec{V}) - \rho \vec{g} - \vec{\nabla} \cdot \sigma_{ij} \right] dV = 0 \quad (3.6)$$

Para finalizar, se afirma que la ecuación (3.6) es válida para cualquier volumen de control sin importar su tamaño o forma. Esto es posible sólo si el integrando es idénticamente cero. En consecuencia, se tiene una ecuación diferencial general para la conservación de cantidad de movimiento lineal, conocida como ecuación de Cauchy:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \vec{V}) + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{V} \vec{V}) = \rho \vec{g} + \vec{\nabla} \cdot \sigma_{ij} \quad (3.7)$$

Cuando se aplica la regla de la derivada del producto al primer término del lado izquierdo de la ecuación (3.7) se obtiene:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \vec{V}) = \rho \frac{\partial \vec{V}}{\partial t} + \vec{V} \frac{\partial \rho}{\partial t} \quad (3.8)$$

El segundo término de la ecuación (3.7) se puede escribir como:

$$\vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{V} \vec{V}) = \vec{V} \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{V}) + \rho (\vec{V} \cdot \vec{\nabla}) \vec{V} \quad (3.9)$$

Por lo tanto, se eliminó el tensor de segundo orden representado por $\vec{V} \vec{V}$. Después de cierto reordenamiento, la sustitución de las ecuaciones (3.8) y (3.9) en la ecuación (3.7) produce:

$$\rho \frac{\partial \vec{V}}{\partial t} + \vec{V} \left[\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{V}) \right] + \rho (\vec{V} \cdot \vec{\nabla}) \vec{V} = \rho \vec{g} + \vec{\nabla} \cdot \sigma_{ij} \quad (3.10)$$

En la ecuación (3.10), la expresión en corchetes en esta ecuación es idénticamente cero por la ecuación de continuidad, ecuación (3.1). Cuando se combinan los dos términos restantes en el lado izquierdo, se escribe:

Forma alternativa de la ecuación de Cauchy:

$$\rho \left[\frac{\partial \vec{V}}{\partial t} + (\vec{V} \cdot \nabla) \vec{V} \right] = \rho \frac{D\vec{V}}{Dt} = \rho \vec{g} + \vec{\nabla} \cdot \sigma_{ij} \quad (3.11)$$

En coordenadas cartesianas, las tres componentes de la ecuación de Cauchy son:

$$\text{Componente } x: \rho \frac{Du}{Dt} = \rho g_x + \frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{zx}}{\partial z} \quad (3.11a)$$

$$\text{Componente } y: \rho \frac{Dv}{Dt} = \rho g_y + \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{zy}}{\partial z} \quad (3.11b)$$

$$\text{Componente } z: \rho \frac{Dw}{Dt} = \rho g_z + \frac{\partial \sigma_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{yz}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{zz}}{\partial z} \quad (3.11c)$$

Para obtener las ecuaciones de Navier-Stokes, se debe expresar el tensor de esfuerzos σ_{ij} en términos de las incógnitas primarias, es decir, densidad, presión y velocidad.

Esto se puede realizar mediante las ecuaciones constitutivas que nos permiten escribir las componentes del tensor de esfuerzo en términos del campo de velocidad y del campo de presión.

La primera acción que se hace es separar los esfuerzos de presión y los esfuerzos viscosos. Cuando un fluido se mueve, la presión actúa hacia dentro normal, pero también pueden existir esfuerzos viscosos. La ecuación (3.11) se generaliza para fluidos en movimiento como:

$$\sigma_{ij} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -P & 0 & 0 \\ 0 & -P & 0 \\ 0 & 0 & -P \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \tau_{xx} & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{yx} & \tau_{yy} & \tau_{yz} \\ \tau_{zx} & \tau_{zy} & \tau_{zz} \end{pmatrix} \quad (3.12)$$

donde se introduce un nuevo tensor, τ_{ij} , llamado tensor de esfuerzo viscoso.

Este estudio se concentra para fluidos newtonianos, que se definen como los fluidos para los que el esfuerzo de corte es linealmente proporcional a la razón de deformación por corte; donde por definición el tensor de esfuerzo es linealmente proporcional al tensor de razón de deformación. Se supone un flujo incompresible (ρ =constante). Adicionalmente, la viscosidad dinámica μ (viscosidad cinemática ν) se supone constante. Con dichas suposiciones se puede demostrar que el tensor de esfuerzo viscoso se reduce a un tensor de esfuerzo viscoso para un fluido newtoniano incompresible con propiedades constantes:

$$\tau_{ij} = 2\mu\varepsilon_{ij}\delta_{ij} \quad (3.13)$$

donde ε_{ij} es el tensor de razón de deformación. La ecuación (3.13) muestra que el esfuerzo es linealmente proporcional a la deformación. En coordenadas cartesianas, se mencionan las nueve componentes del tensor de esfuerzo viscoso, seis de las cuales son independientes debido a simetría:

$$\tau_{ij} = \begin{pmatrix} \tau_{xx} & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{yx} & \tau_{yy} & \tau_{yz} \\ \tau_{zx} & \tau_{zy} & \tau_{zz} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2\mu\frac{\partial u}{\partial x} & \mu\left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x}\right) & \mu\left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x}\right) \\ \mu\left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y}\right) & 2\mu\frac{\partial v}{\partial y} & \mu\left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y}\right) \\ \mu\left(\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z}\right) & \mu\left(\frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z}\right) & 2\mu\frac{\partial w}{\partial z} \end{pmatrix} \quad (3.14)$$

En coordenadas cartesianas, el tensor de esfuerzo de la ecuación (3.14) se convierte por lo tanto en:

$$\sigma_{ij} = \begin{pmatrix} -P & 0 & 0 \\ 0 & -P & 0 \\ 0 & 0 & -P \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 2\mu\frac{\partial u}{\partial x} & \mu\left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x}\right) & \mu\left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x}\right) \\ \mu\left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y}\right) & 2\mu\frac{\partial v}{\partial y} & \mu\left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y}\right) \\ \mu\left(\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z}\right) & \mu\left(\frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z}\right) & 2\mu\frac{\partial w}{\partial z} \end{pmatrix} \quad (3.15)$$

Ahora, se sustituye la ecuación (3.15) en las tres componentes cartesianas de la ecuación de Cauchy. Primero, se considera la componente x. La ecuación (3.11a) se convierte en la ecuación (3.16):

$$\rho \frac{Du}{dt} = -\frac{\partial P}{\partial x} + \rho g_x + 2\mu\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\mu\left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y}\right)\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(\mu\left(\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z}\right)\right) \quad (3.16)$$

Se puede observar que, en tanto que las componentes de velocidad sean funciones suaves de x , y , y z , el orden de diferenciación es irrelevante. Después de cierto reordenamiento de los términos viscosos en la ecuación (3.16), queda:

$$\rho \frac{Du}{dt} = -\frac{\partial P}{\partial x} + \rho g_x + \mu \left[\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial w}{\partial z} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right] \quad (3.17)$$

$$\rho \frac{Du}{dt} = -\frac{\partial P}{\partial x} + \rho g_x + \mu \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right) + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right]$$

$\rho = cte$

El término entre paréntesis es cero debido a la ecuación de continuidad para un flujo incompresible. También, se identifican los últimos tres términos como el Laplaciano de la componente de velocidad u en coordenadas cartesianas. Por lo tanto, la componente x de la ecuación de cantidad de movimiento se escribe como:

$$\rho \frac{Du}{Dt} = -\frac{\partial P}{\partial x} + \rho g_x + \mu \nabla^2 u \quad (3.18a)$$

De manera similar se escriben las componentes “ y ” y “ z ” de la ecuación de cantidad de movimiento como:

$$\rho \frac{Dv}{Dt} = -\frac{\partial P}{\partial y} + \rho g_y + \mu \nabla^2 v \quad (3.18b)$$

Y

$$\rho \frac{Dw}{Dt} = -\frac{\partial P}{\partial z} + \rho g_z + \mu \nabla^2 w \quad (3.18c)$$

Para finalizar, combinamos las tres componentes en una ecuación vectorial; el resultado es la ecuación de Navier-Stokes para flujo incompresible con viscosidad constante.

Ecuación de Navier-Stokes:

$$\rho \frac{D\vec{V}}{dt} = -\vec{\nabla}P + \rho\vec{g} + \mu\nabla^2\vec{V} \quad (3.19)$$

Aunque las componentes de la ecuación (3.18) se dedujeron en coordenadas cartesianas, la forma vectorial de la ecuación (3.19) es válida en cualquier sistema coordenado ortogonal.

3.4 Ecuación de la conservación de la energía

La ecuación general de conservación de la energía se presenta a continuación:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\rho \left(u_e + \frac{|v|^2}{2} + e_p \right) \right] + \nabla \cdot \left[\rho v \left(u_e + \frac{|v|^2}{2} + e_p \right) \right] = W_V + q_T \quad (3.20)$$

donde $u_e + \frac{|v|^2}{2} + e_p = e$ es la energía total del fluido (energía interna + energía cinética + energía potencial), W_V es el trabajo viscoso y q_T es el calor total. Introduciendo la definición de la entalpía ($h=u+P/\rho$), la ecuación de continuidad, el trabajo viscoso y el calor total en la ecuación (3.20), se llega a la ecuación de la entalpía:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\rho \left(h + \frac{|v|^2}{2} + e_p \right) \right] + \nabla \cdot \left[\rho v \left(h + \frac{|v|^2}{2} + e_p \right) \right] = \nabla \cdot (\vec{\tau}' \cdot \vec{v}) - \nabla \cdot \vec{J}_e + q_r \quad (3.21)$$

donde $\nabla \cdot (\vec{\tau}' \cdot \vec{v})$ es el trabajo viscoso, $\nabla \cdot \vec{J}_e$ es el flujo difusivo de calor y q_r es el flujo de calor por radiación.

En flujos de baja velocidad, si el número de Mach (Ma) es muy bajo ($Ma \ll 1$) y, además, la energía cinética comparada con la entalpía es despreciable, el trabajo viscoso es despreciable.

Por otra parte, no se considera el flujo de calor por radiación. Aplicando las consideraciones anteriores y despreciando el término potencial de la energía total del fluido a la ecuación (3.21) se obtiene un modelo válido para fluidos Newtonianos bajo condiciones generales de flujo incompresible, viscoso y conductor de calor. Así, la ecuación de la energía queda de la siguiente manera:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) + \nabla \cdot (\rho v h) = -\nabla \cdot \vec{J}_e \quad (3.22)$$

El flujo de difusión de calor \vec{J}_e se modela mediante la Ley de Fourier:

$$\vec{J}_e = -k \nabla T \quad (3.23)$$

donde k es la conductividad térmica.

Por lo tanto, la ecuación queda de la siguiente manera.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) + \nabla \cdot (\rho v h) = -\nabla \cdot k \nabla T \quad (3.24)$$

3.5 Conservación de las especies químicas

La ecuación de conservación de las especies químicas es una extensión de la ecuación de conservación de masa, con la peculiaridad de que ahora se tiene una mezcla con multi-componentes, mismos que se pueden dejar en función de la cantidad de estos presentes en la mezcla entre la masa total, fracción másica, obteniendo una ecuación de transporte como la que se muestra a continuación:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_\alpha) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} Y_\alpha) = \nabla \cdot (\rho \Gamma_\alpha \nabla Y_\alpha) + \dot{S}_\alpha \quad (3.25)$$

siendo Y_α la fracción másica de la especie α que compone la mezcla, Γ_α es su correspondiente coeficiente de difusión molecular y \dot{S}_α la tasa de cambio de la especie química (ya sea que ésta esté siendo generada o consumida en un proceso reactivo).

Flujo Turbulento

En las secciones anteriores se detallaron las ecuaciones para describir el movimiento de un flujo de gases. Estas ecuaciones de transporte están concebidas para flujos laminares y turbulentos, cuya aplicación práctica es muy limitada. Esto

implica que las ecuaciones deben adecuarse para su utilización en el estudio de flujos turbulentos. Por ello, antes de describir la adecuación matemática de las ecuaciones de transporte se analiza a la turbulencia con la finalidad de entender la complejidad del fenómeno. De acuerdo a (Tennekes y Lumley, 1972), la turbulencia no se puede definir exactamente, sin embargo, para entenderla, se observa los efectos que este comportamiento provoca en el fluido. En su lugar, las características principales de la turbulencia definen a este fenómeno:

- Irregularidad. - los flujos son aleatorios y caóticos (aparición de fluctuaciones en las variables fluido dinámicas), lo que dificulta su análisis teórico porque el flujo está compuesto de diferentes escalas o tamaños de remolinos.
- Difusividad. - La turbulencia incrementa la transferencia de cantidad de movimiento, masa y calor por las fluctuaciones del movimiento turbulento.
- Altos números de Reynolds. - Ocasionan una inestabilidad del flujo que provoca una interacción entre los términos viscosos e inerciales no lineales de la ecuación del movimiento del fluido.
- Fluctuaciones tridimensionales en la vorticidad. - la turbulencia es rotacional y tridimensional, lo que implica que la dinámica de la vorticidad juega un papel importante en la descripción de flujo.
- Disipación. - Los flujos turbulentos son disipativos porque los esfuerzos viscosos desarrollan un trabajo de deformación con un incremento en la energía interna del fluido a expensas de la energía cinética de la turbulencia, es decir, la turbulencia necesita un suministro de energía para compensar las pérdidas viscosas.
- Continuo. - El flujo es considerado como continuo, porque las escalas turbulentas de menores dimensiones son muy grandes en comparación a las escalas moleculares.

Las características de irregularidad y sensibilidad a las condiciones iniciales confieren al flujo turbulento un carácter prácticamente aleatorio que imposibilita su cálculo mediante la integración directa de las ecuaciones de transporte. Sin embargo, los flujos turbulentos pueden manejarse en términos estadísticos donde las variables fluidas se promedian en un intervalo de tiempo suficientemente largo. Lo anterior permite que los valores medios locales obtenidos varíen de manera más suave en comparación con los valores instantáneos. Por otra parte, los valores medios son más relevantes que los instantáneos desde un punto de vista práctico porque en este enfoque son prioritarios los efectos que produce el fenómeno físico. Por lo tanto, los métodos de análisis de la turbulencia tienen un enfoque en el

promediado adecuado de las ecuaciones de transporte que presenta el inconveniente de manipular un sistema de ecuaciones no cerrado. El problema de cerrar el sistema de ecuaciones está muy lejos de ser resuelto porque requiere de conocimientos profundos de los complejos mecanismos físicos involucrados en la turbulencia.

3.6 Aspectos físicos de la turbulencia

En el desarrollo de la turbulencia, los vórtices de mayor tamaño interactúan con el flujo principal y extraen energía de él. El tamaño o escala de estos vórtices es comparable a la escala del flujo. Sin embargo, estos vórtices son inestables en sí mismos y, por efecto de los esfuerzos cortantes o de la interacción entre ellos, tienden a dividirse en vórtices más pequeños que a su vez tienden a dividirse. Este proceso de rompimiento en cascada implica que en un movimiento turbulento coexisten una gran variedad de escalas correspondientes a distintos tamaños de vórtices. Estos vórtices son arrastrados y estirados por la acción de los gradientes de velocidad del flujo medio dominante y por su interacción con los demás vórtices. Este proceso de división continúa hasta que la escala de los vórtices es tan pequeña que el número de Reynolds de los mismos no es lo suficientemente grande como para que la inestabilidad persista. Estos vórtices pequeños transforman su energía cinética en energía térmica por efecto de disipación viscosa. Al proceso completo se le denomina cascada de energía, el cual fue descrito cuantitativamente por Kolmogórov.

La gran variedad de torbellinos que existen en cualquier flujo turbulento pueden agruparse en tres escalas: macroescala, escala intermedia y microescala. La macroescala asocia a los vórtices más grandes que dependen de las condiciones de contorno del flujo y presentan un marcado carácter anisotrópico. La escala intermedia es inferior a la escala mayor, en las que todavía no existe disipación de energía. Las microescalas son las más pequeñas (existe la presencia de disipación de energía) y presentan un carácter isotrópico. Debido a que la turbulencia es extremadamente disipativa, se requiere de un suministro continuo de energía externa para mantenerla porque de otra manera la microescalas disminuyen la energía cinética del flujo y, por consiguiente, la turbulencia desaparecerá. En todas las escalas, incluso las más pequeñas, se tiene un tamaño de varios órdenes de magnitud por encima de las escalas moleculares y, por lo tanto, pueden aplicarse las ecuaciones de mecánica de fluidos para un medio continuo.

La técnica de las ecuaciones promediadas de Navier Stokes, resuelve las ecuaciones presentadas anteriormente para el flujo turbulento de la llama de difusión inversa. La técnica RANS puede entenderse con la representación gráfica

de la variación local de una propiedad Φ del fluido con el tiempo en el flujo turbulento.

En cuanto al campo de velocidades de uno u otro régimen, si en un punto de un campo de flujo se hiciera una medida del valor de una variable (por ejemplo, de la componente de la velocidad en dirección X) se obtendría que en régimen laminar ésta presenta un valor bien definido que es constante en el tiempo, si las condiciones de contorno del flujo son estacionarias o presenta una ordenada variación temporal si las condiciones de contorno varían en el tiempo. En el régimen turbulento, en cambio las variables de flujo presentan una variación temporal, aun cuando las condiciones de contorno del flujo sean estacionarias, muy rápida y aleatoria en un amplio rango de frecuencias (se han medido rangos entre 0 y 10000 Hz).

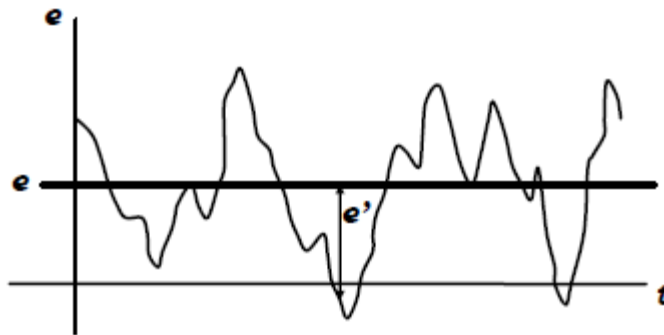


Figura 3: Modelo de Turbulencia Promedio de Reynolds

Osborne Reynolds propuso descomponer la variable e en dos componentes: una media temporal, \bar{e} , y una fluctuación en torno a la media, e' . De este modo, se puede escribir:

$$e(x_i, t) = \bar{e}(x_i) + e'(x_i, t) \quad (3.27)$$

donde el promedio temporal se define como:

$$\bar{e}(x_i) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T e(x_i, t) dt \quad (3.28)$$

De la definición, es fácil ver que se cumple:

$$\begin{aligned}\bar{e}' &= 0 \\ \bar{\bar{e}} &= \bar{e} \\ \overline{\frac{\partial e}{\partial x_i}} &= \frac{\partial \bar{e}}{\partial x_i} \\ \overline{\int e dx_i} &= \int \bar{e} dx_i\end{aligned}\tag{3.29}$$

Se considera un flujo turbulento en el que sus propiedades estadísticas no varían en el tiempo, en particular su valor medio temporal, su desviación estándar y otros momentos de orden superior.

A continuación, se mostrará el procedimiento para desarrollar el promediado de la ecuación de cantidad de movimiento para un flujo incompresible, cuya expresión instantánea es:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \nabla \cdot (u\vec{v}) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} + \nu(\nabla \cdot \nabla u)\tag{3.30a}$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + \nabla \cdot (v\vec{v}) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} + \nu(\nabla \cdot \nabla v)\tag{3.30b}$$

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \nabla \cdot (w\vec{v}) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} + \nu(\nabla \cdot \nabla w)\tag{3.30c}$$

Se inicia por descomponer la variable instantánea en la suma de su valor medio y su fluctuación ($\vec{v} = \bar{\vec{v}} + \vec{v}'$; $u = \bar{u} + u'$; $v = \bar{v} + v'$; $w = \bar{w} + w'$, $p = \bar{p} + p'$), dicha descomposición de las variables \vec{v} y p es introducida en las ecuaciones de cantidad de movimiento y continuidad, recalcando que el flujo es incompresible y estacionario se tiene la siguiente forma de la ecuaciones de continuidad:

$$\nabla \cdot \bar{\vec{v}} = 0\tag{3.31}$$

Sustituyendo el promedio y fluctuación de la velocidad en las ecuaciones (3.30) y realizando las operaciones correspondientes se obtiene:

$$\underbrace{\frac{\partial \bar{u}}{\partial t}}_I + \underbrace{\nabla \cdot (\overline{u\vec{v}})}_II + \underbrace{\nabla \cdot (\overline{u'v'})}_{III} = \underbrace{-\frac{1}{\rho} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x}}_IV + \underbrace{\nu(\nabla \cdot \nabla \bar{u})}_V \quad (3.32a)$$

$$\underbrace{\frac{\partial \bar{v}}{\partial t}}_I + \underbrace{\nabla \cdot (\overline{v\vec{v}})}_II + \underbrace{\nabla \cdot (\overline{v'v'})}_{III} = \underbrace{-\frac{1}{\rho} \frac{\partial \bar{p}}{\partial y}}_IV + \underbrace{\nu(\nabla \cdot \nabla \bar{v})}_V \quad (3.32b)$$

$$\underbrace{\frac{\partial \bar{w}}{\partial t}}_I + \underbrace{\nabla \cdot (\overline{w\vec{v}})}_II + \underbrace{\nabla \cdot (\overline{w'v'})}_{III} = \underbrace{-\frac{1}{\rho} \frac{\partial \bar{p}}{\partial z}}_IV + \underbrace{\nu(\nabla \cdot \nabla \bar{w})}_V \quad (3.32c)$$

donde el término *III*, que no aparece en las ecuaciones instantáneas, es el promedio de las fluctuaciones presentes en el flujo. A las ecuaciones anteriores se les denomina como ecuaciones de Reynolds, que se pueden reescribir de la siguiente manera

$$\frac{\partial \bar{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\overline{u\vec{v}}) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x} + \nu(\nabla \cdot \nabla \bar{u}) - \frac{\partial \overline{u'u'}}{\partial x} - \frac{\partial \overline{v'u'}}{\partial y} - \frac{\partial \overline{w'u'}}{\partial z} \quad (3.33a)$$

$$\frac{\partial \bar{v}}{\partial t} + \nabla \cdot (\overline{v\vec{v}}) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \bar{p}}{\partial y} + \nu(\nabla \cdot \nabla \bar{v}) - \frac{\partial \overline{u'v'}}{\partial x} - \frac{\partial \overline{v'v'}}{\partial y} - \frac{\partial \overline{w'v'}}{\partial z} \quad (3.33b)$$

$$\frac{\partial \bar{w}}{\partial t} + \nabla \cdot (\overline{w\vec{v}}) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \bar{p}}{\partial z} + \nu(\nabla \cdot \nabla \bar{w}) - \frac{\partial \overline{u'w'}}{\partial x} - \frac{\partial \overline{v'w'}}{\partial y} - \frac{\partial \overline{w'w'}}{\partial z} \quad (3.33c)$$

Estos nueve términos se pueden expresar en una matriz que lleva por nombre Tensor de Esfuerzos de Reynolds, que representa una relación entre las fluctuaciones que se tienen en una dirección con las fluctuaciones que se tienen en otra, y no esfuerzos en sí como su nombre lo indica.

$$\text{Tensor de Esfuerzos de Reynolds} = \begin{bmatrix} \overline{u'u'} & \overline{u'v'} & \overline{u'w'} \\ \overline{u'v'} & \overline{v'v'} & \overline{v'w'} \\ \overline{u'w'} & \overline{v'w'} & \overline{w'w'} \end{bmatrix} \quad (3.34)$$

Es importante resaltar que se considera al tensor de esfuerzos de Reynolds como un tensor simétrico por lo que ahora se tienen seis nuevas incógnitas de las cuales se deben de resolver mediante una ecuación de transporte para cada una, siendo necesario un modelo de turbulencia o cierre de las ecuaciones para disminuir el número de ecuaciones a resolver o encontrar las incógnitas de las ecuaciones.

Modelos de Viscosidad Turbulenta

Un método alternativo para determinar los esfuerzos de Reynolds son los modelos que se basan en el concepto de la existencia de una viscosidad turbulenta en la que se supone (de 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 se expresan a partir de la siguiente ecuación:

$$\bar{\rho} \widetilde{u'_i u'_j} = -\bar{\rho} \nu_T \left(\frac{\partial \widetilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \widetilde{u}_j}{\partial x_i} \right) + \frac{2}{3} \left(\bar{\rho} \kappa + \bar{\rho} \nu_T \frac{\partial \widetilde{u}_k}{\partial x_k} \right) \delta_{ij} \quad (3.35)$$

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 una característica del régimen de flujo, y puede tener variaciones significativas en diversas zonas donde se desarrolla. El transporte de, el escalar ϕ_α , es un flujo turbulento mediante el concepto de viscosidad turbulenta o propiamente difusividad turbulenta se expresa como:

$$\bar{\rho} \widetilde{u'_i \phi'_\alpha} = -\bar{\rho} \frac{\nu_T}{S_{C_T}} \frac{\partial \widetilde{\phi}_\alpha}{\partial x_j} \quad (3.36)$$

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

La viscosidad turbulenta puede calcularse de diversas formas, dando lugar a una variedad de modelos en los cuales dicha viscosidad se pone en función de una o más variables. Entre los modelos más usados se encuentran los de la familia $\kappa - \varepsilon$

Modelo $\kappa - \varepsilon$

El modelo $\kappa - \varepsilon$ es ampliamente utilizado en análisis de combustión turbulenta en los últimos años, y ha sido extensamente validado para un rango amplio de flujos. Es especialmente importante mencionar el hecho de que este modelo simula la

turbulencia del inyector redondo, esto significa que predice la tasa de propagación para inyectores axisimétricos, así como para inyectores planos (Jiang et al., 2006).

En este modelo la viscosidad turbulenta es puesta en función de dos nuevas variables κ y ϵ , cuya evolución es descrita mediante ecuaciones de transporte; la ecuación de transporte correspondiente a κ se muestra a continuación (Oro, 2012):

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho \kappa}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \kappa \bar{u}_i) &= -\nabla \cdot (-\overline{\rho u_i}) + \nabla \cdot (2\mu \overline{u'_i e'_{ij}}) \\ &- \nabla \cdot \rho \frac{1}{2} (\overline{u'_i \cdot u'_i u'_j}) - 2\mu \overline{e'_{ij} \cdot e'_{ij}} - \rho \overline{u'_i u'_j} \cdot E_{ij} \end{aligned} \quad (3.37)$$

donde $e_{ij} = E_{ij} + e'_{ij}$; por ejemplo:

$$e_{xx} = \frac{\partial \bar{u}}{\partial x} + \frac{\partial u'}{\partial x}; \quad e_{xy} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial y} + \frac{\partial \bar{v}}{\partial x} \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u'}{\partial y} + \frac{\partial v'}{\partial x} \right)$$

El cuarto término de la ecuación (3.37) 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 el tercer, quinto y séptimo término, esto se debe al transporte de la propiedad que se tiene en un punto del flujo y sus vecinos. El término $\epsilon = 2\nu \overline{e'_{ij} e'_{ij}}$ es conocido como la tasa de disipación de energía cinética turbulenta y es el término con mayor peso en la ecuación (3.37).

Se puede establecer una ecuación de transporte para ϵ y sustituir en la ecuación de transporte de κ el término $2\nu \overline{e'_{ij} e'_{ij}}$ por ϵ , teniendo como resultado las ecuaciones:

$$\frac{\partial \rho \kappa}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \kappa \bar{u}_i) = -\nabla \cdot \left(\frac{\mu_T}{\sigma_\kappa} \nabla \kappa \right) + 2\mu_T E_{ij} \cdot E_{ij} - \rho \epsilon \quad (3.38)$$

$$\frac{\partial \rho \epsilon}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \epsilon \bar{u}_i) = \nabla \cdot \left(\frac{\mu_T}{\sigma_\epsilon} \nabla \epsilon \right) + C_{1\epsilon} \frac{\epsilon}{\kappa} 2\mu_T E_{ij} \cdot E_{ij} - C_{1\epsilon} \rho \frac{\epsilon^2}{\kappa} \quad (3.39)$$

Además, se puede usar estas variables para definir características del flujo como una escala de velocidades, la longitud característica y la viscosidad turbulenta:

$$v = \kappa^{\frac{1}{2}}; \quad l = \frac{\kappa^{\frac{3}{2}}}{\epsilon}; \quad \mu_T = \rho C_\mu \frac{\kappa^2}{\epsilon} \quad (3.40)$$

Las ecuaciones (3.38) y (3.39) contienen cinco incógnitas ajustables; para todas ellas el modelo $\kappa - \varepsilon$ utiliza valores obtenidos mediante ajustes para un amplio rango de flujos turbulentos (Yakhot et al., 1981).

En los flujos reactivos con densidad variable ponderar la densidad resulta de gran ventaja teórica y práctica, por lo que también es necesario expresar la ecuación (3.46) en términos de promediado.

3.7 Función de densidad de probabilidad conjunta y su ecuación de transporte

Una función de densidad de probabilidad describe la posibilidad de que una variable aleatoria tome un valor de un espacio muestral (el cual puede ser una característica de algún fenómeno de interés). Cuando en el fenómeno en estudio intervienen más de una variable aleatoria es necesario conocer el comportamiento probabilístico en conjunto de dichas variables, comportamiento que es descrito mediante funciones de densidad de probabilidad conjuntas (FDP). Estas funciones de densidad pueden ser usadas en el desarrollo de un modelo para flujos turbulentos, como es el caso de la combustión turbulenta, en la que se tiene que modelar a las variables termoquímicas (especies químicas, etc.) por medio de un conjunto, $\alpha \geq 1$, de variables aleatorias, $\phi = \{\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_\alpha\}$, las cuales pertenecen a un conjunto de espacios muestrales $\psi = \{\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_\alpha\}$. Estas variables se encuentran definidas en un espacio x_0 y un tiempo particular t_0 . Con lo anteriormente mencionado, se puede definir a la función de densidad de probabilidad conjunta $P(\underline{\psi}; \underline{x}, t)$ en una posición y un tiempo dado como la densidad de probabilidad del evento $\underline{\phi}(\underline{x}, t) = \underline{\psi}$ y que se encuentra en función de las variables termoquímicas ϕ_α , Figura 4.

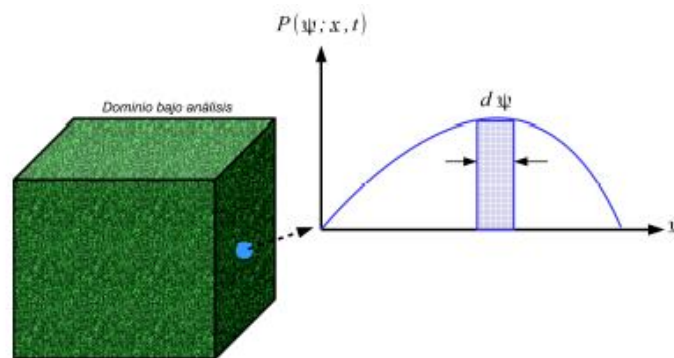


Figura 4: Función de probabilidad de densidad (FDP) en un punto y tiempo determinado de un dominio bajo análisis

Esta FDP conjunta tiene tres propiedades fundamentales (Pope, 1985), la primera de ellas plantea que la probabilidad de que se presente un evento es siempre positiva, $P(\underline{\psi}; \underline{x}, t) \geq 0$. Prosiguiendo, con que la máxima probabilidad de un evento se presente de $-\infty$ a ∞ es igual a la unidad:

$$\int_{-\infty}^{\infty} P(\underline{\psi}; \underline{x}, t) d\psi = 1 \quad (3.53)$$

Por último, si Q es una función de $\underline{\phi}$, $Q(\underline{\phi})$, y la FDP es conocida, entonces el valor esperado, o media de la función, $\langle Q \rangle$, puede ser conocida mediante la expresión:

$$\langle Q(\underline{\phi}) \rangle = \int P(\underline{\psi}; \underline{x}, t) Q(\underline{\psi}; \underline{x}, t) d\psi \quad (3.54)$$

Con el uso de esta última propiedad se puede obtener los valores medios de la tasa de reacción química y la densidad con las siguientes ecuaciones:

$$\langle S(\underline{\phi}) \rangle = \int P(\underline{\psi}; \underline{x}, t) S(\underline{\psi}; \underline{x}, t) d\psi \quad (3.55a)$$

$$\langle \rho(\underline{\phi}) \rangle = \int P(\underline{\psi}; \underline{x}, t) \rho(\underline{\psi}; \underline{x}, t) d\psi \quad (3.55b)$$

Para poder calcular los valores medios de las variables involucradas en el proceso es necesario conocer la forma de la FDP, esta forma puede ser calculada por medio de uno de los momentos de la FDP, para hacer esto es necesario suponer que la función tiene una forma determinada; sin embargo, cuando se tiene un conjunto de variables aleatorias interdependientes, construir la FDP multidimensional es muy difícil, además de que para hacer esto se supone la independencia estadística entre dichas variables aleatorias, suponiendo que para un proceso de combustión con múltiples componentes es un error ya que las especies químicas así como la energía liberada en éste son estadísticamente dependientes.

Debido a esto se ha desarrollado una técnica la cual hace que las FDP evolucione por medio de una ecuación de transporte para un sistema en el que intervienen más de un escalar (Pope, 1985). En este método se considera que la probabilidad conjunta de un conjunto compuesto por N escalares $\underline{\phi} = \{\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_N\}$ es igual al producto de la probabilidad individual, que puede ser representada por medio de funciones delta de cada uno de los escalares, como se muestra a continuación:

$$P'(\underline{\psi}) = \prod_{\alpha=1}^N \delta(\phi_{\alpha} - \psi_{\alpha}) \quad (3.56)$$

donde N representa el número total de especies químicas y la entalpia total de una mezcla reactiva. La derivada de $P(\underline{\psi})$ con respecto al tiempo y el gradiente en función de los escalares se expresan como:

$$\frac{\partial \phi_{\alpha}}{\partial t} = \frac{\frac{\partial P(\underline{\psi})}{\partial t}}{\frac{\partial P(\underline{\psi})}{\partial \psi_{\alpha}}} \quad (3.57a)$$

$$\nabla \phi_{\alpha} = \frac{\nabla P(\underline{\psi})}{\frac{\partial P(\underline{\psi})}{\partial \psi_{\alpha}}} \quad (3.57b)$$

La descripción del comportamiento de las especies químicas y la energía asociada a la presencia o ausencia de éstas y sus efectos, se realiza mediante el uso de las ecuaciones de conservación de las especies químicas y la conservación de la energía, las cuales pueden ser englobadas en la siguiente expresión:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \phi_{\alpha}) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \phi_{\alpha}) = -\nabla \cdot \vec{J}_{\phi_{\alpha}} + S_{\alpha} \quad (3.58)$$

donde ϕ_α puede ser la fracción másica de alguna especie química o la entalpía. Para obtener una ecuación de transporte para el FDP se sustituye la ecuación (3.57) y la ecuación de conservación de cantidad de movimiento en la ecuación (3.58), realizando el promedio condicionado para obtener:

$$\underbrace{\frac{\delta}{\delta t} \rho P(\underline{\psi})}_{\text{Temporal}} + \underbrace{\nabla \cdot (\rho \langle \vec{v} | \Phi = \underline{\psi} \rangle P(\underline{\psi}))}_{\text{Convectivo}} - \underbrace{\frac{\delta}{\delta \psi_\alpha} (\langle \nabla \cdot J_\alpha | \Phi = \underline{\psi} \rangle P(\underline{\psi}))}_{\text{Mezcla Molecular}} = \underbrace{-\frac{\delta}{\delta \psi_\alpha} (S_\alpha P(\underline{\psi}))}_{\text{Reacción química}} \quad (3.59)$$

En esta ecuación el primer término del lado izquierdo de la igualdad representa el cambio de la FDP en el transcurso del tiempo, el segundo el transporte debido a la convección, y el último los cambios que trae consigo la mezcla molecular. El término del lado derecho de la igualdad es el termino fuente de la ecuación que en este caso se refiere a los cambios debidos a la cinética química del proceso de combustión.

Aplicando el promediado obtenemos la siguiente ecuación:

$$\underbrace{\frac{\delta}{\delta t} \bar{\rho} \tilde{P}(\underline{\psi})}_{\text{Temporal}} + \underbrace{\nabla \cdot \bar{\rho} \tilde{\vec{v}} \tilde{P}(\underline{\psi})}_{\text{Convectivo}} + \underbrace{\nabla \cdot (\bar{\rho} \langle \vec{v}'' | \Phi = \underline{\psi} \rangle P(\underline{\psi}))}_{\text{Transporte turbulento}} =$$

$$-\frac{\delta}{\delta \psi_\alpha} (\langle \nabla \cdot J_\alpha | \Phi = \underline{\psi} \rangle \tilde{P}(\underline{\psi})) - \frac{\delta}{\delta \psi_\alpha} (S_\alpha \tilde{P}(\underline{\psi})) \quad (3.47)$$

Mezcla molecular Reacción Química

Ecuación en la que los términos de transporte debido a la turbulencia y mezcla molecular no son cerrados y es necesario utilizar modelos para realizar dichos cierres. El transporte debido a la turbulencia puede ser modelada al suponer un gradiente de difusión como se muestra a continuación:

$$\nabla \cdot (\bar{\rho} \langle \vec{v}'' | \Phi = \underline{\psi} \rangle P(\underline{\psi})) = \nabla \cdot \left(\frac{\mu_T}{Sc_{T,\phi}} \nabla \tilde{P}(\underline{\psi}) \right) \quad (3.48)$$

donde μ_T es la viscosidad turbulenta y $Sc_{T,\phi}$ es el número de Schmidt turbulento para el escalar ϕ . Por último, el termino referente a la mezcla molecular le es aplicado la ley Fick o la ley de Fourier, dependiendo si la ϕ_α es una especie química o la entalpia, y tomando en cuenta que para flujos turbulentos (el termino nabra es mucho mayor en magnitud que el término de la derivada parcial, por lo tanto se puede despreciar) tenemos la expresión final:

$$\frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} \left(\langle \nabla \cdot \vec{J}_\alpha | \underline{\Phi} = \underline{\psi} \rangle \tilde{P}(\underline{\psi}) \right) = \frac{\partial^2}{\partial \psi_\alpha^2} \left\langle \frac{\mu}{Sc} (\nabla \Phi_\alpha)^2 | \underline{\Phi} = \underline{\psi} \right\rangle \tilde{P}(\underline{\psi}) \quad (3.49)$$

Este último término no es cerrado por lo que se recurre al uso de modelos para realizar dicho cierre, los cuales tiene que representar adecuadamente el transporte de $\tilde{P}(\underline{\psi})$ haciendo que el valor esperado de los elementos del conjunto de variables aleatorias, ϕ_α , permanezca sin cambios y sus varianzas, ϕ_α^2 , disminuyan su magnitud. El modelo utilizado en el presente trabajo es el Linear Mean-Square Estimation (LMSE), el cual hace tender las funciones de densidad de probabilidad a la media sin violar los valores máximos y mínimos de los escalares involucrados en el proceso, dicho modelo tiene la siguiente expresión:

$$\frac{\partial^2}{\partial \psi_\alpha^2} \left\langle \frac{\mu}{Sc} (\nabla \Phi_\alpha)^2 | \underline{\Phi} = \underline{\psi} \right\rangle \tilde{P}(\underline{\psi}) = \frac{1}{2\tau_{mez}} \frac{\partial}{\partial \psi} (\underline{\psi} - \langle \underline{\Phi} \rangle) \quad (3.50)$$

donde τ_{mez} es el tiempo característico de la mezcla el cual se encuentra definido en términos de los valores medios del modelo de dos ecuaciones utilizado para el cierre de las ecuaciones de cantidad de movimiento $\tilde{\kappa} - \tilde{\epsilon} RNG$ como se muestra a continuación:

$$\tau_{mez} = \frac{1}{C_d} \frac{\tilde{\kappa}}{\tilde{\epsilon}} \quad (3.51)$$

Siendo C_d un coeficiente que depende de la naturaleza del fenómeno en estudio.

3.7.1 Cinética química

Los procesos de combustión son altamente complejos ya que en estos intervienen una gran cantidad de especies químicas, las cuales interactúan entre ellas teniendo así un conjunto de reacciones químicas con escalas temporales muy dispares.

A los mecanismos de reacción química en la que se consideran todas las reacciones involucradas en el proceso de combustión, así como las especies químicas inherentes en éstas, se le conocen como *Mecanismos detallados de reacción química*, y suelen ser usados para describir un proceso de combustión unidimensional o bidimensionalmente de llamas en un régimen laminar; sin embargo, debido a la gran cantidad de cálculos necesarios para este tipo de mecanismos, no es factible aplicar estos mecanismos en llamas generadas con quemadores de geometrías complejas, y mucho menos aún en llamas turbulentas, ya que se tiene que resolver un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias tan grandes como el número de especies presentes en el proceso junto con la ecuación de la energía. Dicha solución se debe realizar tanto espacial como temporalmente. Debido a lo anterior, se han desarrollado mecanismos de reacciones químicas los cuales no consideran todas las reacciones ni los elementos que en ésta intervienen, tomando solo en cuenta las que mayormente influyen en el proceso de combustión. A este tipo de esquemas se les conocen como *Mecanismo reducido de reacción química*, de los cuales tenemos el tipo Global o Skeletal. La diferencia entre estos dos es la forma en la que son determinadas las reacciones para formar el mecanismo.

Los sistemas globales son obtenidos al elegir las reacciones por medio del conocimiento previo del proceso o por medio de un estudio en el cual se analizan un conjunto de reacciones y se eligen aquellas que influyen en el proceso descartando aquellas cuyos efectos no son importantes. Por otro lado, los mecanismos Skeletal son obtenidos mediante el análisis de un mecanismo detallado en el cual se eliminan las reacciones cuya contribución no es importante, dejando solamente las reacciones que aportan en demasía al proceso.

Para hacer factible el cálculo de la llama IDF turbulenta son usados los mecanismos reducidos de reacción de tipo global (Westbrook y Dryer, 1984), cuyos resultados presentan una buena aproximación en la velocidad de propagación de llama, así como en la temperatura de llama adiabática en función de la relación de equivalencia al ser comparado con los resultados obtenidos con un mecanismo de reacción química detallado.

3.8 Ecuación de estado

Para realizar los análisis para un flujo reactivo con múltiples componentes se tiene que tomar en cuenta los efectos de cada uno de éstos en el proceso, para ello es necesario conocer la cantidad de cada uno de los elementos que componen la mezcla. Esto se hace mediante la fracción molar X_i , o mediante la fracción másica Y_i , las cuales se definen de la siguiente manera:

$$X_i = \frac{n_i}{\sum_{i=1}^N n_i} = \frac{n_i}{n_T} \quad (3.60a)$$

$$Y_i = \frac{m_i}{\sum_{i=1}^N m_i} = \frac{m_i}{m_T} \quad (3.60b)$$

donde i es un elemento que compone la mezcla, N es el número total de componentes, m_i es la masa para cada componente, n_i el número de moles para cada componente, y por último, n_T y m_T son respectivamente el número de moles y masa total de la mezcla. La relación entre estas dos fracciones está dada en la siguiente ecuación:

$$X_i = \frac{\frac{Y_i}{M_i}}{\sum_{j=1}^N \frac{Y_j}{M_j}} \quad (3.61)$$

donde M_i y M_j son los pesos moleculares de las especies químicas. La densidad de la mezcla puede ser expresada por medio de estas variables, siendo que en algunos modelos desarrollados la composición de la mezcla se encuentra en función de la fracción másica, por lo que la densidad en función de dicha fracción se expresa como:

$$\rho_{mez} = \frac{1}{\sum_{i=1}^N \frac{Y_i}{M_i}} \quad (3.62)$$

Debido a las condiciones en las que se desarrolla la llama, la presión atmosférica y temperatura máxima por debajo de los 2500 K, la ecuación de estado utilizada es la del gas ideal, esta ecuación tiene la siguiente forma para una mezcla con múltiples componentes:

$$P = \frac{R_u T}{\sum_{i=1}^N \frac{Y_i}{M_i}} \quad (3.63)$$

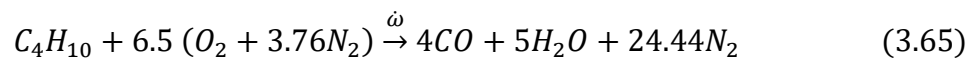
Siendo R_u la constante universal de los gases. La entalpía de la mezcla es obtenida mediante la relación de las entalpías de los productos y los reactantes involucrados en la mezcla a la temperatura del medio en el que se desarrolla más la entalpía liberada durante el proceso de combustión como se muestra a continuación:

$$h_{mez} = \int_{T_{ref}}^T \sum_{i=1}^N C_{p_i} Y_i dT + \sum_{i=1}^N Y_i \Delta h_{f,i}^0 \quad (3.64)$$

donde el C_{p_i} es el calor específico a presión constante para cada una de las especies en el proceso, T_{ref} es la temperatura de referencia, y $\Delta h_{f,i}^0$ es la variación de la entalpía en la que se forma un elemento a partir de elementos químicos estables, a una presión y temperatura de referencia y una entalpía de formación.

3.9 Mecanismo global de reacción

El primer mecanismo utilizado para la cinética química es aquel compuesto por solo un paso de reacción para el proceso de combustión de butano con aire atmosférico, paso que es mostrado a continuación:

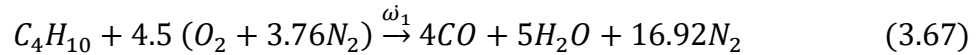


En la que $\dot{\omega}$ es la tasa de reacción con la que los reactantes pasan a ser parte de los productos, dicha tasa está definida como:

$$\dot{\omega} = A \exp\left(-\frac{E_a}{R_u^* T}\right) [C_4H_{10}]^a [O_2]^b \quad (3.66)$$

El segundo mecanismo es en el que está conformado de dos pasos, en el primer paso de reacción es aquel en el que el oxidante y el combustible reaccionan

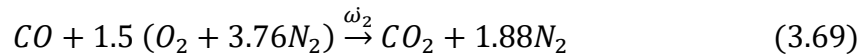
teniendo como primeros productos el monóxido de carbón, vapor de agua y nitrógeno restante.



En la que $\dot{\omega}_1$ es la tasa de reacion con la que los reactantes pasan a ser parte de los productos, dicha tasa está definida mediante la siguiente ecuación:

$$\dot{\omega}_1 = A \exp^{-\frac{E_a}{R_u * T}} [C_4H_{10}]^a [O_2]^b \quad (3.68)$$

En el segundo paso, el monóxido de carbono reacciona con el aire formando dióxido de carbono.



En la que $\dot{\omega}_2$, la tasa de reacción, se define como:

$$\dot{\omega}_2 = A \exp^{-\frac{E_a}{R_u * T}} [C_4H_{10}]^a [O_2]^b \quad (3.70)$$

3.10 Formación de NOx en la combustión

El termino NOx hace referencia a los gases de óxidos de nitrógeno emitidos durante la combustión. En la atmósfera, los óxidos de nitrógeno pueden contribuir a la formación de ozono fotoquímico (smog o niebla contaminante) y tener consecuencias para la salud, también contribuye al calentamiento global y puede provocar lluvia ácida. Los principales son el óxido nítrico (NO), dióxido de nitrógeno (NO₂), y óxido nitroso (N₂O).

El óxido nítrico(NO), conocido comúnmente como monóxido de nitrógeno, es un gas incoloro y no inflamable, poco soluble en agua, presente en pequeñas cantidades en los mamíferos, pero tóxico en grandes cantidades. Es una molécula altamente inestable en el aire ya que se oxida rápidamente en presencia de oxígeno convirtiéndose en dióxido de nitrógeno.

El dióxido de nitrógeno (NO₂) es un gas pardo rojizo, no es inflamable, pero si tóxico y se caracteriza por un olor muy asfixiante. El dióxido de nitrógeno es un importante gas de efecto invernadero.

El óxido nitroso (N_2O), también conocido como el gas hilarante, es un gas incoloro con un olor dulce y ligeramente tóxico, con efecto anestésico. No es inflamable ni explosivo, pero soporta la combustión tan activamente como el oxígeno cuando está presente en concentraciones apropiadas. Al ser el tercer gas de efecto invernadero de larga duración más importante, el óxido nitroso contribuye sustancialmente al calentamiento global y es una sustancia que agota sustancialmente el ozono estratosférico

A temperatura ambiente el oxígeno y el nitrógeno tienen poca tendencia a reaccionar entre sí, puesto que su reacción de formación es extremadamente endotérmica. La energía necesaria solo está disponible a temperaturas altas, tal como se generan en el proceso de combustión (de $1300^{\circ}C$ a $2500^{\circ}C$). Incluso a estas altas temperaturas únicamente se producen cantidades muy pequeñas de NO, pero tienen importancia en términos de contaminación atmosférica.

En general, se puede decir que el tiempo de residencia de los gases en la zona de combustión, así como la temperatura de la llama, y la concentración de oxígeno determinan la cantidad de NO que realmente se forma.

De acuerdo a (Prieto, 2009), si los gases productos de la combustión se enfrían lentamente a medida que son emitidos, el NO se convertiría en O_2 y N_2 . Sin embargo, en la mayor parte de los equipos de combustión, una fracción importante de la energía térmica de los productos gaseosos se cede rápidamente por la conversión en trabajo o por transferencia de calor. Debido a esto, el NO permanece en los escapes a baja temperatura, pues no tiene tiempo para la descomposición. El NO_2 aparece debido a la reacción del NO con el O_2 , pero esto tan sólo sucede a bajas temperaturas (menos de $150^{\circ}C$); así pues, se encuentra muy poco NO_2 en la mezcla gaseosa a temperaturas de combustión y se puede decir que el 90% del total de NO_x que se emite es NO.

Ya teniendo el NO y el NO_2 en la atmósfera, estos entran en un conjunto de reacciones fotoquímicas que resultan en el aumento de la concentración de NO_2 , y en una disminución de la de NO. Esta concentración de NO y NO_2 en la atmósfera traen como resultado la formación de compuestos perjudiciales para el medio ambiente como son el "smog" fotoquímico o la lluvia ácida.

3.11 Mecanismos de formación de los NOx

Podemos distinguir tres tipos de formación:

1. NOx Térmico: Se producen por la oxidación del nitrógeno contenido en el aire de la combustión.
2. NOx del combustible: Resultan de la oxidación del nitrógeno contenido en el combustible.
3. NOx súbito: Formados por la conversión del nitrógeno molecular en presencia de hidrocarburos, en el frente de la llama.

Por lo tanto, la cantidad de NOx producido depende fundamentalmente, del diseño y tipo de quemador, de las propiedades del combustible y de las condiciones en que tienen lugar la combustión, como la temperatura, el exceso de aire y el tiempo de residencia.

Tabla 1: Mecanismos de formación de NOx. (Prieto, 2009).

Óxidos de Nitrógeno	Lugar de Formación	Mecanismo/Reacción	Factores principales que afectan a la formación del NO
NO Térmico	Llama (zona de pre-reacción)	a) Exceso de O ₂ $N_2 + O \rightarrow NO + N$ $N + O_2 \rightarrow NO + O$ b) Exceso de combustible $N + OH \rightarrow NO + H$	- Concentración de átomos de O ₂ atómico - Tiempo de residencia - Temperatura ≥ 1300 °C
NO Combustible	Llama	Sobre compuestos de carbono, entre otros, parcialmente desconocidos	- Concentración de O ₂ - Tiempo de residencia
NO Súbito	Llama	$CN + H_2 \rightarrow HCN + H$ $CN + H_2O \rightarrow HCN + OH$ $CH + N_2 \rightarrow HCN + N$	- Concentración de átomos de O ₂ en la reacción de combustión - Exceso de aire
NO ₂	Llama	$NO + H_2O \rightarrow NO_2 + OH$	- Enfriamiento rápido de la reacción de combustión (turbinas de gas)
	Conductos y Chimenea	$2NO + O_2 \rightarrow NO_2$	- Temperatura menor de 650 °C - Concentración de O ₂ - Tiempo de residencia
	Atmósfera	$NO_2 + hv \rightarrow NO + O$ $O + O_2 + M \rightarrow O_3 + M$ $NO + O_3 \rightarrow NO_2 + O_2$	- Concentración de O ₂ - Intensidad de la insolación - Tiempo de residencia - Polución del aire

3.12 Formación NOx térmico

El NOx es formado a altas temperaturas por la oxidación del nitrógeno que se encuentra en el aire comburente. Este tipo de formación de NOx crece exponencialmente con la temperatura y el tiempo de permanencia en la misma.

Normalmente se forman cantidades significativas de NOx en condiciones de oxidación por encima de los 1200°C, aumentando de forma exponencial con la temperatura. Conforme a (Prieto, 2009) el N₂ y el O₂ moleculares presentes en la combustión, se disocian y pasan a su estado atómico, participando en una serie de reacciones, siendo uno de los productos el NO. De igual manera, cuando las temperaturas de combustión son inferiores a 1000°C, las emisiones de NO se reducen significativamente, dependiendo en tal caso, del contenido en nitrógeno del combustible.

Este tipo de formación de NOx es el mecanismo predominante cuando se queman combustibles líquidos y gaseosos.

Las tres reacciones principales son:

- a) Cuando se tiene una combustión con una mezcla pobre, es decir existe una mayor cantidad de aire que de combustible con lo cual se dan las siguientes reacciones:



- b) Cuando se tiene una combustión incompleta, es decir, existe una mayor cantidad de combustible que de aire:



3.13 Formación NOx del combustible

La principal fuente de emisiones de NOx procedentes del nitrógeno estructural contenido en los combustibles, como parte de compuestos orgánicos en los carbones o petróleo, se debe a la conversión del nitrógeno liberado en NOx durante el proceso de combustión. El NOx del combustible contribuye aproximadamente al 50% de las emisiones totales incontroladas, cuando se queman aceites residuales, y a más del 80% en el caso de quemar diversos tipos de carbones.

Durante el proceso de combustión, el nitrógeno se libera como radical libre que, finalmente, forma NO o NO₂.

El nitrógeno del combustible es un factor principal en las emisiones de NO_x, pero sólo se convierte en NO entre un 20-30%; la mayor parte del NO_x del combustible formado, se realiza a través de una serie de reacciones.

Durante la combustión, una fracción de este nitrógeno contenido en el combustible es liberado y es convertido en la zona de llama en óxidos de nitrógeno y/o N₂. La cantidad de NO formado depende de:

- El nitrógeno contenido en el combustible (material volátil y en carbono fijo)
- Las características del combustible
- La concentración de nitrógeno del combustible liberada a la fase gaseosa en la zona de llama.
- Los parámetros de la combustión (especialmente el exceso de O₂)

El porcentaje de nitrógeno combustible liberado para convertirse en NO disminuye con el contenido total en nitrógeno del combustible.

Cuando las condiciones de reacción se desarrollan con altos excesos de oxígeno, predominará la formación de óxidos de nitrógeno.

Bajo condiciones ricas en combustible o cuando el contenido en nitrógeno del combustible es muy alto, las reacciones que producen nitrógeno molecular predominan, resultando un porcentaje de conversión de nitrógeno combustible a NO menor. Esto es debido a que el NO reacciona con algunos radicales, descomponiéndose en nitrógeno molecular.

3.14 Formación de NO_x súbito

La formación de NO_x súbito se produce por reacción del nitrógeno molecular con fragmentos de hidrocarburos en el frente de la llama. Los enlaces del nitrógeno diatómico pueden romperse fácilmente en presencia de radicales CH, CH₂, etc., es decir hidrocarburos:



El producto HCN es un subproducto del mecanismo anterior, es decir del NO_x del combustible, por lo que se puede entender como una progresión o segunda fase del mecanismo anterior. Este mecanismo es el de menos importancia relativa a la hora de contribuir a la formación de NO_x.

3.15 Formación de NO₂

La cantidad de NO₂ varía entre el 1-5% del total de NO_x producido, dependiendo del tipo de quemador. La reacción de formación de NO₂ es la siguiente:



Esta reacción es favorecida termodinámicamente por el descenso de temperatura. (Prieto, 2009).

3.16 Formación de N₂O

Se forma entre las temperaturas de 800°C y 1100°C en la zona de postcombustión y tiene relación con la cantidad de HCN y NH₃. A temperaturas superiores a éstas, el N₂

3.17 Ecuaciones de Formación de NO_x

Mecanismo NO_x Súbito

De acuerdo a (Jiang et al., 2006) la contribución del NO_x súbito al total de NO_x es pequeño; siendo que en los estudios recientes implica una serie compleja de reacciones y muchas posibles especies intermedias, la ecuación utilizada en este caso es:

$$w_p = 6.4 \times 10^6 \times f \times \exp\left(-\frac{36483.4}{T}\right) \left(\frac{RT}{p}\right)^{a+1} [O_2]^a [N_2] [FUEL] \quad (4.35)$$

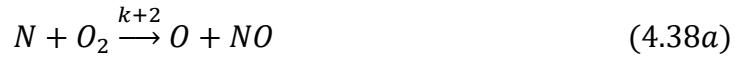
donde f es un factor correctivo cuya expresión es:

$$f = 4.75 + 0.0819n - 23.2\phi + 32\phi^2 - 12.2\phi^3 \quad (4.36)$$

donde ϕ es la razón equivalente.

Mecanismo NO_x Térmico

Este tipo de mecanismo NO es simulado numéricamente. A pesar de que el mecanismo Zeldovich fue introducido desde 1988, sigue siendo utilizado en muchas investigaciones, razón por la cual se utilizará igualmente. La reacción química, así como las razones de producción y destrucción son descritas por:



La tasa de formación NOx es significativa solo a altas temperaturas, como se vio en el capítulo anterior 3.10. Cuando hay suficiente oxígeno, como en las mezclas pobres, la tasa de consumo de átomos de nitrógeno libre es igual a la tasa de su formación, por lo tanto, se asume un estado cuasi-estático. Esta suposición es válida para la mayoría de los combustibles, excepto para las condiciones de mezcla rica en combustible. Por lo tanto, la tasa de formación de NO es:

$$\frac{d[NO]}{dt} = \frac{2[O](k_1k_2[O_2][N_2] - k_{-1}k_{-2}[NO]^2)}{k_2[O_2] + k_{-1}[NO]} \quad (4.40)$$

donde las concentraciones de O_2 y N_2 las obtenemos fácilmente por la solución de la combustión pero aún se debe determinar el radical O .

Modelo atómico del oxígeno

La cinética de la tasa de formación NOx térmico es mucho más lenta que la principal tasa de oxidación de hidrocarbano, y la mayoría de la formación NOx térmico es formado después de completarse la combustión. Por lo tanto, el proceso de formación NOx térmico a menudo se puede desacoplar del mecanismo de reacción de combustión principal, y la tasa de formación puede ser calculado asumiendo el equilibrio total o parcial en las reacciones de combustión. De acuerdo a (Jiang et al., 2006), la concentración del átomo O puede ser obtenida por la expresión:

$$[O] = AT^B \exp\left(\frac{E}{RT}\right) [O_2]^{0.5} \quad (4.41)$$

donde $R = 8.314$ la constante del gas, E es la energía de activación de reacción, que es una constante en una reacción fija, A y B son variables.

La suposición del equilibrio puede ser justificada por la reducción de la importancia de los radicales en llamas de altas temperaturas. Los módulos de simulación utilizan la expresión:

$$[O] = 3.97 \times 10^5 T^{-0.5} [O_2]^{0.5} \exp\left(\frac{-31090}{T}\right) \quad (4.42)$$

El equilibrio parcial da mejores resultados que el equilibrio, el cual se obtiene contabilizando las reacciones en el proceso de disociación-recombinación del O_2 como:



Por lo tanto, la ecuación (4.42) es reemplazada por:

$$[O] = 36.64T^{0.5}[O_2]^{0.5} \exp\left(\frac{-27123}{T}\right) \quad (4.44)$$

O es inestable, reduciéndose a N_2 . La cantidad formada en la mayoría de las instalaciones convencionales de combustión mayoritariamente es menos de 10 ppm. Esto es debido a que los radicales del tipo HCN son producidos en la zona de combustión donde las temperaturas son del orden de 1500°C , a las cuales no se forma N_2O . Al llegar los gases a temperaturas de 800°C a 1100°C intervalo de formación del N_2O , los radicales HCN necesarios para su formación se han consumido en otras reacciones.

4 Método de solución

El conjunto de ecuaciones diferenciales que se ha presentado no tiene una solución analítica, por lo que es necesario recurrir a los métodos numéricos, así como al uso de hardware y software para poder resolver dicho conjunto de ecuaciones.

La estrategia utilizada para dar solución al fenómeno de combustión de la llama de difusión inversa turbulenta consiste en resolver la aerodinámica separada de la solución de la termoquímica, soluciones que posteriormente se acoplan para obtener el comportamiento del proceso en general. La aerodinámica es resuelta por medio del método de volúmenes finitos, mientras que la termoquímica, que es descrita por las funciones de densidad de probabilidad conjuntas, utiliza este método para resolver la parte espacial y temporal mientras que utiliza el método de Monte Carlo para los escalares termoquímicos, esto debido a la alta dimensionalidad (cantidad de escalares termoquímicos que se tienen que resolver) que hacen poco factible la solución usando solamente el primer método mencionado.

4.1 Solución de la aerodinámica

En este capítulo se presentará del método de solución, el cual servirá para poder resolver las ecuaciones de Navier-Stokes, las cuales son necesarias para la resolución de problemas, como es el caso de esta tesis.

Para la resolución de problemas relacionados con el flujo de fluidos se utilizan las ecuaciones de Navier-Stokes que proporcionan un modelo que describe el comportamiento en tres dimensiones del fluido, lo que resultará en una ecuación para cada dirección. Sin embargo, este sistema de ecuaciones diferenciales carece de una solución analítica, por lo que se tiene que recurrir al uso de métodos numéricos para obtener una solución.

En este tipo de situaciones es conveniente utilizar la Dinámica de Fluidos Computacional (Computational Fluid Dynamic, CFD), que permite resolver y analizar problemas que involucran el flujo de fluidos mediante la solución numérica de las ecuaciones de Navier-Stokes lo que significa utilizar un dominio discreto, es decir, poner una malla sobre el sistema, con lo cual se obtendrá una ecuación algebraica en cada punto de interés del sistema (celda), para posteriormente darle una solución.

El proceso que se tiene en la Dinámica de Fluidos Computacional, es:

1. La selección y discretización del dominio del cálculo.
2. Integración de las ecuaciones en los subdominios de cálculo, que tiene como resultado ecuaciones algebraicas.
3. Selección de las condiciones iniciales y condiciones de frontera en el dominio de cálculo.
4. Solución de las ecuaciones algebraicas mediante métodos numéricos.
5. Análisis de resultados.

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

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{\phi}) + \nabla \cdot (\bar{\rho}\tilde{u}_i\tilde{\phi}) - \nabla \cdot (\Gamma_\phi \nabla_\phi) = \bar{S}_\phi \quad (4.1)$$

Esta ecuación general, se puede discretizar con el método de volúmenes finitos. Con este método, el dominio se divide en pequeños volúmenes de control, asociando a cada uno de ellos un punto nodal. De manera similar, se discretiza el tiempo en intervalos temporales. La ecuación diferencial resultante, se integra en cada volumen de control y en cada intervalo temporal, y el resultado es una ecuación discretizada que relaciona los valores de $\tilde{\phi}$ para un determinado grupo de puntos nodales. Esta ecuación algebraica expresa el principio de conservación de $\tilde{\phi}$ en el volumen finito, de la misma manera que la ecuación diferencial lo expresa para un volumen infinitesimal. La ecuación algebraica para un nodo P puede expresarse en forma general como:

$$a_P \tilde{\phi}_P = \sum_{i,I=E,W,N,S,H,L} a_i \tilde{\phi}_I + a_T \tilde{\phi}_T + B \quad (4.2)$$

donde el subíndice I representa las celdas vecinas, i la cara entre las celdas P e I , T el valor correspondiente en el intervalo temporal anterior, y B el término fuente.

4.2 Método de Volúmenes Finitos

El método de volúmenes finitos es un método numérico el cual consiste en dividir un dominio computacional en pequeños volúmenes de control, para así discretizar las ecuaciones presentadas en el capítulo anterior y poder dar solución a estas de manera iterativa, el desarrollo para obtener dichas ecuaciones discretas inicia con describir la ecuación de continuidad, conservación de la cantidad de movimiento, de las especies químicas y energía mediante una ecuación general de transporte, en términos del promediado de las mismas, como se muestra a continuación:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{\Phi}) + \nabla \cdot (\bar{\rho}\tilde{v}\tilde{\Phi}) - \nabla \cdot (\Gamma_{\Phi}\nabla\tilde{\Phi}) = \bar{S}_{\Phi} \quad (4.3)$$

donde $\tilde{\Phi}$ nos representa a la propiedad media analizada, Γ_{Φ} es el coeficiente difusivo y \bar{S}_{Φ} el termino fuente para dicha propiedad. Esta ecuacion de transporte está constituida, describiéndola de izquierda a derecha, por un término temporal, un término conectivo, un término que representa la difusión molecular y por último el termino fuente. Para discretizar esta ecuación es necesario definir las cualidades que tendrán cada uno de los volúmenes de control se les es asignado un nodo en el cual se almacenan cantidades escalares como lo son la presión o la temperatura, mientras que en las caras son almacenados los valores vectoriales como lo es la velocidad. El motivo de separar la forma de almacenar las variables en los elementos discretos es el de evitar problemas en la solución de la velocidad y la presión cuando los gradientes de ésta segunda variable son muy grandes. Este tipo de mallado es conocido como Mallado Decalado (Staggered grid).

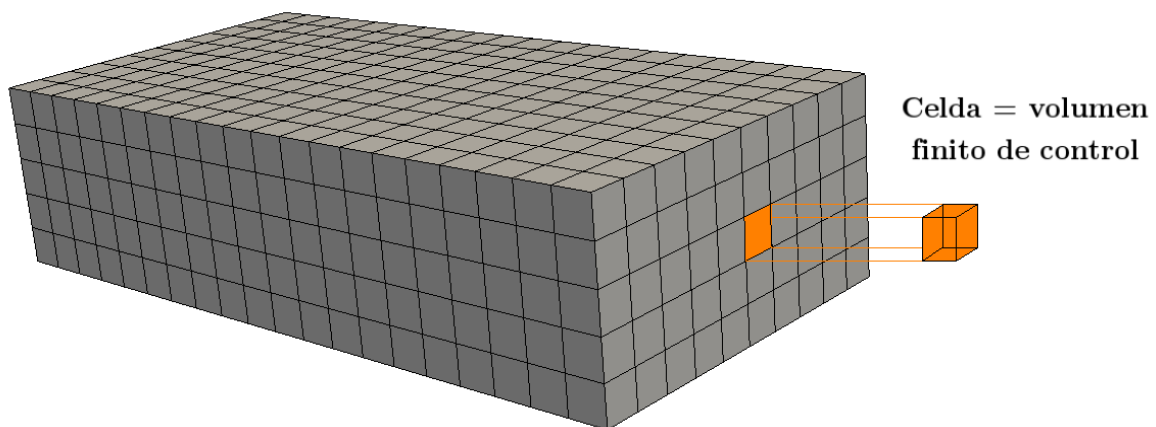


Figura 5: Volúmenes Finitos (Cavada López-Tapia, 2015)

4.3 Mallado

El primer paso en la discretización espacial consiste en la discretización del dominio de trabajo, esto es, decidir el tipo de malla más adecuada a nuestro problema, teniendo en cuenta las ventajas y limitaciones de cada una de ellas.

Una malla de resolución se define como el conjunto discreto de puntos (también denominados nodos) pertenecientes al dominio continuo de trabajo y sobre los cuales se hayan las soluciones aproximadas del problema. Dependiendo de la forma y tamaño relativo de los nodos que componen una malla, se distinguen dos tipos, las mallas estructuradas y las no estructuradas. Dentro de las mallas estructuradas podemos encontrar mallas uniformes o no uniformes, dependiendo de regularidad del espaciado entre celdas.

La Figura 6 muestra un ejemplo de los tres tipos de mallas mencionados.

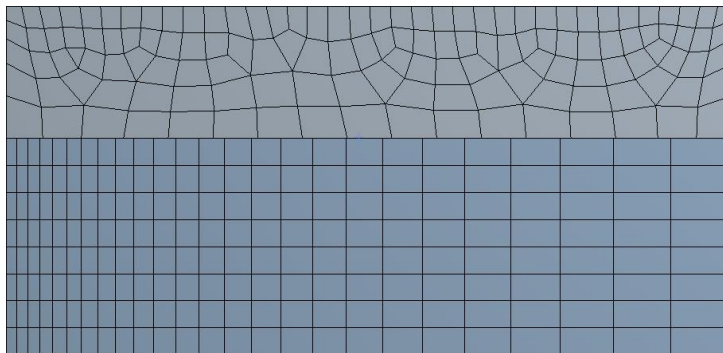


Figura 6: Ejemplo de malla uniforme no estructurada (inferior horizontal), uniforme estructurada (inferior vertical) y no estructurada (superior). (Cavada Lopez-Tapia & Fernández, 2015)

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

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

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

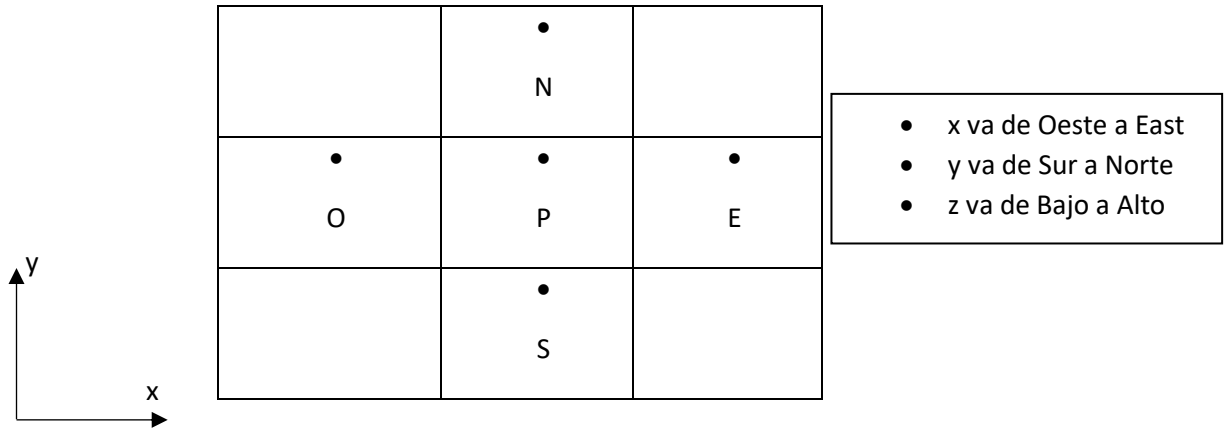


Figura 7: Nomenclatura de la Malla topológicamente Cartesiana

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

$$F = \bar{\rho} \tilde{v}_i, \quad D = \frac{\Gamma}{\delta_i}, \quad Pe = \frac{F}{D} \quad (4.4)$$

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

Los coeficientes a_i de la ecuación (4.2) son:

$$a_i = D_i f(|Pe|_i) + \max(-F_i, 0) \quad (4.5)$$

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

$$F_i = (\bar{\rho}\tilde{v})_i \Delta_i \quad D_i = \frac{\Gamma_i \Delta_i}{(\delta i)}, \quad i=n, s, e, w \quad (4.6)$$

donde Δ_i es la longitud de la cara i .

Para determinar F_i se necesita conocer $\bar{\rho}$ y \tilde{u}_i en la cara de la celda. El cálculo del término convectivo de la ecuación de transporte general requiere también el conocimiento de la variable escalar, $\tilde{\phi}$, en la cara de la celda. La velocidad \tilde{v}_i está calculada en la cara de la malla decalada; pero $\tilde{\rho}$ y $\tilde{\phi}$ están calculados en el nodo y necesitan ser interpolados a la cara para calcular los coeficientes a_i de la ecuación discretizada (4.2).

La obtención de estas variables en la cara de la celda es importante para la precisión y convergencia de la solución. El cálculo de $\tilde{\rho}$ y $\tilde{\phi}_i$ da lugar a los llamados esquemas de discretización. La función $f(|Pe|)$ de la ecuación (4.5) depende del esquema de interpolación; por ejemplo, en el esquema de diferencias desplazadas, $f(|Pe|)=1$. Para el sistema híbrido:

$$f(|Pe|) = \max(0.1 - 0.5|Pe|) \quad (4.7)$$

El coeficiente para el término transitorio es:

$$a_T = \frac{\bar{\rho}_T \Delta x \Delta y}{\Delta t} \quad (4.8)$$

Para el cálculo del término D_i (4.6) se necesita obtener el coeficiente de difusión, Γ , en la cara de la celda. El coeficiente Γ no es necesariamente una constante, probablemente puede ser función de valores variables que se conocen en los nodos

(por ejemplo la temperatura) y por tanto es necesario interpolarlo en la cara. Esta interpolación puede ser aritmética o armónica. Como ejemplo, para la cara e, estas interpolaciones son:

$$\Gamma_e = \frac{\Delta x (\Gamma_P + \Gamma_E)}{2 \delta x_e}$$

$$\Gamma_e = \frac{2 \delta x_e}{\Delta x \left(\frac{1}{\Gamma_P} + \frac{1}{\Gamma_E} \right)} \quad (4.9)$$

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

$$\bar{S}_\phi = \bar{S}_{\phi,c} + \bar{S}_{\phi,v} \tilde{\phi}_p \quad (4.10)$$

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

Con esta suposición, los términos B y a_p de la ecuación (4.2) son:

$$B = \bar{S}_{\phi,c} \Delta x \Delta y + a_T \tilde{\phi}_T \quad (4.11)$$

$$a_p = a_e + a_w + a_n + a_s + a_T - \bar{S}_{\phi,v} \Delta x \Delta y \quad (4.12)$$

La ecuación (4.2) se aplica en cada celda del dominio, para cada $\bar{\phi}$ y para cada paso temporal Δt , por lo que se tiene un sistema de ecuaciones lineales (los coeficientes a pueden depender, directa o indirectamente de $\tilde{\phi}$, por lo que el sistema es realmente pseudo-lineal).

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

En el cálculo de las velocidades a partir de las ecuaciones de cantidad de movimiento, se tiene el inconveniente de que la presión, cuyo gradiente aparece como término fuente en las ecuaciones de cantidad de movimiento, no tiene una

ecuación propia para calcularla. Una solución ampliamente utilizada, es transformar la ecuación de continuidad en una ecuación para la presión.

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

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

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

$$\bar{S}_{\phi,r} = \frac{\bar{\rho}V_P}{\Delta t_f} (\tilde{\phi}_P^{(n-1)} - \tilde{\phi}_P^{(n)}) \quad (4.13)$$

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

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

$$\tilde{\phi}_P^{(n)} = \alpha \tilde{\phi}_P^{sol} + (1 - \alpha) \tilde{\phi}_P^{(n-1)} \quad (4.14)$$

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

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

En este trabajo, se usa el código de Dinámica de Fluidos Computacional, PHOENICS, para resolver las ecuaciones que describen la aerodinámica del flujo, recordando que son, la de continuidad, de cantidad de movimiento, de energía y de turbulencia.

4.4 Método de Monte Carlo

Este método recibe su nombre de los juegos de ruleta en la que se proporciona números de manera estocástica, que se realizan en los casinos de la ciudad de Monte Carlo en Mónaco, el cual fue desarrollado durante la segunda guerra mundial (Pope, 1981). El concepto de dicho método es el de obtener resultados mediante funciones de densidad de probabilidad y el uso de variables aleatorias con los que se puede predecir el comportamiento de fenómenos de diversas índoles. En el presente trabajo este método consiste en simular una función de densidad de probabilidad por medio de un conjunto de espacios muestrales, ψ , los cuales están compuestos de un conjunto de escalares, ϕ , conformados por vectores, N_p , también conocidos como partículas o bolas, estas partículas en conjunto nos proporcionan el estado termoquímico de la mezcla reactiva modelada. Los espacios muestrales, así como los escalares que lo componen son expresados a continuación:

$$\underline{\psi} = \underline{\Phi}^i \quad ; \quad \underline{\Phi}^i = \Phi_\alpha^i = \Phi_1^i, \Phi_2^i, \Phi_3^i, \dots, \Phi_N^i \quad ; \quad i = 1, N_p \quad (4.15)$$

Siendo el subíndice i la cantidad de partículas en las que se es dividida la función del escalar α y el número total de escalares es denotado por N . La ventaja del método de Monte Carlo es que su exactitud no depende de la cantidad de escalares que se use para modelar el proceso, ésta solo depende de la cantidad de partículas que se utilice, haciendo que la solución sea cada vez más exacta cuando el número de partículas tiene a infinito, $N \rightarrow \infty$, por lo que el error del método decrece con una

relación de $N_p^{-\frac{1}{2}}$ haciendo que la simulación de las funciones de densidad de probabilidad se acerquen más a la realidad mientras mayor sean las partículas usadas para representarlas; sin embargo, la cantidad de éstas es limitada por los recursos computacionales. Ya que la evolución de las FDP conjuntas están descritas por medio de una ecuación de transporte visto anteriormente, el método de volúmenes finitos es utilizado para discretizar el tiempo y el espacio de dicha ecuación y en cada uno de los elementos espaciales discretos la FDP es conformada por un conjunto de partículas. La evolución debido a los fenómenos convectivos, difusivos y las reacciones químicas son desarrollados secuencialmente por medio de la técnica de paso fraccionado.

4.5 Monte Carlo para la FDP

La ecuación de transporte para FDP conjunta puede ser discretizada en el espacio físico y temporal mediante el método de volúmenes finitos. Así la ecuación discreta para la FDP resultante se muestra a continuación:

$$a_T(\tilde{P}_P - \tilde{P}_T) = a_e(\tilde{P}_E - \tilde{P}_T) + a_w(\tilde{P}_W - \tilde{P}_T) + a_n(\tilde{P}_N - \tilde{P}_T) + a_s(\tilde{P}_S - \tilde{P}_T) + a_h(\tilde{P}_H - \tilde{P}_T) + a_l(\tilde{P}_L - \tilde{P}_T) + V_P M_T + V_P S_T \quad (4.16)$$

donde P_P y P_T representa la FDP en el nodo P al final e inicio del paso temporal respectivamente, los términos a representan los efectos difusivos-convectivos. M_T la mezcla molecular, S_T el termino fuente y V_P el volumen de la celda bajo análisis.

$$\tilde{P}_P = \frac{1}{a_T} \left[\sum a_i(\tilde{P}_I - \tilde{P}_T) + a_T \tilde{P}_T + V_P(M_T - S_T) \right] \quad (4.17)$$

Para poder llevar a cabo la técnica de pasos fraccionados es necesario definir los siguientes operadores:

- Identidad, definida con ζ la cual al aplicarse a la FDP da como resultado la misma FDP:

$$\zeta \tilde{P}_T = \tilde{P}_T \quad (4.18)$$

- Transporte difusivo-convectivo en la dirección x , definido como φ_x tal que $\varphi_x \tilde{P}_T = \frac{a_e}{a_T}(\tilde{P}_E - \tilde{P}_T) + \frac{a_w}{a_T}(\tilde{P}_W - \tilde{P}_T)$
- Transporte difusivo-convectivo en la dirección y , definido como φ_y tal que $\varphi_y \tilde{P}_T = \frac{a_n}{a_T}(\tilde{P}_N - \tilde{P}_T) + \frac{a_s}{a_T}(\tilde{P}_S - \tilde{P}_T)$
- Transporte difusivo-convectivo en la dirección z , definido como φ_z tal que $\varphi_z \tilde{P}_T = \frac{a_h}{a_T}(\tilde{P}_H - \tilde{P}_T) + \frac{a_l}{a_T}(\tilde{P}_L - \tilde{P}_T)$
- Mezcla, definida con μ que al aplicarse a \tilde{P} nos proporciona el termino de mezcla molecular tal que: $\mu \tilde{P} = \frac{V_P}{a_T} M$
- Fuente, definido con δ que al aplicarse a P se obtiene el término fuente tal que: $\delta \tilde{P} = \frac{V_P}{a_T} S$

Al sustituir cada uno de estos términos en la ecuación discreta de la FDP se obtiene:

$$\tilde{P}_P = \zeta + \varphi_x + \varphi_y + \varphi_z + \mu + \delta \quad (4.19)$$

En esta última ecuación (4.19), el orden de la discretización espacial, la cual se da para los términos de transporte difusivo-convectivo φ , dependerá del esquema utilizado para dicha discretización. Los términos ζ, μ, δ son de orden Δt en el tiempo

ya que todos se encuentran en función de $\frac{a_i}{a_T}$ y $\frac{v_P}{a_T}$ por lo que la ecuación anterior se puede factorizar con un operador de orden $O(\Delta t^2)$ tal como se presenta a continuación:

$$\tilde{P}_p = (\zeta + \mu)(\zeta + \sigma)(\zeta + \varphi_y)(\zeta + \varphi_z)\tilde{P}_p + O(\Delta t^2) \quad (4.20)$$

La ecuación (4.20) representa el principio del paso fraccionado utilizado para hacer evolucionar la FDP conjunta de un tiempo t a un tiempo $t + \Delta t$, paso que se van aplicando secuencialmente y la aplicación de cada uno de estos operadores actúan sobre el que anteriormente es utilizado. Esta técnica es aplicada a los elementos en los que es discretizada la FDP conjunta, partículas, comenzando con el transporte de las partículas a través de los elementos discretos del dominio debido a los fenómenos convectivos y difusivos presentes en el flujo, continuando con los procesos que se dan en cada una de las celdas, procesos locales, que son los de mezcla molecular y las reacciones que se dan entre los elementos químicos que componen la mezcla reactiva.

4.6 Técnica del paso fraccionado (reglas de la simulación)

Los factores de la ecuación anterior son aplicados a la FDP conjunta ya discretizada en N_p elementos para la dirección x , haciéndose de manera análoga para las otras dos direcciones restantes.

Paso fraccionado para el transporte en dirección X

Las reglas de la simulación para el transporte son aplicados a una FDP en el nodo P , la cual se encuentra entre el inicio del paso temporal t y su siguiente paso de tiempo $t + \Delta t$, cuando el paso de transporte ha terminado, $t + t_\varphi$, $t < t_\varphi < t + \Delta t$, en la dirección x , $P_{T,x}$, tal como se presenta en la siguiente ecuación:

$$P_{T,x} = (\zeta + \varphi_x)\tilde{P}_T \quad (4.21)$$

Siendo \tilde{P}_T la FDP al inicio del paso fraccionado de mezcla. Al desarrollar esta ecuación se tiene como resultado:

$$P_{T,x} = \tilde{P}_T + \frac{a_e}{a_T}(\tilde{P}_E - \tilde{P}_T) + \frac{a_w}{a_T}(\tilde{P}_W - \tilde{P}_T) = \frac{a_e}{a_T}(\tilde{P}_E) + \frac{a_w}{a_T}(\tilde{P}_W) + \left(1 - \frac{a_e}{a_T} - \frac{a_w}{a_T}\right)\tilde{P}_T \quad (4.22)$$

En la ecuación (4.22) se puede apreciar los efectos difusivos-convectivos en dirección x ; esto debido a que las FDP \tilde{P}_E , \tilde{P}_W y \tilde{P}_T se encuentran compuestos por

partículas; el transporte de la cantidad de partículas que son intercambiadas para evolucionar la FDP, está en función del número total de partículas que la componen así como la relación de los coeficiente a_i .

- $N \frac{a_e}{a_T}$ la cantidad de partículas elegidas de la cara Este.
- $N \frac{a_w}{a_T}$ la cantidad de partículas elegidas de la cara Oeste.
- $N \left(1 - \frac{a_e}{a_T} - \frac{a_w}{a_T}\right)$ las partículas restantes que componen a las FDP al inicio del paso temporal, P_T .

donde dicha elección tiene que cumplir con:

$$N \frac{a_e}{a_T} + N \frac{a_w}{a_T} \leq N \quad (4.23)$$

además, el paso de tiempo queda en función de los coeficientes de transporte:

$$\Delta t = \frac{\rho_T V_P}{a_w + a_e} \quad (4.24)$$

Cabe destacar que el paso de tiempo presentado es igual a la restricción que se tiene para el método de Volúmenes Finitos. Una vez determinada la cantidad de partículas que se tomaran de cada una de las celdas, éstas son elegidas aleatoriamente para ser copiadas sin reemplazo en la función discreta bajo análisis del nodo P . El desarrollo para las dos direcciones restantes se aliza análogamente a la presentada para la dirección x . Para asegurar la aleatoriedad de la elección de las partículas en cada uno de los pasos fraccionados que se desarrollen durante la simulación se realiza el siguiente proceso:

- Las partículas, que se sustituirán en la FDP del nodo bajo análisis P , en los nodos vecinos son elegidos a partir de una posición aleatoria.
- Las partículas que serán reemplazadas en la FDP discreta del nodo bajo análisis P son elegidos secuencialmente desde la primera.
- Al final del paso fraccionado se eligen partículas aleatoriamente las cuales intercambiaran sus valores, asegurando la aleatoriedad del proceso para el siguiente para fraccionado (proceso de remoción).

Paso fraccionado de mezcla molecular

Al igual que en el caso anterior el paso de fraccionado de mezcla molecular se presenta entre el inicio y el final del paso de tiempo, una vez que ha terminado el paso fraccionado de mezcla molecular, el cual se encuentra definido mediante la fusión:

$$P_{T,\mu} = (\zeta + \mu)P_{T,\varphi_i} \quad (4.25)$$

donde $P_{T,\mu}$ es la FDP al final de paso fraccionado de mezclas y P_{T,φ_i} , la FDP que se obtuvo después de haber sido aplicado el paso fraccionado de transporte. La influencia de la mezcla molecular en un proceso de combustión, así como la forma de modelar ésta son temas ampliamente discutidos en la literatura. En el proceso de mezcla molecular, para una función de densidad de probabilidad discreta, la interacción de las partículas que componen la FDP en el nodo P solo se da entre ellas y no con las que componen la FDP de los nodos adyacentes de tal manera que el proceso se da localmente. La mayoría de los modelos de mezcla molecular requieren de un tiempo característico de disipación, debido al uso del modelo $\tilde{\kappa} - \tilde{\epsilon}$ RNG para el cierre de las ecuaciones en el presente trabajo, dicho tiempo de disipación. Dicho tiempo nos representa la intensidad con la que la mezcla molecular que se aplica a cada una de las partículas de la FDP y cuya forma discreta es la siguiente:

$$\Phi_{\alpha,\mu}^i = \Phi_{\alpha,\varphi_i}^i + \frac{1}{2}(\Phi_{\alpha,\varphi_i}^i - \tilde{\Phi}_{\alpha,\varphi_i}) \quad (4.26)$$

Siendo i las partículas que componen la FDP, α el escalar que se encuentra afectado por la mezcla, $\Phi_{\alpha,\mu}^i$ el escalar al final del paso fraccionado de mezcla, $\Phi_{\alpha,\varphi_i}^i$ el escalar al final del paso fraccionado de transporte y $\tilde{\Phi}_{\alpha,\varphi_i}$ el valor esperado del conjunto de partículas para el escalar bajo análisis.

Paso fraccionado de reacción química

Una vez realizado el paso fraccionado para el transporte y la mezcla molecular se continua con el paso fraccionado de reacción química, el cual es expresado como:

$$\tilde{P}_{T,\delta} = (\zeta + \delta)\tilde{P}_{T,\mu} \quad (4.27)$$

El termino de reacción química es cerrado, por lo que no necesita ningún modelo para ser implementado, además éste paso fraccionado también es un proceso que se da localmente y se realiza en cada una de las partículas que componen la FDP (al igual que el paso fraccionado aplicado anterior a éste) con la siguiente ecuación:

$$\Phi_{\alpha,\delta}^i = \Phi_{\alpha,\mu}^i + \dot{\omega}(\Phi_{\alpha,\mu}^i)\Delta t \quad (4.28)$$

donde $\Phi_{\alpha,\delta}^i$ es el valor del escalar α en la partícula i al final del paso fraccionado de reacción química, $\Phi_{\alpha,\mu}^i$ el escalar posterior al paso fraccionado de mezcla y antes

de que termine el paso fraccionado de reacción química y $\dot{\omega}$ la tasa de dicha reacción.

Con este último paso ya se ha desarrollado completamente la FDP para un paso de tiempo Δt y es posible obtener la densidad de la mezcla por medio del estado termoquímico de la mezcla reactiva que está determinada por la FDP discreta para cada uno de los escalares como se presenta en la siguiente ecuación:

$$\bar{\rho} = \left(\sum_{i=1}^N \frac{1}{\Phi_{\alpha}^i} \right)^{-1} \quad (4.29)$$

4.7 Monte Carlo – Volumen Finito

A pesar de que el modelo desarrollado es de naturaleza estacionaria, la evolución de la FDP es transitoria ya que los pasos fraccionados de transporte, mezcla molecular y reacción química se desarrollan a lo largo de un paso de tiempo, por lo que la solución por medio de volúmenes finitos también debe de ser de naturaleza transitoria. Las dos soluciones mencionadas se relacionan en el cálculo del paso fraccionado de transporte ya que ésta se encuentra en función de coeficientes de transferencia de masas debidos a la convección y a la difusión que se obtienen de la solución de volúmenes finitos; además, el tiempo característico de disipación utilizado para el cálculo del paso fraccionado de mezcla molecular se encuentra en función de la energía cinética turbulenta, $\bar{\kappa}$ y su disipación, $\bar{\epsilon}$. Junto con estos dos pasos fraccionados que necesitan información de la solución de la aerodinámica, también se tiene el cálculo del paso temporal Δt , el cual se obtiene mediante la densidad $\bar{\rho}$, calculada a partir del estado termoquímico determinado por la composición de la mezcla, ya los coeficientes de transporte de masa.

5 Simulación de una llama de difusión inversa

La IDF analizada en el presente trabajo se obtiene del estudio experimental de (Dong et al., 2007). El IDF es generado por un quemador CAP compuesto por un inyector central con un diámetro (D) de 6 [mm], por donde se inyecta aire ambiente rodeado por 12 inyectores con diámetros (d) de 2.4 [mm], por el que, se inyecta butano con un número de Reynolds de 8000 para el aire y 475.5 para el butano, que se obtienen a través del diámetro correspondiente a cada boquilla. La distancia entre el inyector central (aire) y cada centro de los inyectores de combustible (butano) es de 8 [mm], y la razón de equivalencia es 1.8.

En estas condiciones y con base en los resultados experimentales descritos, se genera una llama con doble estructura azul con una triple capa. Esto tiene dos partes: una llama difusiva en la base y una llama de premezcla en la parte superior, a la que se une un cuello de llama.

Para resolver la llama, se creó una simulación con un dominio tri-dimensional con coordenadas cilíndricas que cubre un doceavo del inyector que está siendo estudiado. Se determinó estudiar un doceavo debido a la condición de simetría que se tiene en los resultados experimentales. En la parte superior en dirección radial se considera una frontera de entrada o salida la cual depende del gradiente de presión que se presente antes de esta para elegir entre una u otra, en la frontera en dirección axial se tiene una condición de salida y las fronteras restantes tienen una condición de deslizamiento, además de las entradas que se ubican en las boquillas de los reactantes.

Como se muestra en la Figura 8, el doceavo del quemador tiene una fracción del inyector de aire, y un inyector de combustible butano. Las dimensiones del dominio son 0.25m, 0.6m y 0.5243m en las direcciones normal (y), radial (r), y angular (θ) respectivamente como se muestra en la siguiente imagen.

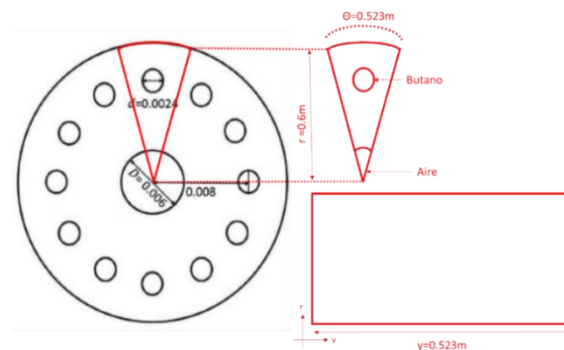


Figura 8: Fracción del quemador a simular

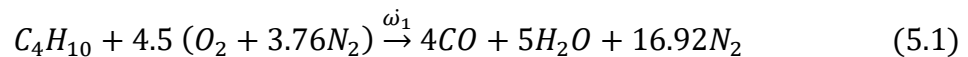
Para la simulación se utilizó una presión de referencia de 1 bar y una temperatura de referencia de 288.15 K. La velocidad de inyección del aire es de 19.2 m/s con un número de Reynolds de 8000, mientras que la velocidad de inyección del Butano es de 0.64 m/s con una razón de equivalencia de 1.8.

La presión de salida en el dominio es de cero. Las condiciones de frontera en la dirección radial se consideraron como adiabáticas, sin fricción, e impermeables al flujo; esto con el fin de considerar la condición simétrica en los resultados.

La complejidad de modelar la llama IDF radica en la naturaleza de ésta ya que al tener una zona de baja reacción, en la que se tiene una llama de tipo difusiva en régimen laminar (Barakat et al., 2013), hace poco factible la aplicación de modelos numéricos como el Eddy Break Up, el cual considera a la velocidad de mezcla debida a la turbulencia como único factor relevante en el proceso de combustión, además, tampoco es útil solo considerar la cinética química en el modelo ya que la llama superior es de naturaleza premezclada en régimen turbulento, por lo que el modelo y su solución como anteriormente fueron descritos, son necesarios ya que se consideran ambos factores para que se presente el proceso de combustión, así como la interacción entre éstos mismos.

5.1 Solución al Mecanismo global de reacción

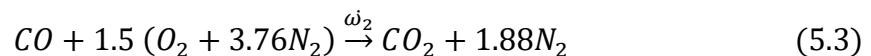
El mecanismo utilizado para la simulación es en el que está conformado de dos pasos, en el primer paso de reacción es aquel en el que el oxidante y el combustible reaccionan teniendo como primeros productos el monóxido de carbón, vapor de agua y nitrógeno restante.



En la que ω_1 es la tasa de reacion con la que los reactantes pasan a ser parte de los productos, dicha tasa está definida mediante la siguiente ecuación:

$$\omega_1 = A \exp\left(-\frac{E_a}{R_u * T}\right) [C_4H_{10}]^a [O_2]^b \quad (5.2)$$

En el segundo paso, el monóxido de carbono reacciona con el aire formando dióxido de carbono.



En la que $\dot{\omega}_2$, la tasa de reacción, se define como:

$$\dot{\omega}_2 = A \exp^{-\frac{E_a}{R_u * T}} [C_4H_{10}]^a [O_2]^b \quad (5.4)$$

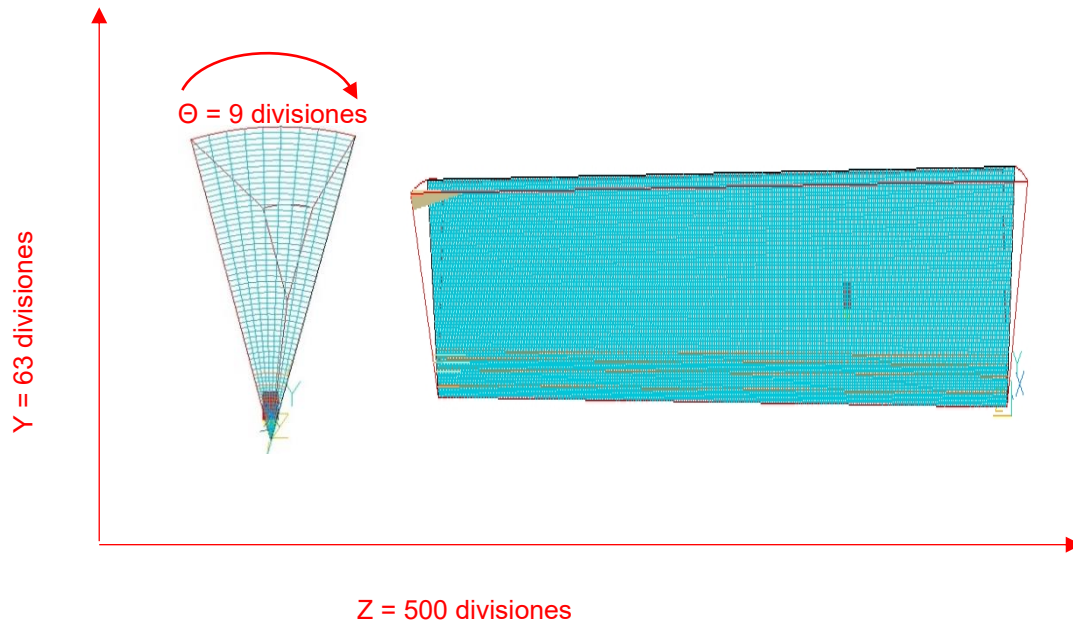
Donde los coeficientes de la variable pre exponencial A, los exponentes a y b, así como la energía de activación E_a son:

Tabla 2: Valores constantes en la tasa de reacción de combustión (Westbrook y Dryer, 1984)

Constante	Paso 1	Paso 2
A	8.8×10^{11}	4.778×10^7
E_a	1.255×10^8	6.698×10^7
a	0.1	0.3
b	1.65	0.5

5.2 Mallado

Como lo muestra la figura 9, se tiene una malla con divisiones de 9 celdas para la dirección angular, 65 divisiones para la dirección radial y 500 divisiones para la dirección normal. Se determinó que esta cantidad de divisiones era la suficiente para obtener los mismos resultados a partir de esta cantidad.



Dentro de este mallado se encuentra las entradas de Aire y combustible butano para simular el estudio experimental tal como se mencionó anteriormente.

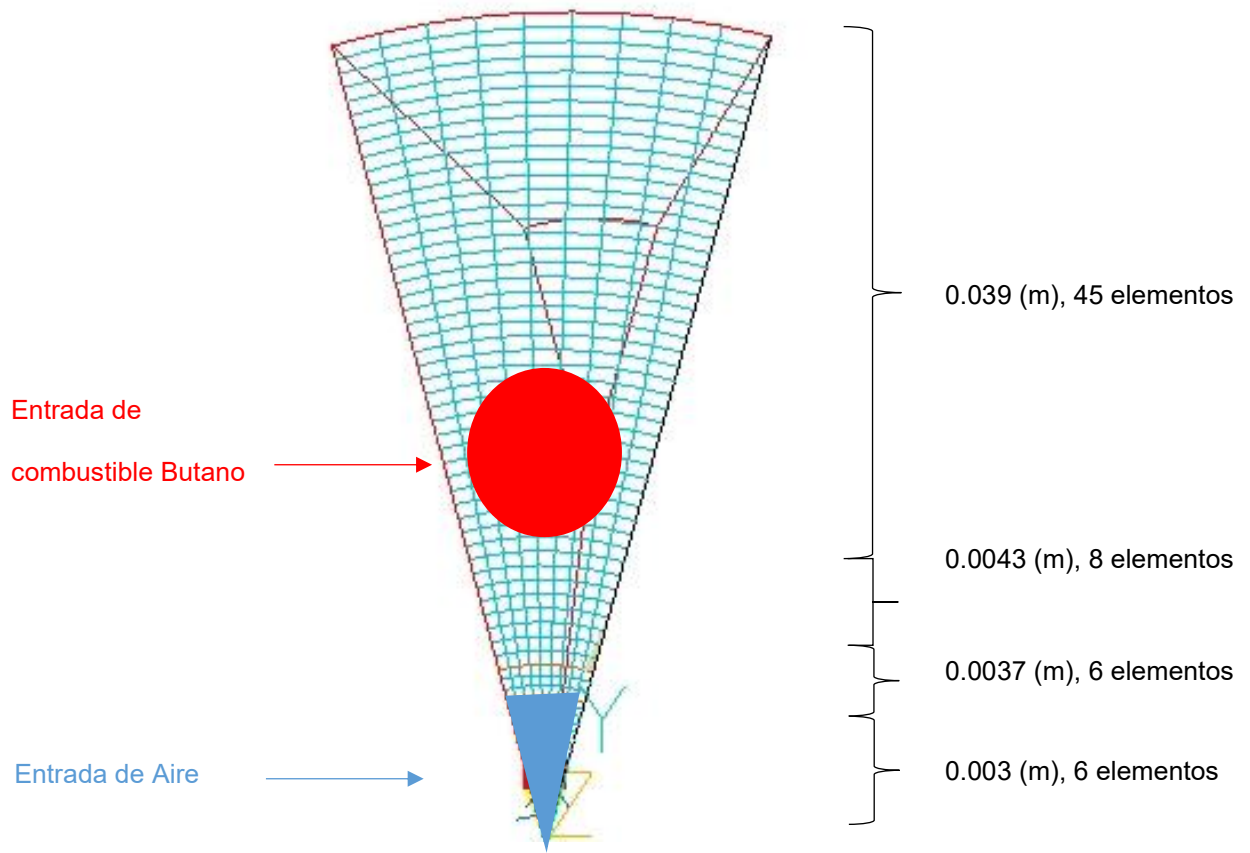


Figura 10: Dimensiones del Mallado

5.3 Solución al Modelado NOx

De acuerdo a estudio realizado por (Jiang et al., 2006) el mejor resultado para el modelo atómico del O se puede describir como:

$$[O] = 12.2T^{0.52} \exp\left(\frac{-29330}{T}\right) [O_2]^{0.5} \quad (5.5)$$

Por lo tanto, la tasa de formación de NO es:

$$\frac{d[NO]}{dt} = \frac{24.4T^{0.52} \exp\left(\frac{-29330}{T}\right) (k_1 k_2 [O_2] [N_2] - k_{-1} k_{-2} [NO]^2) [O_2]^{0.5}}{k_2 [O_2] + k_{-1} [NO]} \quad (5.6)$$

donde los coeficientes k los define como:

$$k_1 = 1.81 \times 10^8 \exp\left(\frac{-38300}{T}\right) \quad (5.7a)$$

$$k_{-1} = 4.28 \times 10^7 \exp\left(\frac{-790}{T}\right) \quad (5.7b)$$

$$k_2 = 9.03 \times 10^3 \exp\left(\frac{-3270}{T}\right) \quad (5.7c)$$

$$k_{-2} = 0 \quad (5.7d)$$

La ecuación (5.5) y los valores de k (5.7) son las utilizadas para simular la formación de NOx en esta tesis.

6 Resultados

Temperatura

El perfil de temperatura obtenido en la simulación se comparó con los resultados experimentales presentados por (Dong et al., 2007). Se utilizó la variable de la temperatura como forma de validar el modelo numérico debido a que ésta solo depende de la composición de la mezcla presente en la llama y la generación o desaparición de los elementos químicos en la llama dependen de la temperatura. Aunado a esto, el trabajo experimental provee una mayor cantidad de información respecto a la temperatura, en relación con el resto de las variables termodinámicas.

La validación de los resultados obtenidos es mediante la comparación de la distribución de la temperatura de la llama obtenida en un plano al centro de los inyectores de aire y butano, comparándolos con la misma imagen obtenida de los resultados mostrados por (Dong et al., 2007) como se muestra en la Figura 11. Los contornos de la temperatura son presentados en regiones, tal como se presentan en el estudio experimental, ejemplificando que el modelo numérico cualitativamente representa la estructura térmica de la llama, teniendo las mismas zonas descritas por los resultados experimentales, tal como son la zona de mezcla, la zona de reacción y la zona post-llama.

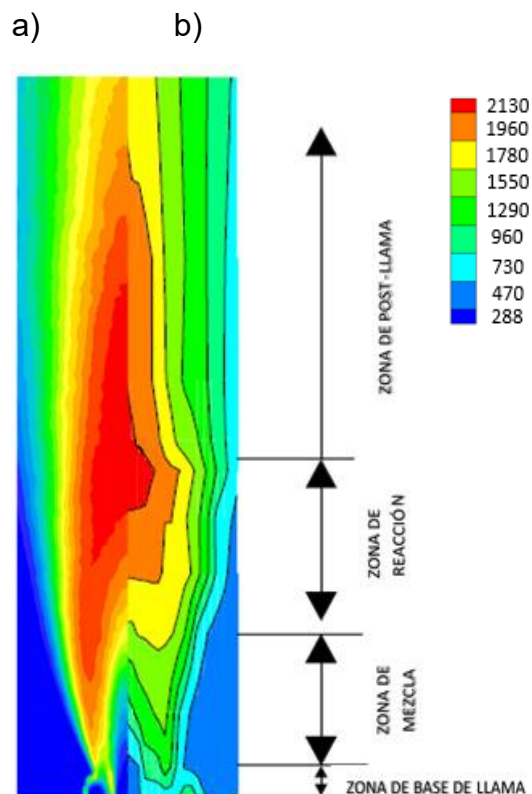


Figura 11: Comparación de contornos de temperatura. a) Llama simulada y b) Llama experimental (Dong et al., 2011)

En la llama se identifican 4 zonas principales:

- Zona de base de la llama: Es el inicio de la llama, donde se encuentra la salida de los inyectores de combustible y de aire. Éstos se empiezan a mezclar por lo que se tienen zonas de bajas temperaturas entre 400-700K.
- Zona de Mezcla: El aire y el combustible se mezclaron y está comenzando la combustión. En esta zona se tienen temperaturas más elevadas entre 900-1500K.
- Zona de reacción: Encontramos la zona de reacción en la zona media de la llama. En esta zona se tienen gases productos de la combustión y las temperaturas más elevadas entre 1700-2100K.
- Zona de post-llama: Es la zona más alta de la llama. Tenemos la disipación de los gases producto de la combustión y la propagación de la llama. Las temperaturas comienzan a bajar entre 2100-1300K.

En la Figura 12 se muestra el comportamiento de la temperatura a lo largo del eje de la llama y se comparan con los datos experimentales presentados por (Dong, Cheung, & Leung, 2007). Como se puede observar las predicciones tienen un comportamiento muy parecido al experimental con poca variación a lo largo del eje de la llama. Se tiene una variación promedio de 9%, con un rango máximo de variación del 20% en la zona de post-llama.

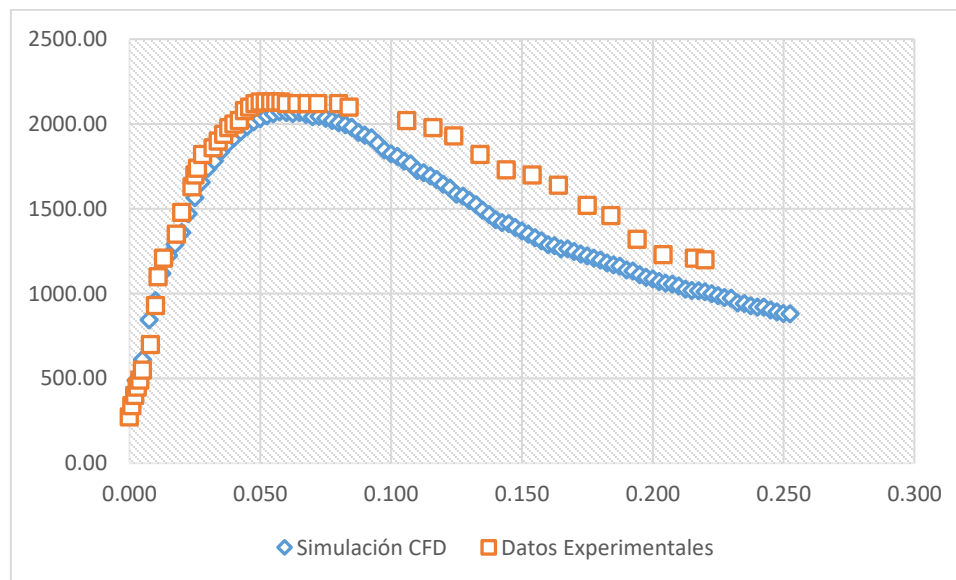


Figura 12: Distribución de la temperatura en el eje de la llama. Comparación entre predicciones y datos experimentales tomados de (Dong et al., 2007)

Campo de vectores/contornos de temperatura.

En la Figura 13 se muestran los vectores de velocidad y los contornos de temperatura en un plano central. En la zona de la base de la llama se encuentran los inyectores de combustible gas butano y el inyector central de aire; en la parte lateral de la salida del gas butano se tiene una zona de ingesta de aire atmosférico que rodea la llama. Este mismo fenómeno se puede observar a lo largo de toda la llama. También, de esta figura se puede observar que en la zona de mezcla se tienen las más altas velocidades del fluido que cuanta con temperaturas intermedias; mientras que, en la zona de reacción, donde se tienen las más altas temperaturas, se tiene velocidades con valores medios, que permite que la llama se ancle, es decir se tiene un equilibrio entre la velocidad del flujo y la de la reacción.

También, se puede observar en la Figura 13 que, en la garganta de la llama, zona de mezcla, se encuentran productos de la combustión con temperaturas intermedias.

Después, a lo largo de la zona de post llama se tienen temperaturas intermedias que disminuyen conforme se avanza en dirección axial. En la zona de altas temperaturas es donde se encuentra los gases productos de la combustión como el CO_2 , que se mostrará más adelante.

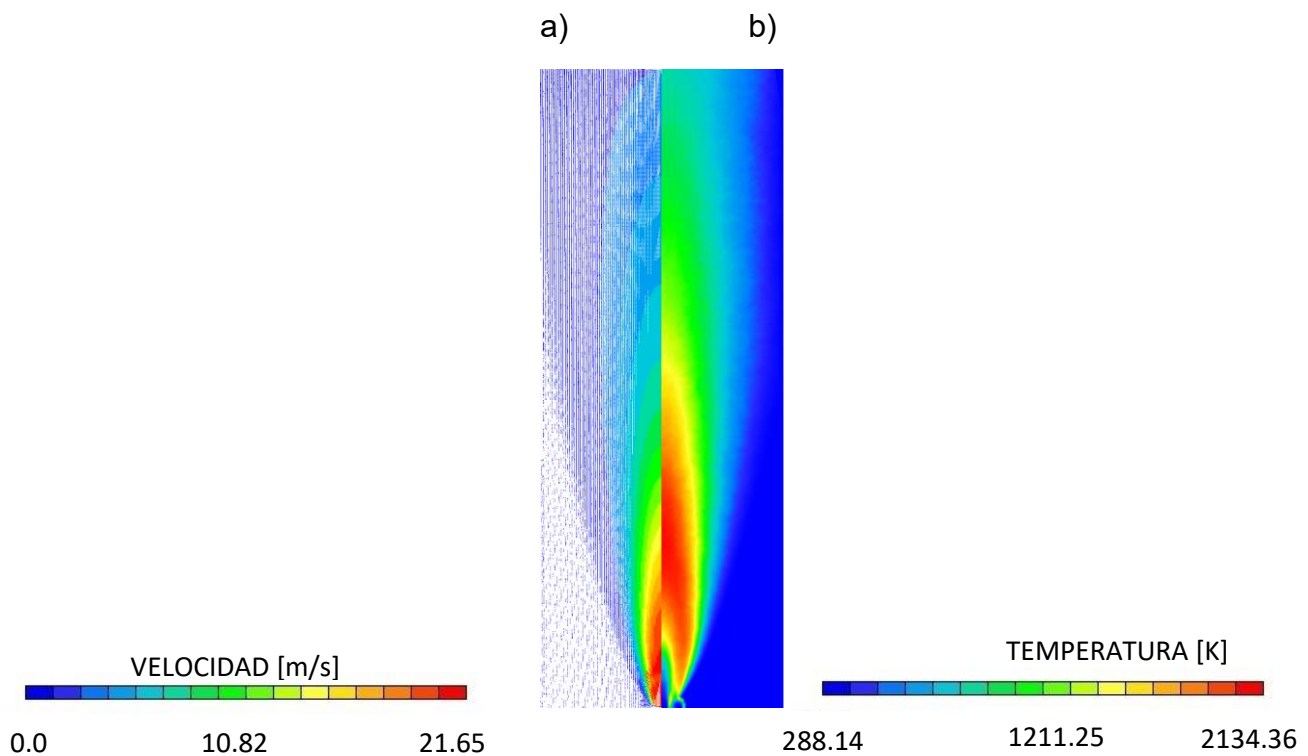


Figura 13: a) Vectores de Velocidad, y b) Contornos Temperatura.

En la Figura 14 se muestra un acercamiento a la zona de base de la llama, en la cual tenemos los inyectores, tanto de combustible butano (externo) como de aire (central); se puede observar que se forma una cúpula, en la cual se tiene una zona de baja velocidad, y, por tanto, flujo laminar. En esta misma zona, el aire circundante de las zonas laterales (aire atmosférico) es arrastrado para mezclarse con el combustible; esta ingestión de aire permite la combustión y enfriamiento de la misma. La cúpula coadyuva a estabilizar y evitar oscilaciones de la llama, es decir anclar la llama en la zona requerida.

Terminando la cúpula, en la zona de mezcla el combustible continúa oxidándose con el aire arrastrado y el aire que está siendo inyectado en la parte central, formando la garganta de la llama. La llama en esta zona es una llama de premezcla (se meten a la zona de combustión los gases ya mezclados anteriormente).

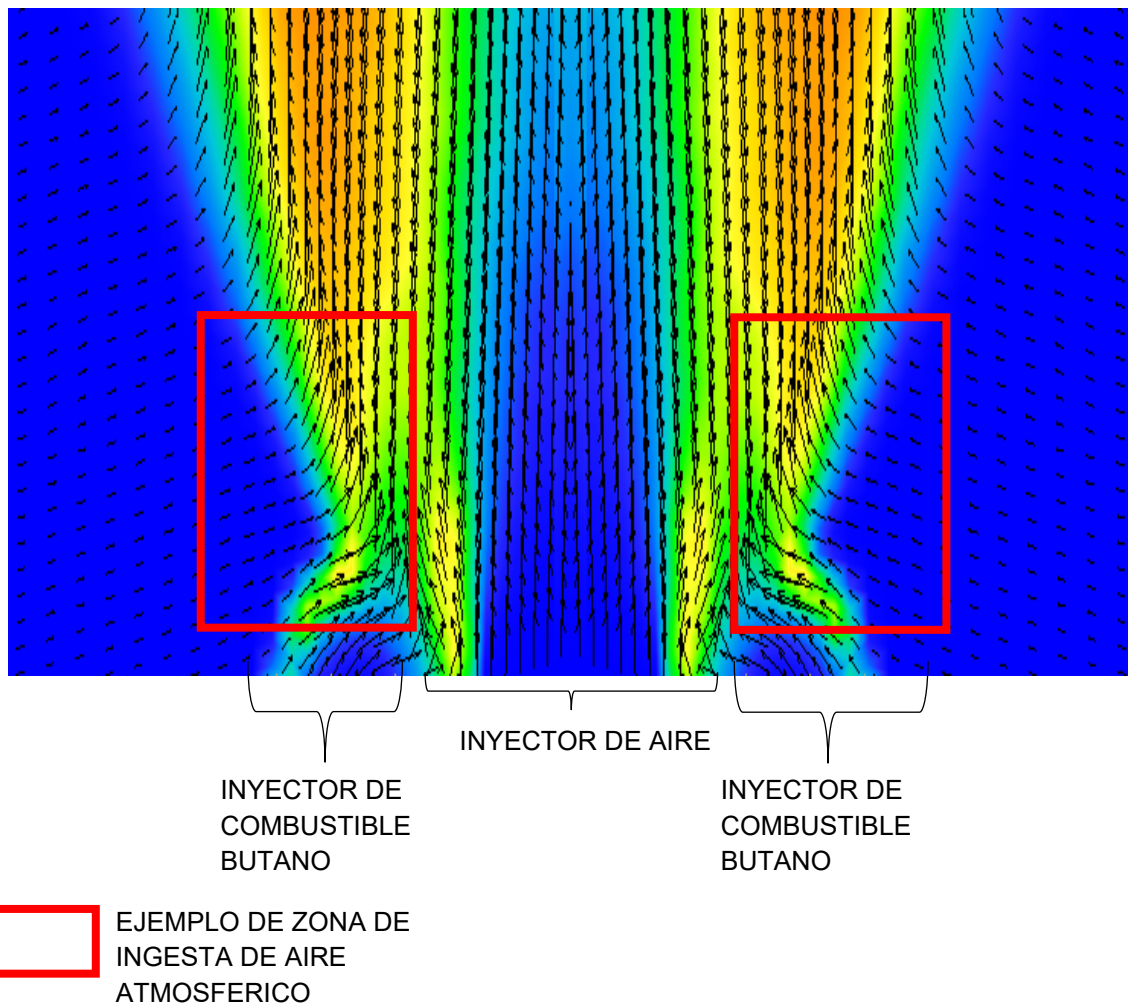


Figura 14: Zona de Base de Llama IDF

Contornos de densidad y de temperatura

En la Figura 15 se muestran los contornos de densidad y de temperatura. En la entrada del combustible, se tiene el valor máximo de la densidad (2.48 kg/m^3), valor que es mayor al del aire, que está a temperatura ambiente.

En las zonas de base de llama y mezcla, la densidad comienza a disminuir hasta llegar a un valor mínimo en la zona de reacción, donde se tienen las temperaturas más altas. En la entrada del inyector de aire, el valor de la densidad es 1.28 kg/m^3 , cuyo valor es el del aire ambiente.

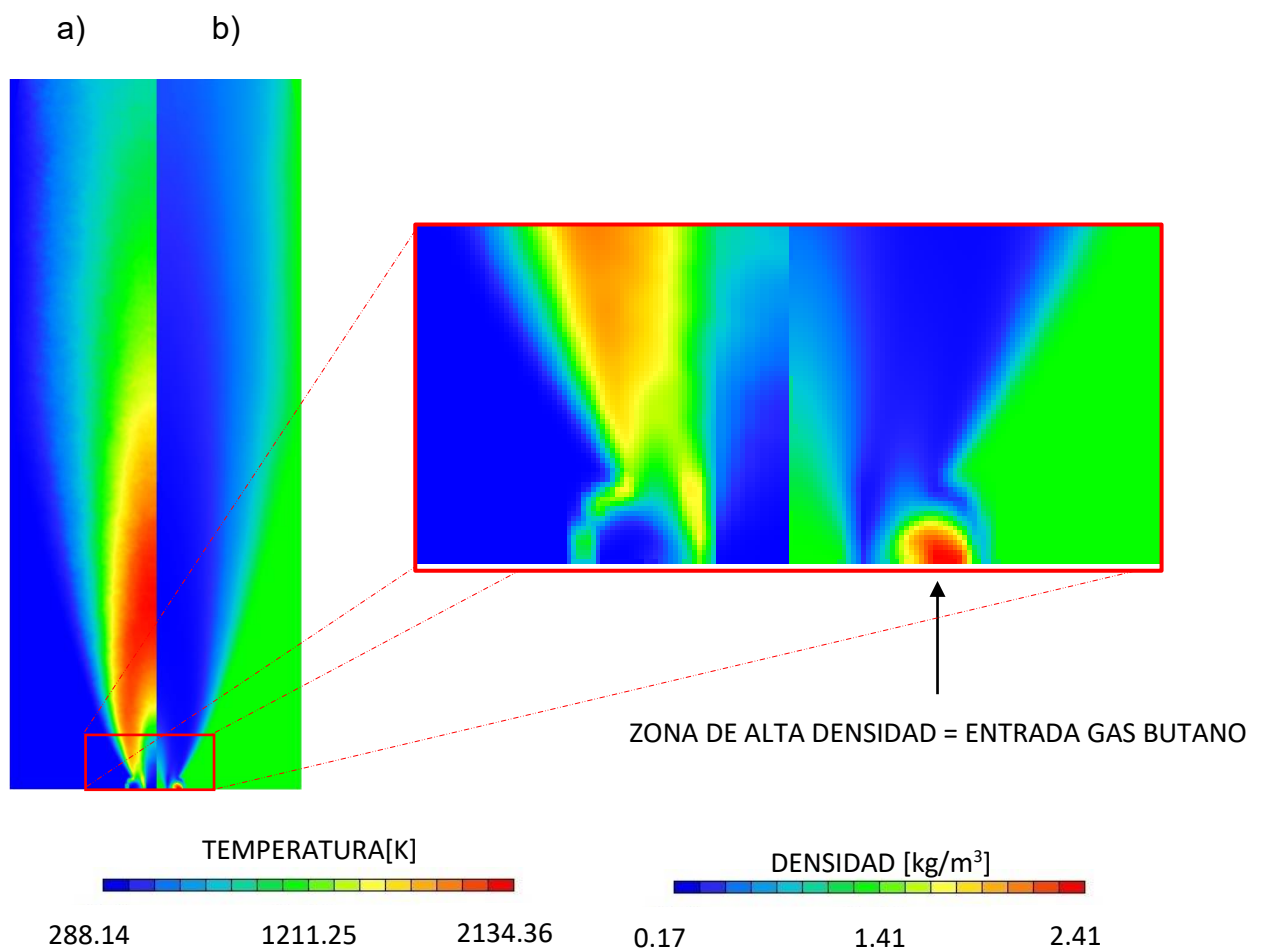


Figura 15: Contornos a) de temperatura, y b) de densidad

Contornos de fracción másica de butano

En la Figura 16 se muestran los contornos de fracción másica del gas butano. Inmediatamente sale el butano del inyector, éste comienza a disminuir su valor rápidamente por que el mismo empieza a mezclarse con el aire atmosférico de los alrededores y del chorro central, así como a reaccionar, es decir a transformarse en gases productos de la combustión, Figura 16a; alcanzando un valor de prácticamente cero. En el caso de que no se considerara la reacción del butano, es decir que, solo existiera el proceso de difusión o mezcla con el aire y de convección, la estela de propagación del combustible tendría un alcance mayor, como se muestra en la Figura 16 a.

La zona de mayor concentración en ambos casos es la zona donde se encuentra el inyector de combustible, con un valor de uno.

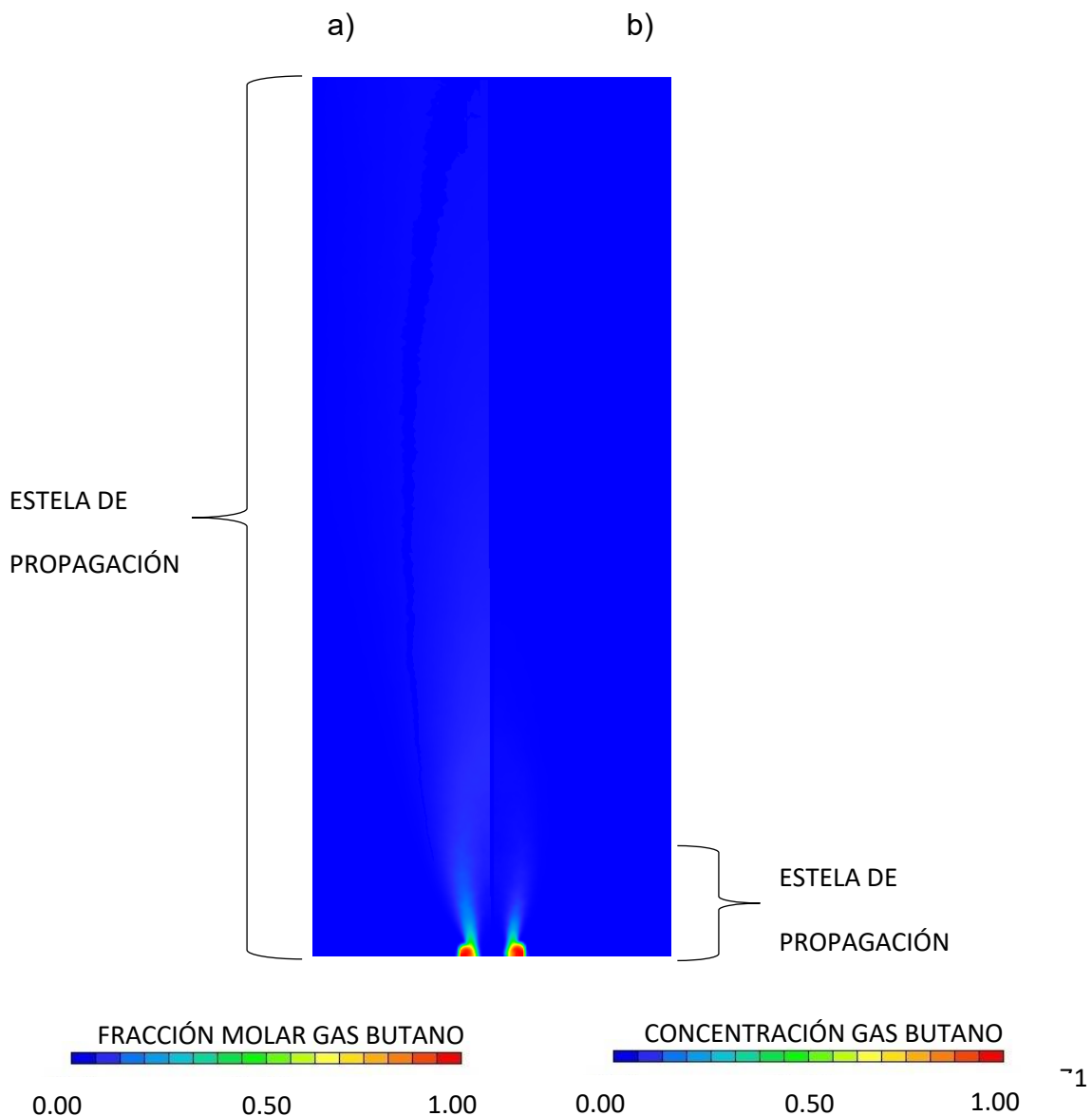


Figura 16: Contornos de Gas Butano. a) sin combustión y b) con combustión

La tasa de reacción se compara con la concentración del gas butano en la Figura 17. Se puede observar que en la zona de base llama donde se encuentra la máxima concentración del gas butano, debido a que es el punto donde se inyecta este gas, se tienen valores de tasas de reacción bajos; mientras que, los valores de la tasa de reacción más altos se tienen los en la zona más arriba, donde se encuentra la zona de reacción de la llama. Es importante mencionar que la tasa de reacción de butano está en términos negativos, lo cual señala que la reacción es de destrucción, es decir, el butano reacciona con el oxígeno para transformarse en CO_2 y H_2O pasando por CO , al estar en la zona de relativa alta temperatura. En contraste con la zona de mayor tasa de reacción, se observa que la concentración del butano ahí es mínima, debido a la reacción de destrucción, consumiéndose el butano hasta alcanzar valores mínimos en esta zona, así como en la zona de post-llama.

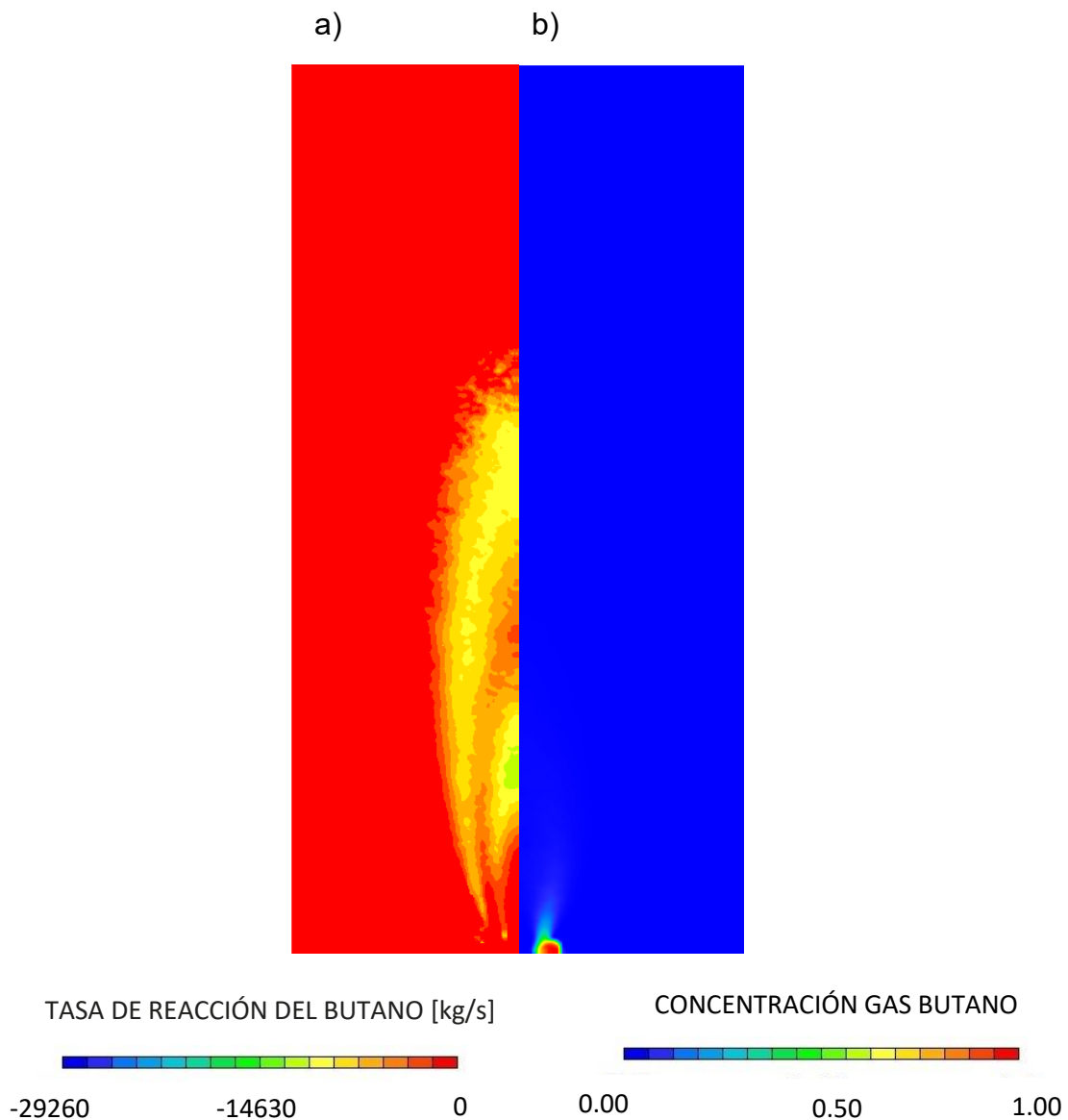


Figura 17: Contornos de a) tasa de reacción y de b) fracción másica de butano.

Contornos de fracción másica de CO y de CO₂.

En la Figura 18 se presentan los contornos de CO y CO₂. El CO es un gas producto de la primera reacción de combustión, y se toma como combustible en la segunda reacción para formar el CO₂. El CO se presenta mayoritariamente en la zona de mezcla y de reacción (zona inferior), que es en donde se forma y en donde los valores de la temperatura son intermedios (1200-1400°C), lo cual sucede también en la zona de la base de la llama. Dentro de la zona de reacción, zona de alta temperatura, el CO reacciona con el oxígeno del aire para formar CO₂. De esta manera, la zona de máxima concentración de CO₂ la encontramos en la zona más alta de la llama que es donde se tienen las más temperaturas.

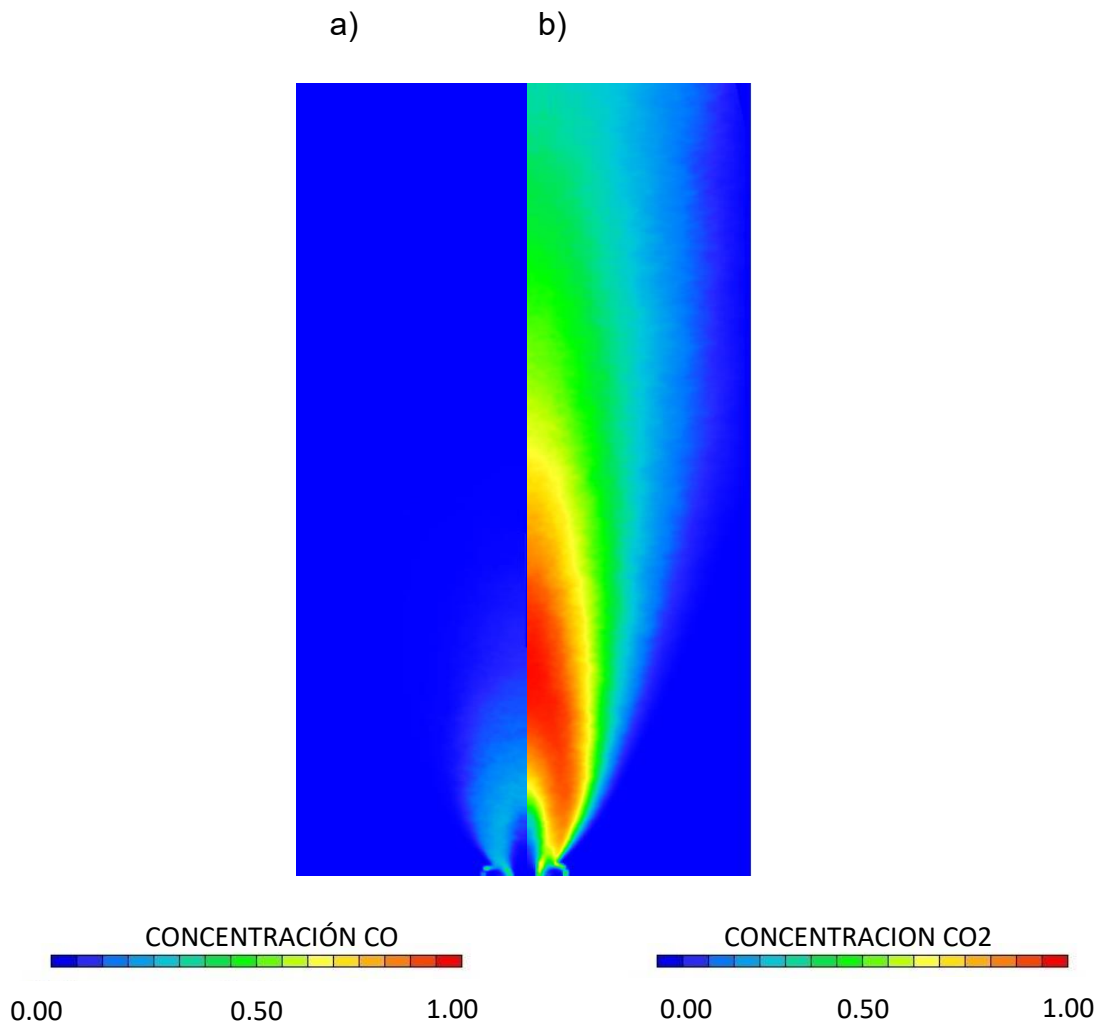


Figura 18: Contornos de fracción másica a) de CO y b) de CO₂.

Los valores de las tasas de formación y de contornos de CO se muestran en la Figura 19. Como se estableció anteriormente, la tasa de reacción del CO comienza en la misma zona de base de la llama, que es donde se tienen valores relativamente altos de fracción másica de esta especie química. También, se observa que la zona (parte inferior) de reacción de la llama presenta los valores más altos de la tasa de reacción, así como una concentración alta de CO. Cabe resaltar que los valores de la tasa de reacción son negativos, por que con esta tasa reacciona el butano con el oxidante para formar CO.

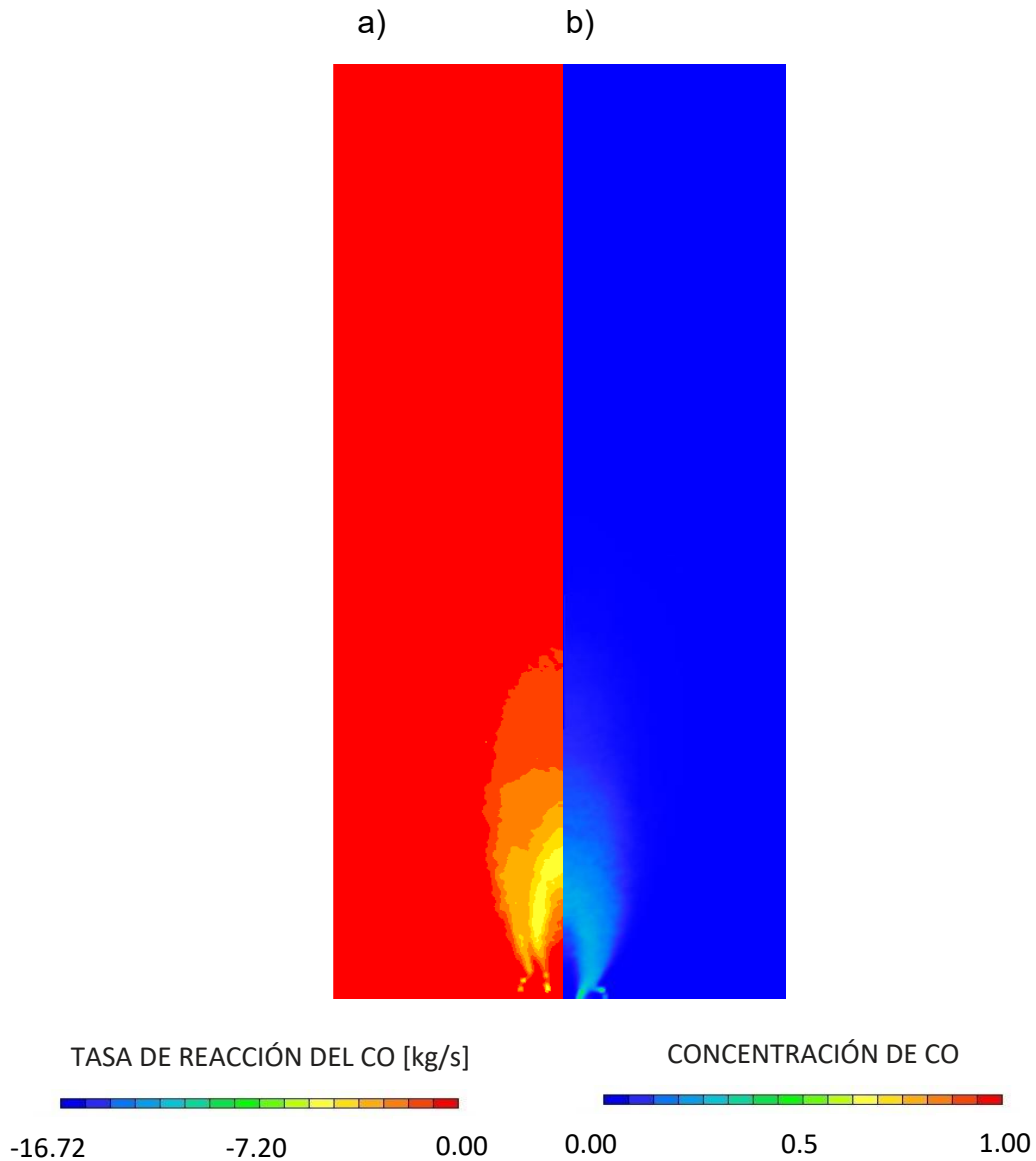


Figura 19: Contornos de Tasa a) de reacción, y b) de Concentración de CO

Tasa de Reacciones de Combustible

Sumando las tasas de reacción expuestas anteriormente (tasa de reacción del butano y del CO) se obtiene la tasa completa de reacción del proceso de combustión, Figura 20. De la misma manera en la que se presentaron las reacciones del butano y CO, la suma de la tasa de reacción es negativa debido a que ambos se consumen por la reacción de combustión de la llama. Como se puede observar en la Figura 20, los valores más altos (magnitud) de esa tasa de reacción se tienen en los alrededores de la zona de reacción. En la parte central de la zona de reacción, la tasa de reacción alcanza valores nulos, es decir, ya se consumió el combustible (butano y CO); esta zona es una zona de alta temperatura.

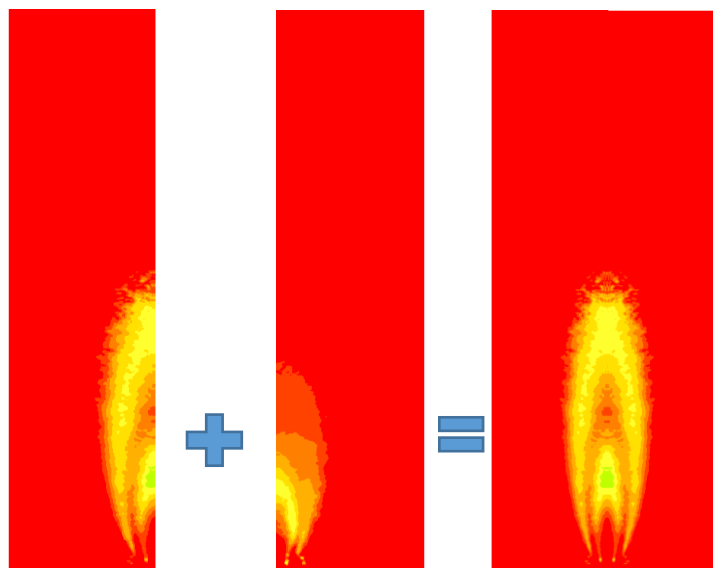


Figura 20: Contornos de Sumas de tasas de reacción de Butano y CO

Contornos de concentración de NOx.

En la Figura 21a se presenta la concentración de NOx, cuya formación es regida por la tasa de formación que es expresada por la ecuación (5.6); el mecanismo de formación de NOx, es altamente dependiente de la temperatura. En comparación con la Figura 21b que muestra el contorno de las temperaturas de la llama, las más altas concentraciones de NOx se encuentra un poco después de la zona de más alta temperatura; adicional a su formación, el NOx se transporta por el mecanismo de convección-difusión.

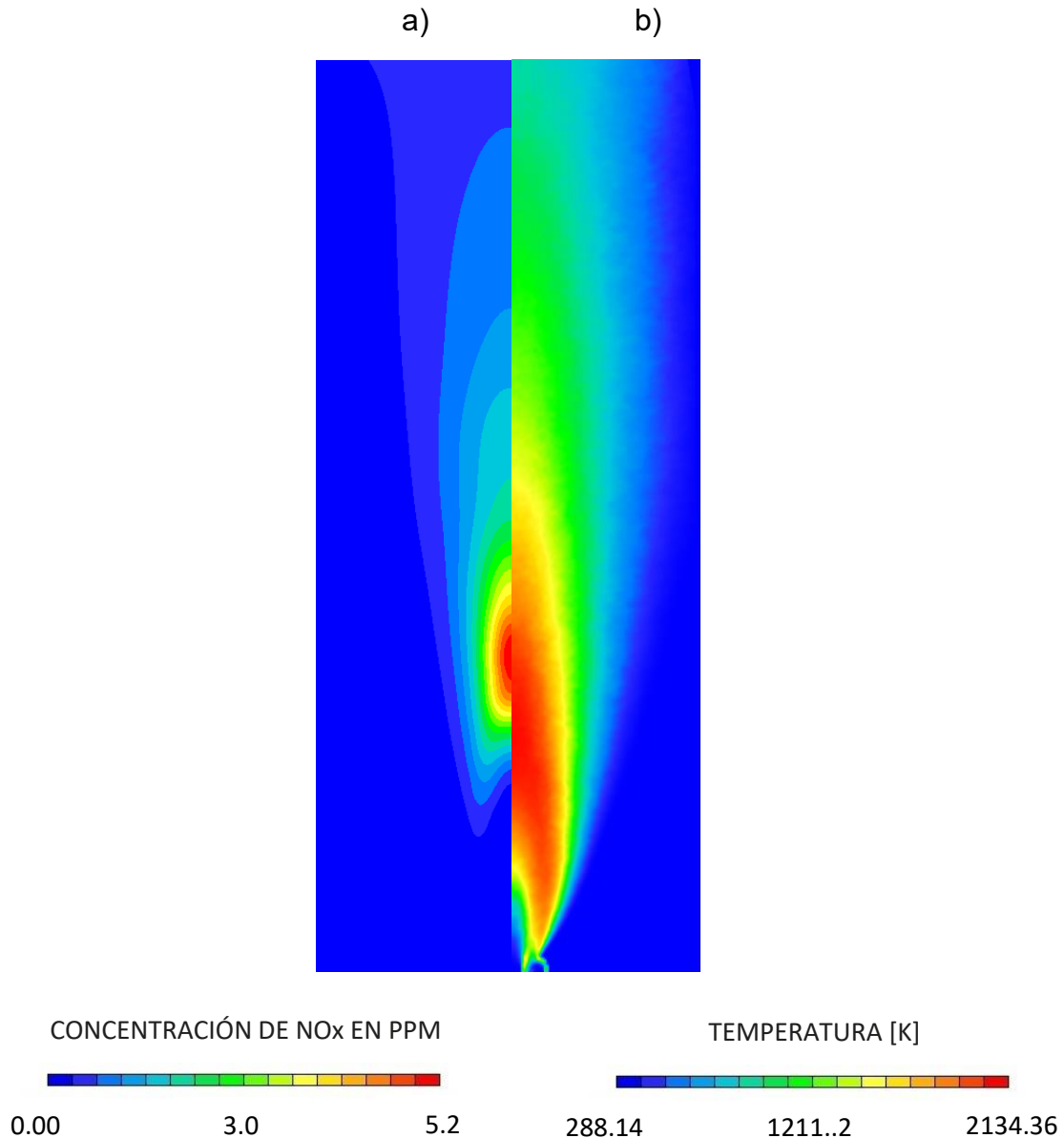


Figura 22: Contornos a) de Concentración de NOx y b) de Temperatura

En cuanto a la tasa de producción, como se muestra en la Figura 22, la zona de mayor tasa de producción de los NOx coincide con la región de la llama de más alta temperatura, parte central de la región de reacción. Conforme la temperatura es más baja, la tasa de reacción del NOx alcanza valores prácticamente nulos.

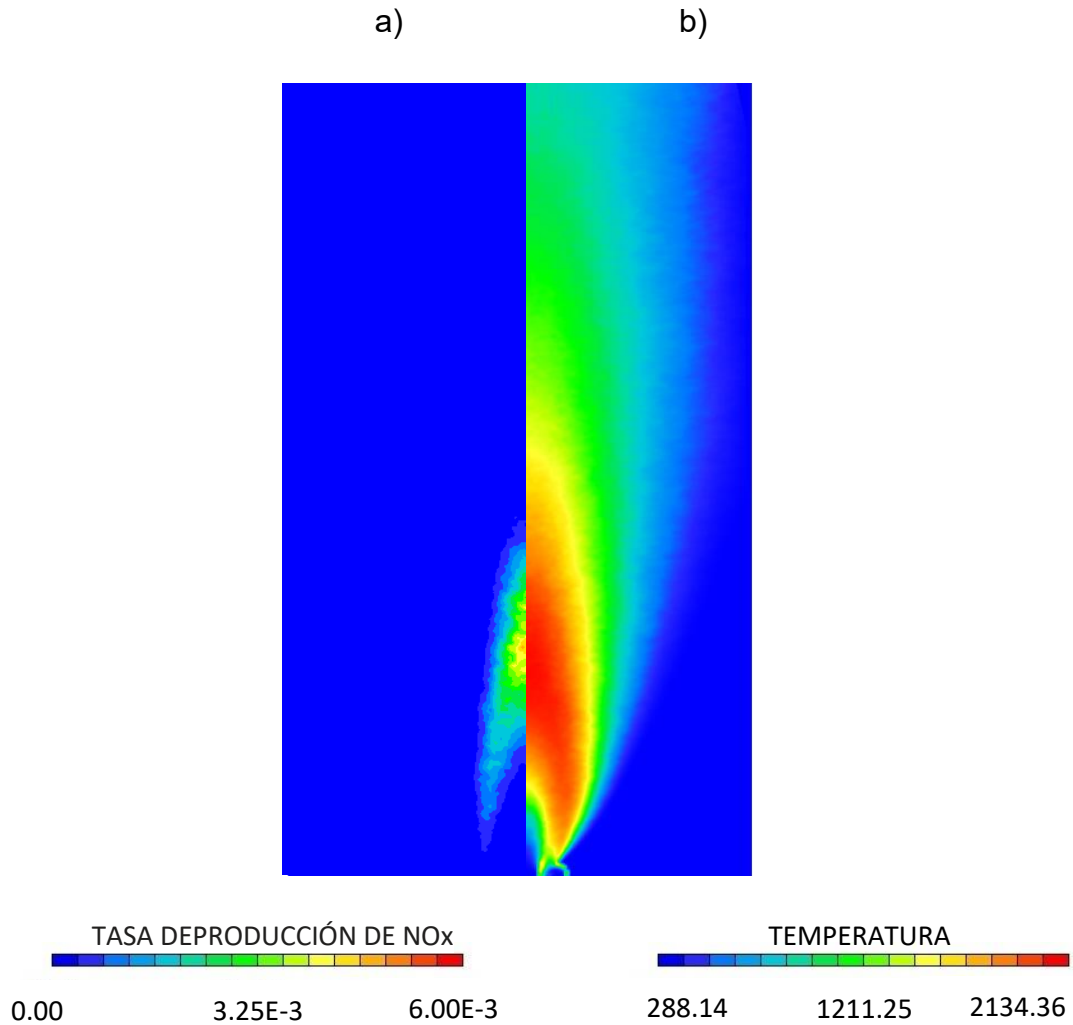


Figura 23: Contornos de a) concentración de NOx, y b) de Temperatura.

Finalmente, en la Figura 23 se muestran los contornos de concentración de NOx y su tasa de producción. De esta figura se observa, como la zona de máxima concentración de NOx se localiza un poco arriba de la zona de máxima producción, por los mecanismos de transporte de convección-difusión, incluida la turbulencia.

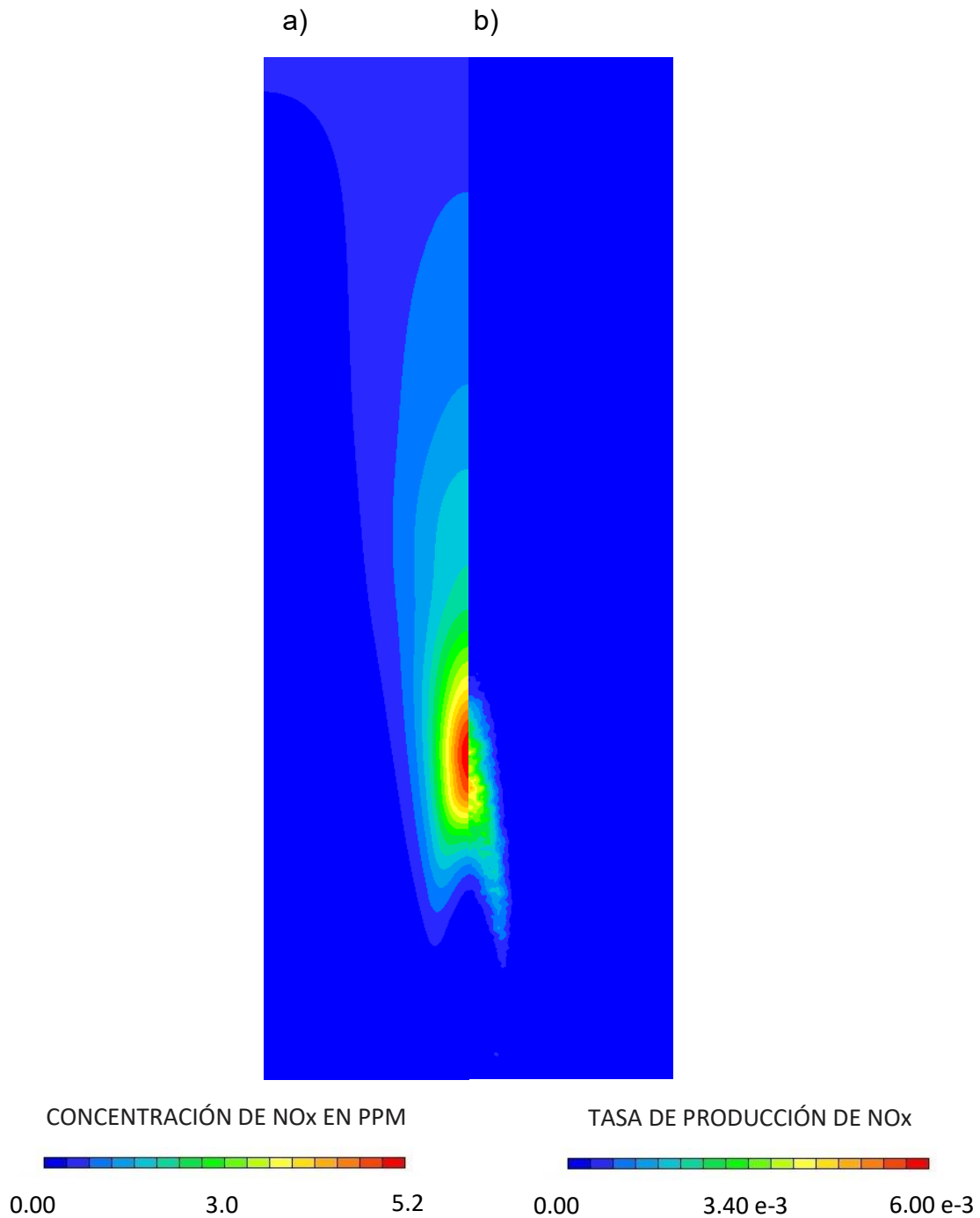


Figura 24: Contornos a) de concentración de NOx en ppm, y b) de Tasa de producción de NOx

7 Conclusiones y recomendaciones para trabajos futuros

La llama generada en la simulación numérica presenta las 3 zonas identificadas por (Dong et al., 2007) En parte de inyectores de aire y combustible se tiene la zona de la base de la llama. La zona de mezcla genera una cúpula que es debida a la mezcla entre el combustible y el oxígeno del aire circundante, y de su combustión. Adicionalmente, en esta zona se tiene el inicio de la ingesta de aire atmosférico debido al arrastre inducido por el chorro de aire central. En la zona de reacción se tiene la zona de combustión. También, se encuentra una zona de altas temperaturas en la parte central de la zona de reacción, donde se tiene la mayor concentración de CO₂. De manera cualitativa, se validaron los resultados de la simulación al comparar valores de temperatura en el eje central de la llama con sus correspondientes valores experimentales presentados por (Dong et al., 2007). Al llevar a cabo la comparación con valore de temperatura, se presentó una variación menor del 10% en la zona de inyección y en la zona de llama, y una variación menor del 20% en la zona de post llama.

El CO se encuentra con valores altos en la zona de mezcla y región baja de la zona de reacción y su formación se da principalmente, en la zona de la cúpula y la de mezcla, que es una zona de temperaturas intermedias.

También, en la región central de la zona de reacción se encuentran los niveles más altos de la tasa de formación de NO_x, que es altamente dependiente de la temperatura. Un poco más arriba de esta zona, se tienen los niveles concentración más altos de NO_x, debido al transporte de esta especie por efectos convectivos y difusivos, incluida la turbulencia; no obstante, los niveles encontrados de esta especie contaminante son bajos para este tipo de llamas, lo que concuerda con lo especificado en la literatura.

De acuerdo con lo anterior, se puede establecer que se simula adecuadamente la interacción entre la turbulencia y la cinética química, así como la influencia de esta interacción en la formación de contaminantes (CO, NO_x) en una llama de difusión inversa turbulenta descrita por (Dong et al., 2007).

Como primera propuesta para futuras líneas de investigación se puede tomar este estudio como base y utilizar modelos químicos más complejos para simular y describir de una mejor manera el proceso de combustión. Posteriormente, otras propuestas para futuras líneas de investigación pueden ser la utilización de diferentes combustibles con las diferentes condiciones geométricas y del flujo. Otra línea de investigación seria la utilización de este tipo de llama para posibles usos industriales. Y por último, establecer una serie de experimentos para comprobar el modelo con diferentes resultados físicos.

8 Referencias

- Alvarado Torres, P. N., Cadavid Sierra, F., Mondragon Perez, F., Ruiz Machado, W., & Amell Arrieta, A. (2009). Estudio cinético químico de la formación de óxidos de nitrógeno en la combustión sin llama de metano. *Energética*(41), 13-22.
- Barakat, H., Salem, M., Morgan, A., & Saad, H. (2013). Study of effects of burner configuration and jet dynamics on characteristics of inverse diffusion flames. *Journal mechanical engineering reasearch*(5), 218-144.
- Cavada López-Tapia, A. (2015). *Resolución numérica de las ecuaciones de Navier-Stokes*. Universidad de Cantabria, Facultad de Ciencias.
- Cavada Lopez-Tapia, A., & Fernández, P. (2015). *RESOLUCIÓN NUMÉRICA DE LAS ECUACIONES DE NAVIER-STOKES (Numerical solution of the Navier-Stokes equations)*. 10.13140/RG.2.2.12272.20488. . Obtenido de https://www.researchgate.net/figure/Figura-34-Ejemplo-de-malla-uniforme-no-estructurada-malla-inferior-horizontal_fig3_337210921
- Cervantes-Marcelino, L., Vicente, W., Salinas-Vazquez, M., Martinez-Espinosa, E., & González, R. (2019). Stochastic Numerical Simulation of a Turbulent Inverse Diffusion Flame Generated by a CAP-type Burner. *Combustion Science and Technology*.
- Dong, L., Cheung, C., & Leung, C. (2007). Heat transfer characteristics of an impinging inverse diffusion flame jet - Part I: Free flame structure. *International Journal of Heat and Mass Transfer*(50), 5108-5123.
- Dong, L., Cheung, C., & Leung, C. (2007). Heat transfer characteristics of an impinging inverse diffusion flame jet. Part II: Impinging flame structure and impingement heat transfer. *International Journal of Heat and Mass Transfer*(50), 5124-5138.
- Dong, L., Cheung, C., & Leung, C. (2011). Combustion optimization of a port-array inverse diffusion flame jet. *Elsevier Ltd.(Energy 36)*, 2834-2846.
- Elbaz, A., & Roberts, W. (2014). Flame structure of methane inverse diffusion flame. *Experimental Thermal and Fluid Science*(56), 23-32.
- Jiang, B., Liang, H., Huang, G., & Li, X. (2006). Study on NO_x Formation in CH₄/Air Jet Combustion. *Chinese J. Chem.*, 14(6), 723-728.
- Kaplan, C., & Kailasanath, K. (2001). Flow-field Effects on Soot Formation in Normal and Inverse Methane-Air Diffusion Flames. *Combustion and Flame*(124), 275-294.
- Kashir, B., Tabejamaat, S., & Jalalati, N. (2015). On large eddy simulation of blended CH₄-H₂ swirling inverse diffusion flames: The impact of hydrogen

- concentration on thermal and emission characteristics. *Elsevier Ltd., International Journal of Hydrogen Energy*(40), 15732-15748.
- Makel, D., & Kennedy, I. (1994). Soot formation in laminar inverse diffusion flame. *Combustion science and technology*(97), 303-314.
- Mercado, J. R. (2009). Las ecuaciones de Reynolds y la relación de clausura. *Revista de Matemática: Teoría y Aplicaciones*, 16(1), 105-126.
- Miao, J., Leung, C., Cheung, C., Huang, Z., & Jin, W. (2016). Effect of H₂ addition on OH distribution of LPG/Air circumferential inverse diffusion flame. *International journal of hydrogen energy*(41), 9653-9663.
- Ng, T., Leung, C., & Cheung, C. (2007). Experimental investigation on the heat transfer of an impinging inverse diffusion flame. *International Journal of Heat and Mass Transfer*(50), 3366-3375.
- Oro, J. (2012). *Técnicas numéricas en ingeniería de fluidos: introducción a la dinámica de fluidos computacional (CFD) por el método de volúmenes finitos* (Primera ed.). España: Reverté.
- Pope, S. (1981). A monte carlo method for the pdf equation of turbulent reactive flow. *Combustion Science and Technology*, 25.
- Pope, S. (1985). Pdf methods for turbulent reactive flows. *Progress Energy Combustion Science*.
- Prieto, I. (s.f.). *Open Course Ware Universidad de Oviedo*. Obtenido de http://ocw.uniovi.es/pluginfile.php/1015/mod_resource/content/1/1C_C1275_7_0910/04_GT17_Reducccion_de_NOX_en_humos.pdf
- Sze, L., Cheung, C., & Leung, C. (2004). Temperature distribution and heat characteristics of an inverse diffusion flame with circumferentially arranged fuel ports. *International Journal of Heat and Mass Transfer*(47), 3119-3129.
- Sze, L., Cheung, C., & Leung, C. (2006). Appearance, temperature, and NO_x emission of two inverse diffusion flames with different port design. *Combustion and Flame*, 144(1-2), 237-248.
- Tamburrino Tavantzis, A. (s.f.). *Ecuaciones de Reynolds*. Universidad de Chile: Departamento de Ingeniería Civil.
- Tennekes, H., & Lumley, J. (1972). A First Course in Turbulence. *The MIT Press*.
- Versteeg, H., & Malalasekera, W. (1995). *An introduction to Computational Fluid Dynamics: The finite Volume Method*. Longman Scientific & Technical.
- Vicente y Rodriguez, W., Barrios Bonilla, J., Salinas Vázquez, M., & Barrera Avendaño, E. (2009). Predicción numérica del tamaño y forma de una llama

en un quemador elevado dentro de un flujo cruzado de aire. *FI-UNAM*, X(3), 207-216.

Westbrook, K., & Dryer, L. (1984). Chemical modeling of hydrocarbon combustion. *Progress in energy combustion science*.

White, F. M. (1998). *Fluid Mechanics* (Cuarta ed.). McGraw-Hill.

Yakhot, V., S. A., O., S., T., T., B., & Speziale, C. (1981). Development of turbulence models for shear flows by a double expansion technique. *Physics of Fluids*, 4, 1510.

Zhen, H., Choy, Y., Leung, C., & Cheung, C. (2011). Effects of nozzle length on flame and emission behaviors of multi-fuel-jet inverse diffusion flame burner. *Elsevier Ltd., Applied Energy*(88), 2917-2924.