



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE  
MÉXICO

---

---

Facultad de Ingeniería

**Evaluación de modelos de turbulencia  
en flujos con combustión.**

**T E S I S**

Para Obtener el título de:

**Ingeniero Mecánico**

Presenta:

**Ricardo Jiménez Martínez**



Director de Tesis:  
**Dr. William Vicente Y Rodríguez**  
**Dr. Martín Salinas Vázquez**

Ciudad Universitaria México D.F.

2004



Universidad Nacional  
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

**Biblioteca Central**



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

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

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

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

ESTA TESIS NO SALE  
DE LA BIBLIOTECA

A mis padres:

Juan Antonio Jiménez Villagrana  
Felipa Martínez Ángeles

Autorizo a la Dirección General de Bibliotecas de la UNAM a difundir en formato electrónico e impreso el contenido de mi trabajo recepcional.

NOMBRE: Ricardo Jiménez

Martínez

FECHA: 14/01/2004

FIRMA: Juan Antonio Martínez

## Agradecimientos:

A mis hermanos:

Juan Antonio, Yedid, Maria Isabel; gracias por apoyarme siempre en las buenas y en las malas, por brindarme el cariño que siempre he tenido, y por los momentos que hemos pasados juntos.

Alejandro C. G. gracias por todo el apoyo que nos has brindado.

Gracias a la facultad de Ingeniería UNAM por darme la oportunidad de adquirir grandes conocimientos durante todo este tiempo.

Al doctor William Vicente; por permitirme colaborar contigo y por el apoyo que siempre me brindaste.

Al doctor Alejandro Rodríguez; por permitirme ser parte de su equipo de trabajo.

Al doctor Martín Salinas por el apoyo que me brindaste.

A mis amigos de mini-baja que siempre estuvimos juntos en las buenas y en las malas.

# ÍNDICE

	<b>Página</b>
<b>1. Introducción</b>	
1.1 Necesidades sociales y ambientales	1
1.2 Descripción del fenómeno	2
1.3 Métodos de Predicción	3
1.4 Objetivo de la tesis	4
1.5 Estructura de la tesis	4
<b>2 Ecuaciones de transporte</b>	
2.1 Introducción	6
2.2 Ecuación de continuidad	6
2.3 Ecuación de cantidad de movimiento	6
2.4 Ecuación de la energía	7
2.5 Ecuación de la conservación de la especie química	7
2.6 Promediado de las ecuaciones	9
2.7 Función de densidad de probabilidad (PDF)	10
2.8 Ecuación de transporte de la PDF	11
2.9 Combustión	
2.9.1 Clasificación de los sistemas con reacción	15
2.9.2 Modelo Eddy Break Up	15
2.9.3 Mecanismos reducidos	15
2.9.4 Mecanismo sistemáticamente reducido de cinco pasos del metano	16
<b>3 Turbulencia</b>	
3.1 Introducción	18
3.2 Historia de la turbulencia	18
3.3 Cómo se inicia la turbulencia	21
3.4 Modelos de turbulencia	22
<b>4 Métodos de solución</b>	
4.1 Introducción	28
4.2 Método de volúmenes finitos	28
4.3 Método de Monte Carlo	32
4.4 Acoplamiento de los métodos de volúmenes finitos y Monte Carlo	38
<b>5 Presentación de resultados</b>	
5.1 Introducción	40
5.2 Configuración experimental	41
5.3 Detalles Numéricos	43
5.4 Resultados	44
5.4.1 Contornos de velocidad, temperatura, CH <sub>4</sub> , CO, OH y NO	44
5.4.2 Velocidades Axiales y Temperatura Comparación con datos experimentales	47
5.4.3 Concentraciones Mayoritarias Comparación con datos experimentales	49
5.4.4 Concentraciones Minoritarias Comparación con datos experimentales	52
<b>6 Conclusiones y recomendaciones</b>	56
<b>7 Bibliografía</b>	58
<b>Apéndice</b>	60

## Índice de figuras

Fig. 2.2 Función de densidad de probabilidad en una posición $x$ del dominio en un tiempo $t$ .	11
Fig. 3.1 Fuentes generadoras de remolinos.	22
Fig. 4.1 Representación del sistema discretizado en volúmenes finitos.	29
Fig. 4.2 Diagrama esquemático de un volumen de control bidimensional.	29
Fig. 4.3 Representación esquemática de las partículas en la malla de volúmenes finitos.	34
Fig. 4.4 Representación del paso fraccionado de transporte en la dirección $x$ para la celda $P$ .	36
Fig. 5.1 Representación esquemática del quemador. Cotas mm.	40
Fig. 5.2 Localización de la llama de metano y aire en el diagrama de Borghi.	41
Fig. 5.3 Representación esquemática de las posiciones axiales donde se tienen medidas experimentales.	42
Fig. 5.4. Representación del dominio de la simulación.	43
Fig. 5.5 Representación del campo de velocidades.	45
Fig. 5.6 Contornos de fracción molar media de Temperatura $\text{CH}_4$ , $\text{NO}$ y $\text{OH}$ , $\text{CO}$ .	46
Fig. A1 Diagrama esquemático de celdas.	60

## Índice de Gráficas

Graf. 5.1 Perfiles radiales de la velocidad axial en $Z/\text{Do}=0.1$ , $Z/\text{Do}=0.3$ , $Z/\text{Do}=0.6$ y $Z/\text{Do}=1.0$ .	48
Graf. 5.2 Perfiles radiales de temperatura y fracción molar de $\text{CH}_4$ en $Z/\text{Do}=0.3$ y $1.0$	50
Graf. 5.3 Perfiles radiales de fracción molar de $\text{CO}_2$ y $\text{H}_2\text{O}$ en $Z/\text{Do}=0.3$ y $1.0$ .	51
Graf. 5.4 Perfiles radiales de fracción molar de $\text{O}_2$ y $\text{CO}$ para $Z/\text{Do}=0.3$ y $1.0$ .	53
Graf. 5.5 Perfiles radiales de fracción molar de $\text{OH}$ y $\text{NO}$ para $Z/\text{Do}=0.3$ y $1.0$ .	54
Graf. 5.6 Perfiles de frecuencia de tiempo de mezcla molecular en los tres modelos de turbulencia utilizados.	55

# Capítulo 1

## INTRODUCCIÓN

### 1.1 Necesidades Sociales y Ambientales

Existen aspectos de nuestro entorno que necesitan ser investigados, para entender mejor su funcionamiento, dentro de los cuales, encontramos aquellos que van ligados directamente con el movimiento de los fluidos.

De esta manera, encontramos que existe una amplia gama de fenómenos que necesitan un estudio más profundo, con la finalidad de poderlos utilizar para el uso y beneficio de la sociedad; aunado a todas las posibles transformaciones de la naturaleza que se pueden generar con el uso de herramientas de tipo ingenieril.

Dentro de los requerimientos en nuestra sociedad, encontramos a la turbina de gas; la cual, por diversas razones, es una opción atractiva como planta de generación de potencia. El uso de este instrumento de potencia, lo podemos encontrar en la industria aeroespacial, así como en los aviones civiles y militares, en donde dicha turbina de gas es el principal mecanismo de propulsión. Una vez que su auge empezó a aumentar, se generaron otros usos para estos sistemas, por ejemplo en el sector industrial se usa en las estaciones de bombeo de oleoductos, propulsión naval, siendo su uso de mayor demanda en la industrial eléctrica.

Una parte muy importante dentro del diseño de estos sistemas, es el análisis de viabilidad técnico-económico y ambiental, ya que existe una presión social que obliga a tener implicaciones ambientales; es por ello que se han requerido mayores estudios en este aspecto, logrando así una mayor producción de Mega Watts en la generación de energía eléctrica, y permitiendo reducir sustancias contaminantes como el CO que es nocivo para la salud, CO<sub>2</sub> cuyo impacto es el efecto invernadero, y óxidos de nitrógeno (NO<sub>x</sub>) que tienen repercusiones en la capa de ozono. En el proceso de combustión, la formación de NO<sub>x</sub> depende fuertemente de la temperatura, por lo que una disminución en la temperatura de combustión puede producir una reducción sustancial de las emisiones de NO<sub>x</sub>.

Como medida para reducir los niveles de NO<sub>x</sub> se tiene una técnica que consiste en la inyección de agua o vapor que ha tenido resultados considerables, pero también ha presentado algunos inconvenientes como lo relacionado a los costos que se generan debido al tratamiento de aguas y a la durabilidad del equipo. Existe otra técnica que no ha tenido mucho auge, pero se presume muy viable, la cual se conoce como Combustión de Premezcla Pobre (en inglés, Lean Premixed Combustión, LPC); parte de este trabajo será el conocer más acerca de este aspecto. En dicha técnica, tanto el combustible y el oxidante, se mezclan de forma previa a la entrada del quemador en proporciones tales que existe un sustancial exceso de aire.

El exceso de aire, combinado con la premezcla, evita las regiones de altas temperaturas que están asociadas a la zona estequiométrica de las llamas no premezcladas y por lo tanto conduce a una disminución de las emisiones de NO<sub>x</sub>. En Europa se presentan notables consideraciones respecto a las emisiones máximas permisibles para este contaminante en turbinas de gas, por ejemplo se tienen límites de

## Introducción

---

25 ppm de NO<sub>x</sub> y en California, USA son más estrictos ya que deben tener como límite de 9 ppm de NO<sub>x</sub>.

La riqueza de la mezcla combustible aire se indica frecuentemente por la tasa de equivalencia ( $\phi$ ), la cual es una comparación entre dos tasas; la tasa combustible/aire de la llama y la tasa combustible /aire estequiométrica; siendo esta última la que indica las proporciones adecuadas de combustible y de aire para que se de la reacción completa sin que sobre ningún elemento.

Al tener la relación de ambas tasas (tasa de equivalencia, $\phi$ ), se pueden tener varias situaciones, si  $\phi > 1$ , la mezcla es rica en combustible, si  $\phi =1$ , la mezcla es estequiométrica y si  $\phi < 1$ , la mezcla es pobre en combustible, es decir, se tiene un exceso de oxidante.

La LPC no está exenta de problemas operativos, por ejemplo, la propagación de la llama aguas arriba desde la zona de combustión a la mezcla de reactantes frescos (efecto conocido como flash back), el de autoignición de la mezcla, o la extinción (local o total) de la llama debido a la proximidad de la composición al límite de flamabilidad pobre. Estos problemas de estabilidad en la llama pueden dar lugar a un incremento en las concentraciones de CO e hidrocarburos (HC), que también son sustancias contaminantes.

De esta manera, para el diseño de turbinas de gas más seguras, limpias y eficientes se hace imprescindible el uso de herramientas capaces de predecir con precisión el flujo expuesto anteriormente.

### 1.2 Descripción del fenómeno

El sistema a analizar es de geometría multidimensional y consta de una mezcla multicomponente de gases que están reaccionando químicamente. El flujo, como en la mayoría de las aplicaciones industriales es turbulento.

En este trabajo, este sistema se analizará mediante simulación numérica, que presenta la característica de ser menos costosa y con requerimientos temporales menores, comparada con un trabajo experimental, que demanda un prototipo o un modelo físico a escala, que en algunas ocasiones es difícil de construir. El análisis numérico proporciona información completa y detallada de las variables relevantes del flujo; en un análisis con un modelo físico, serían necesarias técnicas de mediciones fiables y no intrusivas, que en muchas ocasiones son difíciles de implementar en el prototipo o modelo.

Cuando en un flujo turbulento ocurre un proceso de combustión como en el problema abordado en esta tesis, el análisis numérico tiene la dificultad de la interacción entre la aerodinámica y la cinética química presente en las más pequeñas escalas del flujo turbulento; a esta dificultad se suma la complejidad de la cinética química de la combustión que involucra un gran número de reacciones y de especies. Por ejemplo, en la combustión de metano y aire, el mecanismo completo GRI 2.1 (Gas Research Institute 2.1, Bowman et al, 1995) está compuesto por 279 reacciones y 49 especies.

Para simular el flujo se utilizará una alternativa de las básicamente tres existentes: Simulación Numérica Directa (Direct Numerical Simulation DNS), ecuaciones promediadas (Reynolds o Favre, Averaged Navier-Stokes Equations, RANS), y la simulación de grandes escalas (Large Eddy Simulation, LES), que a continuación se presentarán con mayor detalle.

### 1.3 Métodos de predicción

Para simular el flujo turbulento como el presentado anteriormente se tienen básicamente tres alternativas: Simulación Numérica Directa, ecuaciones promediadas y la simulación de grandes escalas.

La DNS consiste en discretizar directamente las ecuaciones instantáneas que gobiernan el movimiento del flujo reactivo y resolverlas numéricamente; las cuales son válidas para flujo laminar y turbulento. Las ecuaciones que se resuelven son las de conservación de masa, las de cantidad de movimiento, de la energía y de las especies químicas. La discretización resuelve todas las escalas, espaciales y temporales, de las variables del flujo, y por lo tanto, no requiere de ninguna aproximación o modelo. En un flujo turbulento sin reacción, para capturar todas las escalas, el espacio y tiempo de la discretización es función del número de Reynolds elevado prácticamente al cubo, si el problema incluye especies reactivas, aparecerán escalas aún menores, que exigirán más detalle en la simulación. Como el flujo del sistema de interés es turbulento y con un número de Reynolds alto, la aplicación de este método está limitada por la potencia de los equipos de cómputo.

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

Otra opción viable para la simulación es la de las Ecuaciones Promediadas extensamente utilizada en casos prácticos de interés industrial, que consiste en promediar todas las escalas espaciales y temporales de las fluctuaciones turbulentas y resolver las ecuaciones de transporte en términos de variables medias del sistema. Para nuestro caso, se utilizará esta opción para poder hacer dicha simulación.

En las aproximaciones de LES y RANS se precisan por tanto modelos que representen el transporte de la cantidad de movimiento, energía y especies químicas por parte del campo fluctuante (turbulento) no resuelto. También, en ambas alternativas de simulación, se precisa la representación de valores medios (RANS) o filtrados (LES) de la tasa de reacción química. En el método RANS, el transporte turbulento de la cantidad de Movimiento, energía o especies químicas, se modela mediante alguno de los llamados modelos de turbulencia que posteriormente serán tratados.

La modelización del término de reacción química, implica a menudo, la comparación entre los tiempos característicos asociados a la cinética química  $t_q$ , y aquellos asociados a una escala del movimiento turbulento.

Existe la hipótesis de la química rápida, en donde se considera frecuentemente que la reacción química ocurre en una capa delgada que no es afectada internamente por la turbulencia, por lo que se puede simular como una llama laminar afectada en su forma por el transporte turbulento; siendo ignorada la tasa de cinética de reacción. Entre esta clase de modelos se encuentra el modelo Eddy Break Up, que presenta la velocidad al que los reactantes se mezclan a nivel molecular como un factor limitante.

Una opción existente cuando los tiempos característicos de la cinética química y escalas turbulentas se solapan, es el uso de la función de densidad de probabilidad (PDFs) de los escalares termoquímicos. Un procedimiento para determinar la PDF en

## Introducción

---

cada punto del flujo reactivo de interés, consiste en deducir y resolver, de manera numérica, una ecuación de transporte para la PDF. Esta opción se utilizará en esta tesis.

Para resolver la ecuación de transporte de la PDF, se utilizan los métodos estocásticos de Monte Carlo, ya que el tiempo de cálculo se incrementa linealmente con el número de variables independientes, lo cual es una característica muy importante comparada con una resolución habitual empleando técnicas de discretización (volúmenes finitos, diferencias finitas, y elementos finitos), que requieren tiempos de cálculo elevados, los cuales se incrementan exponencialmente con el número de variables independientes.

En sistemas con combustión, la cinética química involucra un gran número de reacciones y de especies. Incluir un mecanismo real en cálculos con geometrías compleja, puede requerir una gran cantidad de memoria y de tiempo de cálculo. Por lo tanto, para cálculos prácticos, es necesario recurrir a sistemas químicos simplificados (de un número máximo de especies de 10 a 15) que, reteniendo las características más relevantes del sistema químico real, reduzca considerablemente el tiempo de cálculo. En esta tesis se empleará el mecanismo sistemáticamente reducido de cinco pasos del metano.

### 1.4 Objetivo de la tesis

El objetivo de esta tesis, es simular una llama de metano premezclada pobre, incluyendo la formación de contaminantes como CO y NO. La aerodinámica del flujo se simula con la alternativa de las ecuaciones promediadas (RANS); se utilizarán modelos de termoquímica de cierta complejidad, sin hacer por ello el tiempo de cálculo inviable.

Se analizarán los efectos generados por tres modelos de turbulencia aplicados al transporte turbulento de la cantidad de movimiento, energía y especies químicas.

### 1.5 Estructura de la tesis.

En esta primera parte se presentan algunas necesidades sociales y ambientales que permiten tener las bases para el estudio de algunos fenómenos para el beneficio del ser humano, de los cuales, se desprende el análisis de una mezcla multicomponente de gases que se encuentran reaccionando químicamente, la cual será el interés principal de este trabajo; tomando como herramienta principal a la mecánica de fluidos computacional.

Al saber los alcances que tendrá esta tesis, se encontrarán las ecuaciones que rigen a un fluido que reacciona químicamente.

A continuación, veremos una parte de combustión modelada en donde partiremos con saber que existe un modelo de combustión sencillo y muy utilizado en la industria, el cual presenta ciertas limitaciones denominado Modelo Eddy Break Up; pero también encontraremos a los mecanismos reducidos, de los cuales tomaremos parte para mostrar la simulación numérica.

Como se mencionó al inicio de esta sección, existe una relación entre la turbulencia y el fenómeno que se analiza; lo cual formará el siguiente capítulo de esta tesis, partiendo con algunos datos conceptuales relacionados a la generación de la turbulencia; en general, información que nos permite conocer un poco más de ella. Por último, encontraremos los modelos de turbulencia que se utilizarán en el análisis del fenómeno que se presenta.

## Introducción

---

Seguidamente, se verán los métodos de volúmenes finitos y de Monte Carlo, así como el acoplamiento de ambos; ya que se relacionan con la parte de aerodinámica y la combustión.

Un punto muy importante es la presentación de los resultados, en donde se muestra al fenómeno simulado con algunos aspectos generados en la simulación numérica; además, descubriremos las diferencias significativas entre las simulaciones con diferentes modelos de turbulencia, aunado a la evolución de la flama.

Por último se verán las conclusiones generadas con el trabajo realizado en la llama simulada, para así tomar parte de ello para futuras investigaciones.

# Capítulo 2

## ECUACIONES DE TRANSPORTE

### 2.1 Introducción.

Existen ecuaciones que gobiernan el movimiento de un fluido que reacciona químicamente, las cuales nos permitirán realizar la simulación numérica de una llama turbulenta. En este capítulo se muestran inicialmente las ecuaciones instantáneas que gobiernan el fluido, partiendo con la ecuación de continuidad, cantidad de movimiento, energía, y por último, la ecuación de la especie química.

A continuación, se presenta la alternativa de ecuaciones promediadas (Reynolds o Favre Averaged Navier- Stokes Equations. RANS), que tiene exigencias razonables de cómputo en comparación con la DNS.

Por último, se muestra, una ecuación de transporte para la función de densidad de probabilidad conjunta de todos los escalares que determinan el estado termoquímico, con la cual se simula la evolución de las especies químicas.

### 2.2 Ecuación de Continuidad.

A continuación se presenta la ecuación de continuidad

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V}) = 0 \quad (2.1)$$

### 2.3 Ecuación de cantidad de movimiento.

La ecuación de cantidad de movimiento es:

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

En donde  $p$  es la presión,  $\bar{\boldsymbol{\tau}}'$  es el tensor de esfuerzos viscosos y  $\bar{\mathbf{f}}_m$  son las fuerzas de cuerpo,  $\rho$  es la densidad,

El tensor de esfuerzos viscoso, para fluidos Newtonianos, (et, al R, Aris, 1962) está dado como:

$$\bar{\boldsymbol{\tau}}' = \mu (\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}') + \left( \mu_v - \frac{2}{3} \mu \right) (\nabla \cdot \mathbf{v}) \delta \quad (2.3)$$

## Ecuaciones de transporte

Donde  $\mu$  es la viscosidad molecular de la mezcla,  $\mu_v$  es el coeficiente de viscosidad volumétrico, y  $\delta_{ij}$  es la delta de Kronecker. Por lo general el coeficiente de viscosidad volumétrica se desprecia.

Si se sustituye la ecuación (2.3) en la (2.2), podremos obtener las ecuaciones de Navier Stokes.

### 2.4 Ecuación de la energía.

La ecuación de la energía esta dada como:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[ \rho \left( u + \frac{1}{2} |\mathbf{v}|^2 + U \right) \right] + \nabla \cdot \left[ \rho \mathbf{v} \left( u + \frac{1}{2} |\mathbf{v}|^2 + U \right) \right] = \nabla \cdot (\mathbf{P} \cdot \mathbf{v}) - \nabla \cdot (p \mathbf{v}) - \nabla \cdot \mathbf{J}_e + \dot{Q}_r \quad (2.4)$$

Donde  $\mathbf{J}_e$  es el flujo difusivo de calor,  $\dot{Q}_r$  es el intercambio de calor por radiación, U es la energía potencial, u energía interna

### 2.5 Ecuación de Conservación de la especie química.

La ecuación de conservación de la especie  $\alpha$  se puede expresar como:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho Y_\alpha) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} Y_\alpha) = -\nabla \cdot \mathbf{j}_\alpha + S_\alpha \quad (2.5)$$

Para  $\alpha=1\dots N$

Donde  $\mathbf{j}_\alpha$  es el flujo difusivo de la especie  $\alpha$ ;  $Y_\alpha$  es la fracción másica,  $S_\alpha$  es la tasa de formación neta de la especie  $\alpha$ , y para poder satisfacer la ecuación de continuidad vista anteriormente, debemos tener: para la suma de todas las especies,  $S_\alpha=0$ , igual para  $\mathbf{j}_\alpha=0$

Por otro lado, podemos ver que  $S_\alpha$  para una reacción elemental tenemos lo siguiente:

$$S_\alpha = W_\alpha \sum_{r=1}^R (v_{\alpha,r}^b - v_{\alpha,r}^f) \omega_{\alpha,r} \quad (2.6)$$

Donde  $v_\alpha$  son los coeficientes estequiométricos, el superíndice f indica la reacción directa y b la reacción inversa;  $W_\alpha$  es el peso molecular de la especie  $\alpha$ ;  $\omega_{\alpha,r}$  es la velocidad de reacción de la especie  $\alpha$  debido a la reacción r.

La tasa de reacción neta se encuentra dada como:

$$\omega_{\alpha,r} = k_{f,r} \prod_{\alpha=1}^N [X_\alpha]^{v_{\alpha,r}^f} - k_{b,r} \prod_{\alpha=1}^N [X_\alpha]^{v_{\alpha,r}^b} \quad (2.7)$$

## Ecuaciones de transporte

---

Donde  $X_\alpha$  es la concentración molar de la especie y  $k_{f,r}$  y  $k_{b,r}$  son respectivamente las constantes de reacción directa e inversa de la reacción  $r$ . La constante de reacción directa  $k_{f,r}$  según la ley de Arrhenius (et al, Moore, Kotzjohn,2000) es:

$$k_{f,r} = A_r T^{b,r} e^{\left(\frac{E_r}{R_c T}\right)} \quad (2.8)$$

Donde  $A_r$  es el factor de pre-exponencial,  $B_r$  es el exponente de la temperatura,  $E_r$  es la energía de activación y  $R_c$  es la constante de universal de los gases. Por otro lado, la constante de reacción inversa  $k_{b,r}$  se relaciona con la constante de reacción directa mediante la constante de equilibrio(et al C. Smoot, Jack 1979):

$$k_{b,r} = \frac{k_{f,r}}{k_{e,r}}, \quad k_{e,r} = \exp\left(-\frac{\Delta Z^0}{RT}\right) \quad (2.9)$$

Donde  $\Delta Z^0$  es el cambio de energía de Helmholtz en el estado estándar.  
El cambio de la energía libre de Helmholtz en el estado estándar es:

$$\Delta Z^0 = \sum_{\alpha=1}^N (s_\alpha^b - s_\alpha^f) - (U_\alpha^0 - T_\alpha S_\alpha^0) \quad (2.10)$$

Donde  $U_\alpha^0$ ,  $T_\alpha$  y  $S_\alpha^0$  son respectivamente, la energía interna, temperatura y la entropía en el estado estándar de la especie  $\alpha$ .

Por otro lado, la densidad de las especies constitutivas de una mezcla de gases ideales se da como:

$$\rho = \frac{p}{RT \sum_{\alpha=1}^N \frac{Y_\alpha}{W_\alpha}} \quad (2.11)$$

Para la expresión de flujo difusivo tenemos que se produce por un gradiente de especies, de temperatura y de presión. Para los dos últimos efectos, generalmente, son despreciados en el flujo de combustión; y acorde a la ley de Fick y con una aproximación se escribe como:

$$\bar{J}_\alpha = D_\alpha^M \rho \frac{Y_\alpha}{X_\alpha} \nabla X_\alpha \quad (2.12)$$

Donde  $X_\alpha$  es la fracción molar  $D_\alpha^M$  es el coeficiente medio de la especie  $\alpha$  en la mezcla de especies.

**2.6 Promediado de las ecuaciones.**

En general, el flujo en la mayor parte de los sistemas prácticos, se presenta de manera turbulenta, al igual que el sistema analizado en dicho trabajo; es por ello que, una de las características de los flujos turbulentos es la variación aleatoria e irregular tanto en el espacio como en el tiempo de las propiedades del fluido.

El promediado de las ecuaciones instantáneas de conservación es una de las alternativas para la simulación de flujos turbulentos reactivos. Con este método se promedian todas las fluctuaciones de las escalas temporales y se resuelven ecuaciones de transporte para los valores medios de las propiedades del fluido. Estas ecuaciones no son cerradas, por lo cual se van a requerir modelos que reemplacen los términos no cerrados.

En la densidad de los flujos se pueden usar dos tipos de promediado; uno es el promediado de Reynolds, el cual toma a la densidad como constante, y el otro es el promediado de Favre, que en este caso, se ocupa de la densidad variable.

Con fines de notación, se presentará con el símbolo  $\phi$  cualquier propiedad transportada, tales como la fracción másica de la especie  $Y_\alpha$ , la entalpía  $h$  y las componentes de la velocidad. Los valores instantáneos de estas propiedades son escritos en términos de una parte media y una fluctuación turbulenta:

$$\phi = \bar{\phi} + \phi' \tag{2.13}$$

$$\phi = \tilde{\phi} + \phi'' \tag{2.14}$$

Donde ( $\bar{\phi}$  y  $\tilde{\phi}$ ) son los promediados, los cuales están definidos como:

$$\bar{\phi} = \lim_{n_e \rightarrow \infty} \frac{1}{n_e} \sum_{i=1}^{n_e} \phi^{(i)} \quad \text{Promediado de Reynolds} \tag{2.15}$$

$$\tilde{\phi} = \lim_{n_e \rightarrow \infty} \frac{1}{n_e} \sum_{i=1}^{n_e} \rho^{(i)} \phi^{(i)} \quad \text{Promediado de Favre} \tag{2.16}$$

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

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

Si se aplica el promediado de Favre a las ecuaciones instantáneas de continuidad, cantidad de movimiento, energía y especie química, se obtiene:

$$\frac{\partial \bar{p}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{p}\bar{v}) = 0 \tag{2.17}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{p}\bar{v}) + \nabla \cdot (\bar{p}\bar{v}\bar{v}) = -\nabla p + \nabla \cdot (\bar{p}v''v'') + \bar{p}\bar{g} \tag{2.18}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{p}Y_\alpha) + \nabla \cdot (\bar{p}\bar{v}Y_\alpha) = -\nabla \cdot (\bar{p}v''Y_\alpha) + S_\alpha \tag{2.19}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{p}\bar{h}) + \nabla \cdot (\bar{p}\bar{v}\bar{h}) = -\nabla \cdot (\bar{p}v''h'') \tag{2.20}$$

## Ecuaciones de transporte

---

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{\phi}_z) + \nabla \cdot (\bar{\rho}\tilde{v}\tilde{\phi}_z) = -\nabla \cdot (\bar{\rho}\tilde{v}''\tilde{\phi}_z) \quad (2.21)$$

Si el flujo es de baja velocidad ( $MA \ll 1$ ) generalmente se supone que las fluctuaciones de la presión son despreciables (et al, W P Jones 1994); por lo tanto, los valores medios de la densidad y la tasa de reacción química se pueden expresar como función de una presión de referencia  $p_0$ :

$$\bar{p} = p_0 \left( R_c T \sum_{\alpha=1}^N \frac{Y_\alpha}{W_\alpha} \right)^{-1} \quad (2.22)$$

$$\bar{S}_\alpha(p, \rho, \phi_\alpha) = S_\alpha(p_0, \bar{\rho}, \bar{\phi}_\alpha) \quad (2.23)$$

Donde  $\phi_\alpha$  representa la fracción másica de las especies; por lo tanto  $\alpha=1, \dots, N+1$ .

Los flujos turbulentos  $\tilde{v}''\Phi''$  de las ecuaciones (2.18), (2.19), (2.20), (2.21), son términos desconocidos que requieren modelización. El cierre del término  $\bar{\rho}\tilde{v}''\tilde{v}''$  de la ecuación (2.18) se tratará en la parte de modelos de turbulencia.

Por otro lado, para poder hacer los cierres de las ecuaciones (2.17), (2.18), (2.19), (2.20), (2.21); será necesario conocer el valor medio de la tasa de reacción de la especie química  $\bar{S}_\alpha$  y de la densidad  $\bar{\rho}$ .

$$\bar{S}_\alpha \neq S_\alpha(\bar{T}, \bar{\rho}, \phi_1, \dots, \phi_N) \quad (2.24)$$

$$\bar{\rho} = \rho(\bar{T}, \bar{\phi}_1, \dots, \bar{\phi}_N) \quad (2.25)$$

Para la tasa de reacción media, en primera instancia, debe saberse que la modelización de ella es una de las principales dificultades que se presentan en la simulación de flujos turbulentos reactivos; ya que es altamente no lineal, y la falta de información sobre la forma de las fluctuaciones es el inconveniente, por lo que su media no puede ser calculada simplemente a partir de las variables medias.

Se puede representar mediante expansiones en serie de Taylor entorno a valores medios, sin embargo, presenta un inconveniente: es necesario modelar un gran número de correcciones de alto orden de la temperatura. Además, la convergencia en la serie de Taylor es mala. Esta aproximación puede ser válida para reacciones que son muy lentas comparadas con los cambios en el campo de flujo turbulento local.

Se puede modelizar por medio de el modelo Eddy Break Up (que se verá posteriormente), que se utiliza para llamas premezcladas con química rápida. Una opción para la resolución de la tasa de reacción media puede ser la función de densidad de probabilidad, la cual se verá a continuación.

### 2.7 Función de densidad de probabilidad (PDF)

Los métodos de función de densidad de probabilidad conjunta (por sus siglas en ingles, PDF), para flujos turbulentos han sido descritos por Pope (et al 1985).

## Ecuaciones de transporte

Dicha función, sirve para representar una distribución de probabilidad en términos de integrales de cierta función de densidad  $f(x)$ , lo cual genera una aplicación infinitesimal en cierto intervalo como  $[x, x + dx]$  esto es, la probabilidad de  $f(x) dx$ . La función de densidad de probabilidad se puede ver como una versión alisada de un histograma (Fig. 2.1).

La PDF para la velocidad escalar, es la unión entre la PDF de velocidad y cualquier número de escalares, como la fracción mezcla o escalares de reacción.

El método PDF es igualmente aplicable tanto a la combustión premezclada como a la no premezclada. Como entrada, se requiere la longitud de la turbulencia local que puede ser para las diferentes dimensiones del flujo.

De esta manera podemos ver que el código del flujo provee el campo de velocidades con propiedades turbulentas y por otro lado, el código PDF calcula el campo de densidades y otras propiedades termoquímicas de interés.

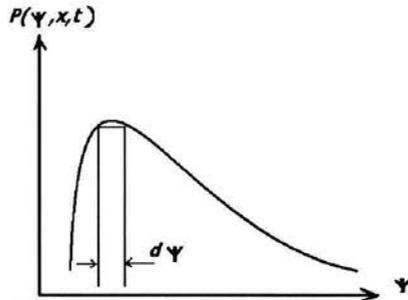


Fig. 2.1 Función de densidad de probabilidad en una posición  $x$  del dominio en un tiempo  $t$ .

La función de densidad de probabilidad  $P(\psi; x, t)$  mostrada en la figura 2.1, se define como la densidad de probabilidad del evento  $\phi(x, t) = \psi$  para un localizador  $x$  y un tiempo  $t$  dados. Donde  $\phi$  es el vector de composición aleatoria y  $\psi$  es el espacio muestral de  $\phi$ .

Las cantidades medias de la tasa de reacción o la densidad pueden ser obtenidas como:

$$\overline{S_\alpha(\phi)} = \int S_\alpha(\psi) P(\psi) d\psi; \quad \overline{\rho(\phi)} = \int \rho(\psi) P(\psi) d\psi \quad (2.26)$$

Para evaluar la media de la tasa de reacción química y densidad hace falta conocer la forma de la PDF, para lo cual se pueden emplear comúnmente dos alternativas:

- La PDF se calcula a partir de una ecuación de transporte
- La PDF se calcula a partir de algunos de sus momentos suponiendo que tiene una forma determinada.

### 2.8 Ecuación de transporte para la función de densidad de probabilidad conjunta (PDF)

A continuación se dará una deducción de la ecuación de transporte de la PDF conjunta, por lo que se presentarán para todos los escalares que determinan el estado termoquímico local de la mezcla multicomponente reactiva.

## Ecuaciones de transporte

---

Una ecuación de transporte para  $P(\psi)$  se puede obtener a partir de la definición de la PDF en términos de la media de funciones delta (et al Pope, 1976).

$$P(\psi) = \langle P(\psi) \rangle \quad (2.27)$$

Donde  $\langle \rangle$  indica promediado de Reynolds y el promediado de Favre.

Podemos ver que  $P(\psi)$  es la PDF granular la cual se encuentra escrita en términos de la función delta de Dirac como

$$P(\psi) = \prod_{\alpha=1}^{N+1} \delta(\Phi_{\alpha} - \psi_{\alpha}) \quad (2.28)$$

Donde  $N+1$  es la dimensión de  $\psi$  que es igual al número de especies químicas más la entalpía total.

Las derivadas de  $P(\psi)$  son:

$$\frac{\partial P(\psi)}{\partial t} = - \frac{\partial P(\psi)}{d\psi_{\alpha}} \frac{\partial \phi_{\alpha}}{\partial t} \quad (2.29)$$

$$\nabla P(\psi) = - \frac{\partial P(\psi)}{d\psi_{\alpha}} \nabla \phi_{\alpha} \quad (2.30)$$

Las ecuaciones instantáneas de conservación de especie química y de la energía total se pueden escribir con la forma general:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \phi_{\alpha}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \phi_{\alpha}) = -\nabla \cdot \mathbf{J}_{\phi_{\alpha}} + S_{\alpha} \quad (2.31)$$

En el caso que  $\phi_{\alpha}$  sea la entalpía total,  $h$ ,  $S_h=0$

Sustituyendo  $\partial \phi_{\alpha} / \partial t$  y  $\nabla \phi_{\alpha}$  de la ecuación (2.31) en las ecuaciones (2.29) y (2.30) y haciendo el promediado condicionado, se obtiene la ecuación de evolución para la PDF granular (et al Pope 1981):

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial t} [\rho P(\psi)]}_{(a)} + \underbrace{\nabla \cdot [\rho \langle \mathbf{v} \phi = \psi \rangle P(\psi)]}_{(b)} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial \psi_{\alpha}} [S_{\alpha} P(\psi)]}_{(c)} = \underbrace{\frac{\partial}{\partial \psi_{\alpha}} \left[ \left\langle \frac{\partial J_{\phi_{\alpha}}}{\partial x_i} \phi = \psi \right\rangle P(\psi) \right]}_{(d)} \quad (2.32)$$

En donde  $\langle a | b \rangle$  es el valor esperado de "a" condicionado por el evento particular "b". El promediado de la ecuación (2.32) se condiciona a:  $\phi = \psi$

Los términos de la ecuación (2.32) representan el transporte en el tiempo de  $P(\psi)$  (a), el transporte en el espacio físico por convección (b), el transporte en el espacio de

## Ecuaciones de transporte

composición por reacción química (c). El término (d) de la parte derecha representa el transporte en el espacio de composición por flujos difusivos (llamado también término mezcla molecular). Dicho término, requiere cierre, pues contiene correlaciones entre la variable y sus gradientes, las cuales son desconocidas. El término de reacción química (c), está cerrado y por ello no necesita modelización, lo cual es una de las ventajas del método.

La PDF de Favre puede definirse como:

$$\tilde{P}(\psi) = \frac{\rho P(\psi)}{\langle \rho \rangle} \quad (2.33)$$

El término de transporte convectivo (b) de la ecuación (2.32) se puede reexpresar como:

$$\langle \tilde{v} \mathbf{I} \phi = \psi \rangle = \tilde{\mathbf{v}} + \langle \tilde{v}'' \mathbf{I} \phi = \psi \rangle \quad (2.34)$$

Sustituyendo las expresiones (2.33) y (2.34) en la ecuación (2.32) se obtiene la ecuación PDF de Favre conjunta (et al Pope 1985) (de todas las variables termoquímicas del sistema).

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} [\rho \tilde{P}(\psi)] + \nabla \cdot [\rho \tilde{P}(\psi)] = & \underbrace{-\frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} [S_\alpha \tilde{P}(\psi)]}_{(I)} - \underbrace{\nabla \cdot [\tilde{v}'' \mathbf{I} \phi = \psi] \tilde{P}(\psi)}_{(II)} \\ & - \underbrace{\frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} [\langle \nabla \cdot \mathbf{J}_{\phi_\alpha} \mathbf{I} \phi = \psi \rangle \tilde{P}(\psi)]}_{(III)} \end{aligned} \quad (2.35)$$

De la ecuación (2.35), los términos (II) y (III) no son cerrados y requieren modelización ya contienen correlaciones entre la variable y sus gradientes.

El término de transporte turbulento en el espacio físico (II) se puede representar con un modelo de difusión turbulenta (et al, Pope 1976) como se verá a continuación:

$$-\nabla \cdot [\tilde{\rho} \langle \tilde{v}'' \mathbf{I} \phi = \psi \rangle P(\psi)] = \nabla \cdot [\tilde{\rho} \Gamma_{T,\phi} \nabla \tilde{P}(\psi)] \quad (2.36)$$

De donde  $\Gamma_{T,\phi} = \mu_T / S_{ct}$  es el coeficiente de difusión turbulenta del escalara  $\phi$  y es igual para todos los escalares (especies químicas y entalpía). Los parámetros  $\mu_T$  y  $S_{ct}$  son la viscosidad y el número de Schmidt turbulentos respectivamente, los cuales serán tomados en el capítulo de turbulencia.

Por otro lado, haciendo uso de la ley de Fick (si  $\phi_\alpha$  es la fracción másica) y la ley de Fourier, (si  $\phi_\alpha$  es la entalpía) el término de transporte  $P(\psi)$  en el espacio de composición por difusión (III) se puede presentar como (et al, Kakhi 1994):

## Ecuaciones de transporte

$$\frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} \left[ \left\langle \nabla \cdot J_{\phi_\alpha} \mathbf{I} \phi = \psi \right\rangle \bar{P}(\psi) \right] = \underbrace{\sum_{\alpha=1}^{N+1} \left\langle \frac{\mu}{S_c} \nabla \phi_\alpha \frac{\partial \bar{P}'(\psi)}{\partial \psi_\alpha} \right\rangle}_{(a)} - \underbrace{\sum_{\alpha=1}^{N+1} \frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} \left\langle \frac{\mu}{S_c} \nabla \phi_\alpha \nabla \bar{P}'(\psi) \right\rangle}_{(b)} \quad (2.37)$$

En flujos con altos números de Reynolds el término (a) es despreciable comparado con el término (b), (et al Pope 1979). Haciendo uso de la ecuación (2.30) la ecuación (2.37) queda como:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} \left[ \left\langle \nabla \cdot J_{\phi_\alpha} \mathbf{I} \phi = \psi \right\rangle \bar{P}(\psi) \right] &= \sum_{\alpha=1}^{N+1} \left\langle \frac{\mu}{S_c} \nabla \phi_\alpha \left( \nabla \phi_\beta \frac{\partial \bar{P}'(\psi)}{\partial \psi_\beta} \right) \right\rangle \\ &= \sum_{\alpha=1}^{N+1} \sum_{\beta=1}^{N+1} \frac{\partial^2}{\partial \psi_\alpha \partial \psi_\beta} \left[ \left\langle \frac{\mu}{S_c} \nabla \phi_\alpha \nabla \phi_\beta \mathbf{I} \phi = \psi \right\rangle \bar{P}(\psi) \right] \end{aligned} \quad (2.38)$$

Para el cierre del término (III), será necesario el uso de los modelos de mezcla, además, las propuestas de cierre de este término son generalmente formuladas por referencia a flujos con turbulencia homogénea e isotrópica.

La finalidad del modelo de mezcla en estas circunstancias es reproducir la evolución de la PDF del escalar (para la media y la varianza), para hacerla tender a una forma aproximadamente Gaussiana (Fig. 2.2).

Uno de estos modelos es el Linear Mean Square Estimation (LMSE) (et al Dopazo 1975). Este modelo es:

$$-\frac{\partial}{\partial \psi} \left( \left\langle \frac{\mu}{S_{c\alpha}} \nabla^2 \phi \middle| \phi = \psi \right\rangle \bar{P}(\psi) \right) = \frac{1}{2} \frac{1}{\tau_{mez}} \frac{\partial}{\partial \psi} (\psi - \langle \phi \rangle) \quad (2.39)$$

Donde  $\tau_{mez} = \frac{\bar{K}}{C_o \bar{\epsilon}}$  es el tiempo característico de la mezcla.

La solución de la ecuación de transporte PDF puede requerir tiempos de calculo considerables dada la alta dimensionalidad de P ( $\psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4, \dots, \psi_{N+1}$ )

Un método viable para la solución de la ecuación de transporte de la PDF con múltiples dimensiones son los métodos de Monte Carlo, uno de los cuales se utilizará en esta tesis y será tratado posteriormente.

## 2.9 Combustión

En este apartado encontraremos algunos aspectos importantes relacionados con la configuración de los sistema de reacción, además, se tratan aspectos que permiten simular a la reacción química, en donde se presenta un modelo sencillo y de gran utilidad en la industria.

Por último se presentan los mecanismos reducidos del metano para poder tener una simulación en un tiempo relativamente pequeño, pero sin perder detalles en los resultados.

### 2.9.1 Clasificación de los sistemas con reacción

Es frecuente clasificar las configuraciones con reacciones químicas de acuerdo al estado de los reactantes cuando entran a la zona donde la reacción tiene lugar. Existen dos tipos de configuraciones; de difusión: en donde los reactantes están segregados en un flujo difusivo; y de premezcla: en donde los reactantes están mezclados.

Existen también sistemas intermedios entre los premezclados y los no premezclados, en donde los reactantes entran parcialmente premezclados a la zona de reacción, pero estos sistemas presentan la característica que uno de los reactantes se aporta en una cantidad adicional, la cual es necesaria para que se de la reacción completa.

Cabe mencionar que el flujo, es un aspecto importante que caracteriza a un sistema con reacción, y dentro de los cuales, se presentan del tipo laminar o turbulento.

En cuanto a la combustión turbulenta premezclada idealizada, considera dos zonas bien predeterminadas las cuales son: la de reactantes y la de productos; dichas regiones están separadas por una zona de reacción en donde se presenta la transformación de reactantes a productos.

### 2.9.2 Modelo Eddy Break Up

En llamas premezcladas con química rápida, el término de reacción química  $S_{\alpha}$  se modela frecuentemente mediante el modelo llamado Eddy Break Up (EBU) (et al Spalding, 1971). Este modelo propuesto inicialmente por Spalding y después modificado por varios autores supone que el factor limitante en la tasa de reacción química no es la velocidad cinética, sino la velocidad a la que los reactantes se mezclan a nivel molecular.

Este modelo de combustión es frecuentemente utilizado en aplicaciones prácticas para describir la reacción química en flujos premezclados.

La ausencia (o presencia de forma simplificada) de efectos cinéticos hacen el uso de este modelo desaconsejable cuando dichos efectos son relevantes (por ejemplo en formación y destrucción de contaminantes, o en fenómenos de ignición y extinción de llama).

### 2.9.3 Mecanismos reducidos

La combustión de hidrocarburos sencillos, como el metano, tienen lugar a través de un gran número de reacciones y de especies. Por lo tanto, en la combustión del metano en aire, presenta de manera real un mecanismo que tiene aproximadamente 279 reacciones y 49 especies si se incluye la formación de  $\text{NO}_x$ . El conjunto de estas reacciones reales y especies que participan en dicho sistema químico se conoce como mecanismo detallado de la reacción.

La presencia de un mecanismo detallado en cálculos de geometrías multidimensionales requiere una gran cantidad de memoria y tiempo de cálculo. Estos requerimientos computacionales se deben no solo a la dimensionalidad del sistema (en términos de especies) si no por su "Stiffness"(rigidez) asociado a la presencia de escalas temporales muy dispares ligadas a las diversas velocidades de reacción.

## Ecuaciones de transporte

---

Para disminuir el número de especies, es práctica habitual, reducir el sistema químico detallado a un número tratable de especies y ecuaciones. El mecanismo resultante se denomina mecanismo reducido.

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

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

Por un lado, los mecanismos sistemáticamente reducidos se obtienen generalmente al aplicar a los llamados mecanismos "skeletal" los cuales se deducen a partir de un análisis del sistema completo que identifica la importancia de las especies y las reacciones en el proceso de combustión, y de esta manera, la reacción que no contribuye de forma importante en la reacción se elimina del mecanismo detallado. El resultado de esta reducción sistemática no es sólo un sistema de ecuaciones más sencillo (por la eliminación de especies) sino también un sistema menos rígido, ya que en las reacciones más rápidas se han puesto en equilibrio.

El análisis y reducción del sistema se hace para determinadas condiciones, por lo que frecuentemente el mecanismo reducido es solo válido para una zona específica del espacio termoquímico; fuera de esa zona, los modelos presentan predicciones con baja exactitud.

Los mecanismos globales se desarrollan típicamente a partir de una proposición inicial en cuanto a especies y reacciones que compondrán el modelo químico. Estas especies y reacciones se pueden escoger con base a un conocimiento previo del sistema y dependiendo de las necesidades de la modelización (por ejemplo, que esté presente determinada especie) o un análisis sistemático para identificar que especies y reacciones son eliminadas.

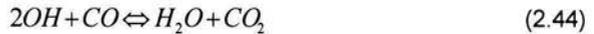
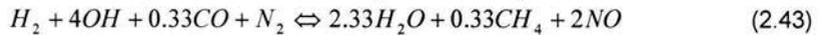
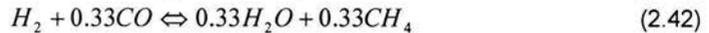
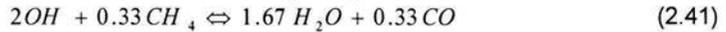
Los parámetros cinéticos asociados a las distintas reacciones del mecanismo propuesto son ajustados de forma que el mecanismo reducido reproduzca algunos de los comportamientos fundamentales del sistema original como por ejemplo la velocidad de propagación del frente de reacción.

### 2.9.4 Mecanismo sistemáticamente reducido de cinco pasos

En esta tesis, se usa un modelo química reducido para la consideración de las tasas químicas finitas. Este sistema químico es reportado por Mallampalli (et al, 1998) y esta basado en el mecanismo completo 2.11 del Gas Research Institute (GRI) (Bowman et al, 1995), el cual consta de 276 reacciones elementales y 49 especies; el mecanismo has sido validado por sus autores en reactores perfectamente mezclados y en llamas laminares para presiones de 1 a 30 atm y tasa de equivalencia de 0.4 a 1.0. El código numérico de reducción automatizado, reportado por Chen (et al,1988) fue usado en la derivación de este mecanismo. El sistema reducido de 5 pasos de reacción y 9 especies es descrito por las siguientes reacciones:

## Ecuaciones de transporte

---



Es bien conocido (Nicol et al, 1995) que en LPC, las tres rutas de formación de NOx (térmico o Zeldovich, prompt o súbito, y la ruta de NO<sub>2</sub>) pueden contribuir significativamente en los niveles de NOx (et al, Vicente, W 2000). La formación de todas estas rutas se representa en el mecanismo previo por el paso de reacción (2.43).

Bajo la hipótesis de igual difusividad de las especies y en ausencia de pérdidas de calor, el estado termoquímico de este sistema se puede determinar con cinco escalares.

En el presente trabajo, se supone que ellos son la molalidad (número de moles por unidad de masa de la mezcla) de: H<sub>2</sub>O, CH<sub>4</sub>, CO, OH, y NO.

La integración directa, durante el cálculo de la PDF, del sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias (ODE); para el mecanismo reducido requiere tiempos de cálculo relativamente grandes. Por lo tanto, la integración directa del sistema ODE, durante el cálculo de la PDF, es impráctico. Una estrategia para reducir el tiempo de cálculo del esquema químico es el uso de algún método alternativo de representación de la cinética química. Existen varias alternativas que permiten resolver este problema, una de ellas incluye el precálculo de la termoquímica, y su almacenamiento en tablas (look-up table, LUT; (Chen, et al 1989), para su uso durante el cálculo principal. Este método se usa en este trabajo.

# Capítulo 3

## TURBULENCIA

### 3.1 Introducción

En este capítulo, se abordará información relacionada al entorno de la turbulencia, partiendo con una reseña histórica. Es importante tener una cronología de todos los investigadores que han hecho estudios relacionados al fenómeno de vorticidad, debido a que nos brinda bases y experiencias que permiten entender a la turbulencia.

Seguidamente, se comprenderá la forma en que se genera la turbulencia; encontraremos los elementos esenciales para la perturbación de un fluido.

Por último, se abordarán los diferentes modelos de turbulencia utilizados en la simulación numérica de la llama de metano premezclada, presentando algunos aspectos importantes de ellos.

### 3.2 Historia de la turbulencia.

La noción de la turbulencia es aceptada en nuestros días y bien percibida por la gente aunque, tomando parte de la historia, Osborne Reynolds, fue uno de los pioneros en el estudio de la turbulencia en los flujos, que denominó a este tipo de movimiento como un "movimiento sinuoso".

En este sentido, podemos percibir la palabra turbulencia; a pesar que existen muchos significados de lo que es. En algunos diccionarios se menciona como agitación, conmoción, disturbacia; en donde se torna muy general y no es lo suficiente como para caracterizar a la turbulencia en la actualidad.

La idea relacionada con los flujos y la turbulencia empezó cuando existió la necesidad de utilizar el agua, y las primeras visiones se generaron por la necesidad de suministrar agua a las viviendas en donde ya se encontraban establecidas aldeas o poblaciones, empezando por generar canales y redes de irrigación. Pues bien, en Roma ya se habían construidos suministros de agua, así como en Francia y en China, en donde en este último se generó el proyecto civil más importante en su tiempo, el cual fue el control de avenidas del río amarillo; todo esto antes del renacimiento.

Cabe señalar que todos esos trabajos hidráulicos fueron diseñados y construidos sobre bases hidráulicas puramente empíricas.

Es de gran interés saber que Da Vinci, inicia dicho periodo (1452-1519), y precursor del descubrimiento de los vórtices; es decir, la turbulencia; todo esto lo pudo lograr debido a que existió la necesidad de observar los fenómenos que se podían generar en la irrigaciones de los canales de agua, con tal descubrimiento, el propio Da Vinci genera un autorretrato en donde presenta una nota diciendo: "Observando los movimientos del agua superficial, éstos son similares a rizos de cabellos. El flujo del agua consiste de dos tipos de vórtices; un movimiento vorticoso es promovido por las líneas de corriente del flujo principal, mientras que el otro es generado intermitentemente por flujo separado contrario a las líneas de corriente principal"

## Turbulencia

---

Después de Da Vinci, se siguieron ciertas experimentaciones con el rozamiento en los fluidos de baja velocidad a través de tuberías, los cuales, fueron realizados independientemente en 1839 por el fisiólogo francés Jean Louis Marie Poiseuille, quien se interesaba en el flujo de la sangre, y en 1840 por el ingeniero hidráulico alemán Gotthilf Heinrich Ludwig Hagen. El primer intento de incluir los efectos de la viscosidad en las ecuaciones matemáticas se debió al ingeniero francés Claude Louis Marie Navier en 1827 e, independientemente, al matemático británico George Gabriel Stokes, quien en 1845 perfeccionó las ecuaciones básicas para los fluidos viscosos incompresibles. Actualmente se les conoce como ecuaciones de Navier-Stokes.

A mediados del siglo XIX Osborne Reynolds, quien realizó los primeros estudios serios sobre la inestabilidad de flujos, se caracterizó por hacer investigación en conductos cerrados en donde demostró la existencia de dos tipos de flujo viscoso; a velocidades bajas, las partículas del fluido siguen las líneas de corriente (flujo laminar), y los resultados experimentales coinciden con las predicciones analíticas. A velocidades más elevadas, surgen fluctuaciones en la velocidad del flujo, o remolinos (flujo turbulento), en una forma que ni siquiera en la actualidad se puede predecir completamente.

Reynolds también determinó que la transición del flujo laminar al turbulento era función de un único parámetro, que desde entonces se conoce como número de Reynolds.

El número de Reynolds, que carece de dimensiones, es el producto de la velocidad, la densidad del fluido y el diámetro de la tubería dividido entre la viscosidad del fluido; si menor de 2100, el flujo a través de la tubería es laminar; cuando los valores son más elevados suele ser turbulento.

En este sentido, la concepción del número de Reynolds es esencial para gran parte de la moderna mecánica de fluidos.

Por otro lado, Reynolds hizo otra contribución muy importante a la teoría de la turbulencia con la deducción de las ecuaciones medias de movimiento para flujo turbulento, la cual se ha visto anteriormente.

Casi al mismo tiempo en que Reynolds llevaba a cabo sus experimentos, Lord Rayleigh comenzó sus investigaciones teóricas de estabilidad de flujos paralelos en fluidos no viscosos.

Su aproximación básica ha sido tomada en cuenta en la mayoría de las últimas investigaciones, para determinar si una pequeña perturbación en forma de un tren infinito de ondas de amplitud uniforme, crece o decrece a través del tiempo. Un resultado importante fue cuando realizó una prueba en donde encontró que, una condición necesaria para que un flujo paralelo sea inestable, es que su perfil de velocidad tenga un punto de inflexión.

De esta manera, puedo agregar que, la idea de un flujo turbulento puede ser tratado como un flujo laminar con ciertas propiedades del flujo, pues bien, se genera una idea básica, la cual proviene de la introducción de los esfuerzos de turbulentos de Reynolds que fue puesta en marcha por Boussinesq, quien supuso que el esfuerzo turbulento cortante es proporcional al gradiente de velocidad, al igual que los esfuerzos cortantes viscosos en un flujo laminar, pero con un factor de proporcionalidad diferente.

El uso de una viscosidad turbulenta es común en teorías aproximadas para el flujo medio, y de esta manera, se ha encontrado que un valor constante de la viscosidad

## Turbulencia

---

turbulenta ha conducido a una representación bastante buena de la distribución de la velocidad media en flujos turbulentos libres (estelas, chorros etc.), que para flujos de pared (flujos en tuberías, en canales, capa límite) es necesario emplear hipótesis más refinadas con respecto a cómo varía la distribución de la viscosidad turbulenta con la distancia a partir de la pared; no fue sino hasta después de la publicación de los trabajos hechos por Prandtl y Von Karman en el periodo de 1920-1930 que se desarrollaron métodos de cálculo con los cuales se obtenían buenas aproximaciones basados en parámetros empíricos con valores muy pequeños para el campo medio de velocidad y que mostraba una concordancia razonable con los datos experimentales.

La complejidad de los flujos viscosos, y en particular de los flujos turbulentos, restringió en gran medida los avances en la dinámica de fluidos hasta que el ingeniero alemán Ludwig Prandtl observó en 1904 que en muchos flujos, pueden separarse en dos regiones principales.

La región próxima a la superficie está formada por una delgada capa límite donde se concentran los efectos viscosos y en la que puede simplificarse mucho el modelo matemático. Fuera de esta capa límite, se pueden despreciar los efectos de la viscosidad, y pueden emplearse las ecuaciones matemáticas más sencillas para flujos no viscosos. La teoría de la capa límite ha hecho posible gran parte del desarrollo de las alas de los aviones modernos y del diseño de turbinas de gas y compresores.

El modelo de la capa límite no sólo permitió una formulación mucho más simplificada de las ecuaciones de Navier-Stokes en la región próxima a la superficie del cuerpo, sino que llevó a nuevos avances en la teoría del flujo de fluidos no viscosos, que pueden aplicarse fuera de la capa límite.

La dificultad fundamental, es que el campo fluctuante depende de manera no lineal de la distribución de la velocidad media, la cual es gobernada por las ecuaciones de Reynolds ya que contienen la transferencia de momentum medio por las velocidades fluctuantes.

El interés por los flujos compresibles comenzó con el desarrollo de las turbinas de vapor, interés generado por el inventor británico Charles Algernon Parsons y el ingeniero sueco Carl Gustaf Patrik de Laval durante la década de 1880. En esos mecanismos se descubrió por primera vez el flujo rápido de vapor a través de tubos, y la necesidad de un diseño eficiente de turbinas que llevó a una mejora del análisis de los flujos compresibles.

Uno de los principios básicos del flujo compresible es que la densidad de un gas cambia cuando el gas se ve sometido a grandes cambios de velocidad y presión. Al mismo tiempo, su temperatura también cambia, lo que lleva a problemas de análisis más complejos. Pues bien, el comportamiento de flujo de un gas compresible depende de si la velocidad de flujo es mayor o menor que la velocidad del sonido. El sonido es la propagación de una pequeña perturbación, u onda de presión, dentro de un fluido.

Otra etapa de los flujos fue cuando se empezaron a encontrar con velocidades muy elevadas y como consecuencia tomaron como referencia a la velocidad del sonido; la cual en el aire a 20 °C, es de unos 344 metros por segundo. Si la velocidad de flujo es menor que la velocidad del sonido la consideramos como flujo subsónico.

Las ondas de presión pueden transmitirse a través de todo el fluido y así adaptar el flujo que se dirige hacia un objeto. Por tanto, el flujo subsónico que se dirige hacia el ala

## Turbulencia

---

de un avión se ajustará con cierta distancia de antelación para fluir suavemente sobre la superficie.

En el flujo supersónico, las ondas de presión no pueden viajar corriente arriba para adaptar el flujo. Por ello, el aire que se dirige hacia el ala de un avión en vuelo supersónico no está preparado para la perturbación que va a causar el ala y tiene que cambiar de dirección repentinamente en la proximidad del ala, lo que conlleva una compresión intensa u onda de choque.

El ruido asociado con el paso de esta onda de choque sobre los observadores situados en tierra constituye el estampido sónico de los aviones supersónicos. Frecuentemente se identifican los flujos supersónicos por su número de Mach, que es el cociente entre la velocidad de flujo y la velocidad del sonido. Por tanto, los flujos supersónicos tienen un número de Mach superior a 1.

Una vez teniendo en consideración a los flujos supersónicos, la última aproximación de la turbulencia tratando flujos, se construyó sobre ideas de la teoría cinética de gases. En dichos campos turbulentos, las fluctuaciones de velocidad y presión son estadísticamente independientes de la posición y muestran una dependencia no direccional. Como resultado de esto, Taylor (1935) propuso una estadística de la turbulencia isotrópica, la cual es una turbulencia ideal pero de gran importancia en la investigación e introdujo el concepto de correlación de velocidad que se pueden tratar como generalizaciones de los esfuerzos de Reynolds.

Para cuando inició la llegada de los hilos calientes y los transductores de presión se empezó a generar investigación más profunda de la turbulencia, ya que se pudieron tener mediciones más puntuales; todo esto conllevó a que se presumiera que se iban a poder explicar todas las estructuras turbulentas tanto teóricamente como experimentalmente por medio de herramientas estadísticas convencionales tales como correlación espacio tiempo y el análisis espectral. La turbulencia fue considerada completamente aleatoria y caótica.

En la década de los 70s se generó un progreso en la mecánica de fluidos computacional con la cual se pueden calcular flujos turbulentos por medio de computadoras muy rápidas, además de que se empezaron a desarrollar modelos de turbulencia de ecuaciones múltiples, los modelos de esfuerzos totales, los modelos algebraicos de esfuerzos basados en la teoría estadística de la turbulencia y así continuaron generando nuevos modelos matemáticos de turbulencia que fueron más específicos para ciertos fluidos.

### 3.3 Cómo se inicia la turbulencia

Si bien se ha observado con anterioridad que la turbulencia ha sido de gran interés en todo tiempo, se debe tratar de conocer el por qué se genera dicho fenómeno, con ello, tendremos la posibilidad de tomar atención muy particular a este punto.

Todo empieza con una perturbación de un flujo que se encontraba naturalmente uniforme, formando intermitencias, las cuales con el paso del tiempo se empiezan a propagar hasta que se llena todo el flujo, logrando así, que se contamine dicho flujo hasta que todo se inestabilice y persista como un estado del movimiento.

## Turbulencia

De esta manera, una fuente de turbulencia generadora de remolinos o vórtices se puede encontrar en la superficie del flujo y cuando existe discontinuidad, se presentará una marcada diferencia de velocidades entre sus capas adyacentes.

Ejemplos de ello, son las turbulencias que se presentan en la vecindad de las aristas o bordes angulosos que sobresalen en cuerpos burdos, en los bordes de salidas de perfiles aerodinámicos, alabes guía de turbinas y en las zonas de separación de la capa límite como se muestra en las siguientes figuras (3.1).

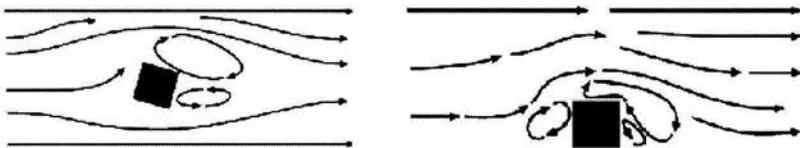


Fig. 3.1 Fuentes generadoras de remolinos.

En las superficies con discontinuidades de velocidad, existe una tendencia a que se formen ondulaciones, ya sea por acción de agentes externos o por perturbaciones transportadas por el mismo fluido, y son estas ondulaciones las que tienden a ser inestables y a expandirse a gran escala.

Podemos ver que a lo largo de cada línea de corriente existe una presión alta sobre el lado cóncavo de cada cresta o valle de la onda y una presión baja del lado convexo, por consiguiente, una superficie ondulada es inestable y tiende a amplificarse para luego rizarse y romperse en remolinos separados; y en un limitado intervalo de condiciones de velocidad, estos remolinos vorticosos pueden conservar su identidad, pero es más frecuente que se degeneren en fluctuaciones aleatorias.

Además, la turbulencia se produce en flujos cortantes, en los cuales se presenta un gradiente de velocidad sin discontinuidad abrupta. Se presenta una tendencia a desarrollar perturbaciones en flujos cortantes ordinarios.

### 3.4 Modelos de turbulencia.

En este apartado, veremos los diversos modelos de turbulencia que se utilizan en este trabajo, en donde estarán presentes modelos de tipo "viscosidad turbulenta", como el modelo conocido como K- $\epsilon$  estándar.

Por otro lado, encontraremos al modelo de transporte de los esfuerzos de Reynolds (RSTM), y para finalizar veremos el modelo de esfuerzos de Reynolds algebraico y explícito (EASM). Este modelo explícito es quizás el menos conocido que los anteriores y calcula el tensor de esfuerzos de Reynolds de forma explícita.

Se inicia esta sección con la ecuación exacta para los esfuerzos de Reynolds y seguida por los cierres de segundo orden que constituyen el transporte de esfuerzos de Reynolds.

La ecuación de transporte exacta para los esfuerzos de Reynolds  $(u_i u_j)$  es (et al, Jones 1979):

## Turbulencia

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t} (\overline{\rho u_i'' u_j''}) + \frac{\partial}{\partial x_k} (\overline{\rho \tilde{u}_k u_i'' u_j''}) = & - \underbrace{\left( \overline{u_i''} \frac{\partial \overline{P}}{\partial x_j} + \overline{u_j''} \frac{\partial \overline{P}}{\partial x_i} \right)}_{(a)} - \underbrace{\left( \overline{u_i''} \frac{\partial \overline{p'}}{\partial x_i} + \overline{u_j''} \frac{\partial \overline{p'}}{\partial x_j} \right)}_{(b)} \\
 - \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_k} (\overline{\rho \tilde{u}_k u_j'' u_k''})}_{(c)} - \underbrace{\rho \left( u_i'' u_k'' \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_k} + u_j'' u_k'' \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_k} \right)}_{(d)} - \underbrace{\left( \tau_{ik} \frac{\partial u_j''}{\partial x_k} + \tau_{jk} \frac{\partial u_i''}{\partial x_k} \right)}_{(e)}
 \end{aligned} \quad (3.1)$$

Cabe señalar que la doble tilde arriba de algunas variables indica el promediado de Favre, aunado a la tilde tradicional de dichos promediados; lo cual se puede ver en el apartado de promediado de ecuaciones en el capítulo 2.

Los términos del lado derecho de la ecuación (3.1) representan: el efecto del gradiente de presión media (a), la correlación entre gradientes de presión fluctuante y fluctuaciones de velocidad (b), el transporte turbulento de los esfuerzos de Reynolds (c), la producción de los esfuerzos de Reynolds por velocidad de deformación media (d), y (e) están presentes correlaciones desconocidas, y por lo tanto requieren modelización.

El término que expresa el efecto del gradiente de presión media se puede escribir como:

$$- \left( \overline{u_i''} \frac{\partial \overline{P}}{\partial x_j} + \overline{u_j''} \frac{\partial \overline{P}}{\partial x_i} \right) = \frac{\overline{\rho' u_j''}}{\rho} \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_i} + \frac{\overline{\rho' u_i''}}{\rho} \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_j} \quad (3.2)$$

Donde la correlación  $\overline{\rho' u_j''}$  se puede modelar de una ecuación de conservación truncada como (et al, Jones 1979):

$$\overline{\rho' u_j''} = - \frac{1}{4.3} \frac{\tilde{k}}{\tilde{\epsilon}} u_i'' u_j'' \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_j} \quad (3.3)$$

Donde  $\tilde{K}$  es la energía cinética turbulenta y  $\tilde{\epsilon}$  es la tasa de disipación de la energía cinética turbulenta.

Para la modelización de la correlación entre gradientes de presión fluctuante y fluctuaciones de velocidad (b) tenemos lo siguiente (et al, Lumley, 1975):

$$\begin{aligned}
 \underbrace{\left( \overline{u_i''} \frac{\partial \overline{p'}}{\partial x_j} + \overline{u_j''} \frac{\partial \overline{p'}}{\partial x_i} \right)}_{(B)} = & - \underbrace{\left( \overline{u_i''} \frac{\partial \overline{p'}}{\partial x_j} + \overline{u_j''} \frac{\partial \overline{p'}}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \overline{u_k''} \frac{\partial \overline{p'}}{\partial x_k} \right)}_{(A)} \\
 - \underbrace{\left( \frac{2}{3} \delta_{ij} \overline{\frac{\partial \overline{p'}}{\partial x_k} u_k''} + \frac{2}{3} \delta_{ij} \overline{p' \frac{\partial u_k''}{\partial x_k}} \right)}_{(a)} & \quad \underbrace{\left( \frac{2}{3} \delta_{ij} \overline{p' \frac{\partial u_k''}{\partial x_k}} \right)}_{(b)}
 \end{aligned} \quad (3.4)$$

En donde (A) es la parte re-distributiva y (B) es la parte isotrópica; (a) es el transporte por presión y (b) de dilatación por presión. El término (a) se suma al término de transporte turbulento de los esfuerzos de Reynolds (c) para generar el siguiente término:

## Turbulencia

---

$$\frac{\partial}{\partial x_k} (C_{ijk}) = \frac{\partial}{\partial x_k} \left( \rho u_i'' u_j'' u_k'' + \frac{2}{3} \delta_{ij} \rho' u_k'' \right) \quad (3.5)$$

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

$$\overline{\tau_{ik} \frac{\partial u_j''}{\partial x_k}} + \tau_{ij} \frac{\partial \overline{u_i''}}{\partial x_k} = \overline{\tau_{ij}}^{(T)} \quad (3.6)$$

Si se supone isotropía local, el término (T) se puede escribir en función de la disipación de energía turbulenta como (et al, Jones 1979):

$$\varepsilon_{ij} = \frac{2}{3} \overline{\varepsilon}^{(Y)} \delta_{ij} \quad (3.7)$$

La tasa de disipación de energía cinética turbulenta (Y) se puede calcular con una ecuación de transporte que es la siguiente (et al, Jones 1979):

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho \varepsilon u_j) &= C_{\varepsilon 1} \rho \frac{\varepsilon}{K} u_k'' u_j'' \frac{\partial \overline{u}_k}{\partial x_j} - C_{\varepsilon 2} \rho \frac{\varepsilon^2}{K} \\ &+ \frac{\partial}{\partial x_j} \left( C_{\varepsilon 3} \rho \frac{K}{\varepsilon} u_j'' u_k'' \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right) \end{aligned} \quad (3.8)$$

Para la parte re-distributiva de la corrección entre gradientes de presión fluctuantes y fluctuaciones de velocidad expresada anteriormente podemos encontrar que existen variaciones (mediante la variación de constantes) en la modelación de este término, dependiendo del autor; y denotando a los modelos como:

$$\begin{aligned} \Pi_{ij} &= -C_1 \rho \varepsilon \left( \frac{u_i' u_j''}{k} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \right) + C_2 \delta_{ij} \rho u_i'' u_m'' \frac{\partial \overline{u}_l}{\partial x_m} - C_3 \rho P_{ij} \\ &+ C_4 \rho K \left( \frac{\partial \overline{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} C_4 \rho K \frac{\partial \overline{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} - \left( \frac{2}{3} C_2 + C_3 \right) \left( \rho u_i'' u_j'' \frac{\partial \overline{u}_l}{\partial x_i} + \rho u_i'' u_l'' \frac{\partial \overline{u}_l}{\partial x_j} \right) \end{aligned} \quad (3.9)$$

Donde:

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

Las constantes podemos encontrarlas de acuerdo al autor de los modelos antes mencionado (Vicente et al, 2000).

## Turbulencia

---

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho c u_i'' u_j'') + \frac{\partial}{\partial x_k} (\rho \bar{u}_k u_i'' u_j'') = - \frac{\partial}{\partial x_k} (C_{ijk}) \\ - \rho \left( u_i'' u_j'' \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_k} + u_j'' u_k'' \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_k} \right) - \frac{2}{3} \rho \bar{\epsilon} \delta_{ij} + \Pi_{ij} \end{aligned} \quad (3.10)$$

Una vez utilizando todos los modelos de cada elemento, encontramos la nueva ecuación de los esfuerzos de Reynolds (ec. 3.10).

### Modelos de viscosidad turbulenta.

Se presentará otro método para determinar los esfuerzos de Reynolds, el cual está basado en el concepto de viscosidad turbulenta, en donde se supone que de la misma manera que en un flujo laminar los esfuerzos viscosos son proporcionales al gradiente de la velocidad, en un flujo turbulento, los esfuerzos causados por las fluctuaciones turbulentas son proporcionales al gradiente de la velocidad media. Esa relación entre los esfuerzos de Reynolds y las variables medias es :

$$\rho u_i'' u_j'' = -\rho \nu_T \left( \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) + \frac{2}{3} \left( \rho \bar{K} + \rho \nu_T \frac{\partial \bar{u}_k}{\partial x_k} \right) \delta_{ij} \quad (3.11)$$

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

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

$$\rho u_i'' \phi_\alpha'' = -\rho \frac{\nu_T}{S_{CT}} \frac{\partial \bar{\phi}_\alpha}{\partial x_i} \quad (3.12)$$

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

La viscosidad turbulenta se puede calcular de distintas formas, dado lugar a una gran cantidad de modelos con un número de variables de ecuaciones diferenciales, los más populares de estos modelos son los de la familia K- $\epsilon$ .

Con respecto al modelo de turbulencia K- $\epsilon$ , lo podemos definir como sigue:

$$\nu_T = C_\mu \frac{\bar{K}^2}{\bar{\epsilon}} \quad (3.13)$$

Donde  $C_\mu$  es una constante determinada experimentalmente. Los valores de  $\bar{K}$  y  $\bar{\epsilon}$  se calculan a partir de una ecuación de transporte (et al, Jones, 1972):

## Turbulencia

---

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \bar{K}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho \bar{u}_j \bar{K}) + \overline{\rho \bar{u}_j \bar{u}_j} \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_j} = - \frac{\partial}{\partial x_j} \underbrace{\left( \frac{1}{2} \overline{\rho u_j'' u_j'' u_j''} + \overline{u_j'' P'} \right)}_{(a)} - \bar{\rho} \bar{\varepsilon} \quad (3.14)$$

El término (a) se aproxima como (et al Launder, Spalding, 1972):

$$- \underbrace{\left( \frac{1}{2} \overline{\rho u_j'' u_j'' u_j''} + \overline{u_j'' P'} \right)}_{(a)} \approx \frac{\mu_T}{\sigma_K} \frac{\partial \bar{K}}{\partial x_j} \quad (3.15)$$

y sustituyendo la ecuación (3.11) y (3.15) en la ecuación (3.14) nos da:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \bar{K}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho \bar{u}_j \bar{K}) = \bar{\rho}(P_K - \bar{\varepsilon}) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \bar{\rho} \frac{\nu_T}{\sigma_K} \frac{\partial \bar{K}}{\partial x_j} \right) \quad (3.16)$$

Donde:

$$P_K = \nu_T \left( \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{2}{3} \left( \bar{K} + \nu_T \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_i} \right) \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_i} \quad (3.17)$$

La ecuación de la disipación de la energía cinética turbulenta  $\bar{\varepsilon}$  se obtiene partiendo de la siguiente manera (et al, Rodi, 1984):

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \bar{\varepsilon}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho \bar{u}_j \bar{\varepsilon}) = \bar{\rho} \frac{\bar{\varepsilon}}{\bar{K}} (C_{\varepsilon 1} P_K - C_{\varepsilon 2} \bar{\varepsilon}) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \bar{\rho} \frac{\nu_T}{\sigma_K} \frac{\partial \bar{\varepsilon}}{\partial x_j} \right) \quad (3.18)$$

El modelo de esfuerzos de Reynolds algebraico y explícito, calcula el tensor de esfuerzos de Reynolds mediante (et al, Speziale, 1998):

$$\tau_{ij} = \frac{2}{3} k \delta_{ij} - \alpha_1^* \left( \frac{k^2}{\varepsilon} \right) \bar{S}_{ij} - \alpha_2^* \left( \frac{k^3}{\varepsilon^2} \right) (\bar{S}_{ik} \bar{\omega}_{kj} + \bar{S}_{jk} \bar{\omega}_{ki}) + \alpha_3^* \left( \frac{k^3}{\varepsilon^2} \right) \left( \bar{S}_{ik} \bar{S}_{kj} - \frac{1}{3} \bar{S}_{kl} \bar{S}_{kl} \delta_{ij} \right) \quad (3.19)$$

Donde

$$\alpha_i^* = \alpha_i \left( \frac{3}{3 - 2\eta^2 + 6\varepsilon^2} \right)$$

Para  $i=1, 2, 3$ . El término  $\alpha$  se puede calcular como:

## Turbulencia

---

$$\alpha_1 = \left(\frac{4}{3} - c_2\right)g, \quad \alpha_2 = \frac{1}{2}\left(\frac{4}{3} - c_2\right)(2 - c_4)g, \quad \alpha_3 = \left(\frac{4}{3} - c_2\right)(2 - c_3)g^2$$

$$g = \left(\frac{1}{2}c_1 + \left(\frac{P}{\varepsilon}\right) - 1\right)^{-1}, \quad \eta = \frac{1}{2}\left(\frac{\alpha_3}{\alpha_1}\right)\left(\frac{K}{\varepsilon}\right)(\overline{S_{ij}}\overline{S_{ij}})^{\frac{1}{2}}, \quad \xi = \left(\frac{\alpha_2}{\alpha_1}\right)\left(\frac{K}{\varepsilon}\right)(\overline{\omega_{ij}}\overline{\omega_{ij}})^{\frac{1}{2}}$$

Las constantes C1-C4 tienen los siguientes valores:

$$C_1=3.0, C_2=0.8, C_3=1.75, C_4=1.31$$

$$\text{Y } \frac{P}{\varepsilon} = \frac{(C_{\varepsilon 2} - 1)}{(C_{\varepsilon 1} - 1)} \text{ donde } C_{\varepsilon 1} = 1.44 \text{ y } C_{\varepsilon 2} = 1.83$$

En la ecuación (3.19)  $k$  y  $\varepsilon$  son la energía cinética turbulenta y su tasa de disipación respectivamente; ambos parámetros se calculan con el modelo  $k$ - $\varepsilon$  estándar

# Capítulo 4

## MÉTODOS DE SOLUCIÓN

### 4.1 Introducción

La principal atención en este apartado, se torna hacia la solución de las ecuaciones que componen el modelo de flujo reactivo, comenzando con la descripción del método de volúmenes finitos que se utiliza para resolver las ecuaciones que caracterizan la aerodinámica del flujo medio.

Después se presenta el modelo de Monte Carlo, con el cual se resuelve la ecuación de transporte de la PDF. Dicha ecuación merece atención especial, ya que presenta para su solución el inconveniente adicional de su alta dimensionalidad.

Las variables independientes de la PDF son, además del espacio y tiempo, los escalares que determinan el estado termoquímico local de la mezcla (típicamente concentraciones).

La solución de la ecuación de transporte de la PDF se acopla al método de volúmenes finitos que resuelve las ecuaciones promediadas de continuidad, cantidad de movimiento y estadística de la turbulencia, que al final del capítulo, dicho acoplamiento, se abordará con más atención.

### 4.2 Método de volúmenes finitos

Las ecuaciones medias de continuidad, cantidad de movimiento y del modelo de turbulencia se pueden representar mediante una ecuación general, donde la variable dependiente es  $\phi$ :

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

Donde  $\Gamma_{\phi}$  es el coeficiente de difusión y  $\bar{S}_{\phi}$  es el término fuente. Los términos del lado izquierdo de la ecuación 4.1 son el término transitorio, convectivo y difusivo. Los términos  $\Gamma_{\phi}$  y  $\bar{S}_{\phi}$  están especificadas para cada variable  $\phi$ .

La ecuación (4.1) se puede discretizar con el método de volúmenes finitos. Con este método, el dominio se divide en pequeños volúmenes de control como lo muestra la figura 4.1, asociado a cada uno de ellos un punto nodal.

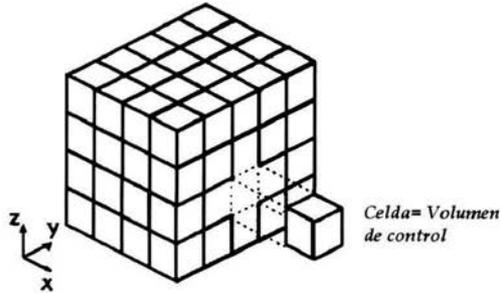


Fig. 4.1 Representación del sistema discretizado en volúmenes finitos

De forma similar, se discretiza el tiempo en intervalos similares. La ecuación diferencial se integra en cada volumen de control y en cada intervalo temporal. El resultado es una ecuación discretizada que relaciona los valores de  $\phi$  para un grupo determinado de puntos nodales.

Esta ecuación algebraica expresa el principio de conservación de  $\phi$  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 se puede expresar en forma general como:

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

En donde el subíndice 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.

De esta manera, en el caso de una malla cartesiana, decajada y uniforme (celdas de iguales dimensiones), un volumen de control es bidimensional, por sencillez, es mostrado en la figura 4.2 en donde el espesor de la celda en la dirección z puede considerarse la unidad.

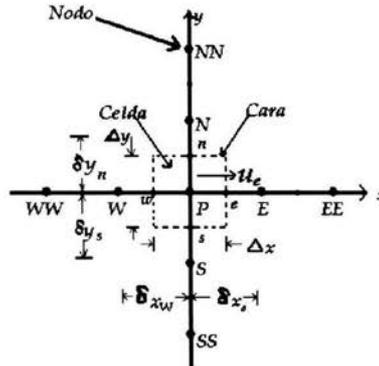


Fig. 4.2 Diagrama esquemático de un volumen de control bidimensional

## Métodos de solución

---

En una malla decalada, las variables escalares como por ejemplo, la presión, la entalpía o las fracciones másicas se encuentran definidas en el centro de la celda, mientras que los componentes de velocidad correspondientes a la celda se encuentran desplazadas en cada dirección a las caras de la celda.

En la figura 4.2 se muestra la notación de la celda y de sus vecinas. Dado una celda P, sus vecinas se notarán según las iniciales de los puntos cardinales (en Inglés) en las direcciones x e y; por otro lado como low y high en la dirección z. Las caras de la celda se notan con la misma nomenclatura pero con letras minúsculas.

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

A continuación, se presentan los términos de la ecuación discretizada 4.2, definiendo los símbolos F, D y Pe como:

$$F = \overline{\rho \vec{v}}_i \quad D = \frac{\Gamma}{\delta_i} \quad Pe = \frac{F}{D} \quad (4.3)$$

$\vec{v}_i$  = Velocidad de la cara i

$\delta_i$  = Distancia entre los nodos que incluyen la cara i

Pe = Número de Peclet

El número de Peclet es una relación entre la convección y la difusión; por otro lado, las expresiones F y D, representan el efecto de los términos convectivo y difusivo de la ecuación de transporte mencionada anteriormente.

Los coeficientes  $a_i$  de la ecuación (4.2) son:

$$a_i = D_i f(|Pe|_i) + \max(-f_i, 0) \quad (4.4)$$

Los valores de F y D en la cara de la celda de la ecuación (4.4) son:

$$F_i = (\overline{\rho \vec{v}})_i \Delta i, \quad D_i = \frac{\Gamma_i \Delta i}{(\delta_i)}, \quad i = n, s, e, w \quad (4.5)$$

Donde  $\Delta i$  es la longitud de la cara i. Para determinar  $F_i$  se necesita conocer tanto  $\overline{\rho}$  y  $\vec{v}_i$  en la cara de la celda.

El cálculo del término convectivo de la ecuación de transporte (4.1) requiere también el conocimiento de la variable escalar  $\tilde{\phi}$  en la cara de la celda. La velocidad  $\vec{v}_i$  está calculada en la cara si la malla es decalada; pero  $\overline{\rho}$  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 en la precisión y convergencia de la solución y al calcular  $\overline{\rho}$  y  $\tilde{\phi}_i$  da lugar a los llamados esquemas de discretización (Parte de ello se presentan en el apéndice). La función  $f(|Pe|)$  visto anteriormente depende del esquema de interpolación que pueden

## Métodos de solución

---

ser esquema de diferencias desplazadas en donde  $f(|Pe|)=1$ ; quizá se podría presentar otro esquema de discretización como el de diferencias centradas, aunado al antes mencionado, y a los no lineales que sirven para discretizar el término convectivo de la ecuación de cantidad de movimiento y en los modelos de turbulencia.

El coeficiente para el término transitorio es:

$$a_T = \frac{\bar{\rho}_T \Delta_x \Delta_y}{\Delta t} \quad (4.6)$$

Para el cálculo  $D_i$  en la ecuación (4.5) se necesita obtener el coeficiente de difusión  $\Gamma$  en la cara de la celda; dicho coeficiente de difusión no es necesariamente una constante, sino probablemente esté en función de valores variables que se conocen en los nodos (por ejemplo la temperatura). Por lo tanto, es necesario interpolarlo a la cara.

El término fuente de la ecuación general  $\bar{S}_\phi$  en la ecuación (4.1) se linealiza como:

$$\bar{S}_\phi = \bar{S}_{\phi,c} + \bar{S}_{\phi,v} \tilde{\phi}_p \quad (4.7)$$

Donde  $\bar{S}_{\phi,v}$  se elige de acuerdo con la relación existente entre  $\bar{S}_\phi$  y  $\tilde{\phi}$  en caso de depender el primero del segundo.

El objetivo de la linealización del término fuente es mejorar la convergencia de la solución. Al tener esta suposición los términos  $B$  y  $a_p$  de la ecuación (4.2) encontramos que:

$$B = \bar{S}_{\phi,c} \Delta x \Delta y + a_T \tilde{\phi}_T \quad (4.8)$$

$$a_p = a_e + a_w + a_n + a_s + a_T - \bar{S}_{\phi,v} \Delta x \Delta y \quad (4.9)$$

La ecuación (4.2) se aplica en cada celda del dominio, para cada  $\tilde{\phi}$  y para cada caso temporal  $\Delta t$ , por lo que se tiene un sistema de ecuaciones lineales (los coeficientes "a" pueden depender, directa o indirectamente de  $\tilde{\phi}$ , por lo que el sistema es 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, presenta un inconveniente de que en la presión, su gradiente aparece como término fuente en estas ecuaciones de cantidad de movimiento y no una ecuación propia con la que se pueda calcularse.

Una solución ampliamente utilizada es transformar la ecuación de continuidad en una ecuación para la presión y, de lo cual podemos encontrar algunos algoritmos iterativos que utilizan este procedimiento de la familia SIMPLE (Semi-implicit method for pressure-linked Equations)

El proceso de solución de este sistema de ecuaciones es iterativo y durante este, las ecuaciones del sistema en general, no se cumple el inbalance entre la parte izquierda

## Métodos de solución

---

y la derecha de la ecuación (residuo). La convergencia del proceso iterativo se da cuando los residuos disminuyen. Para procurar o acelerar esta convergencia se utiliza un método de relajación de algunas de las variables dependientes y propiedades. Existen dos tipos de relajación: la inercial y la lineal.

La relajación inercial se emplea para la velocidad y los parámetros de turbulencia lo cual hace que aumente la dominación diagonal de la matriz de coeficientes al agregar a la ecuación de cualquier variable  $\phi$  el término fuente:

$$\bar{S}_{\phi,r} = \frac{\bar{\rho}V_P}{\Delta t_f} (\bar{\phi}_P^{(n-1)} - \bar{\phi}_P^{(n)}) \quad (4.10)$$

En donde  $V_P$  es el volumen de la celda P,  $\Delta t_f$  es el intervalo de tiempo falso y el superíndice n se refiere al número de iteraciones.

Por otro lado, para la presión y la densidad se emplea la relajación lineal dada por:

$$\bar{\phi}_P^{(n)} = \alpha \bar{\phi}_P^{sol} + (1 - \alpha) \bar{\phi}_P^{(n-1)} \quad (4.11)$$

Donde  $\alpha$  es el factor de relajación, el superíndice "sol" se refiere al valor de la propiedad proporcionado por el solver en la iteración actual. El factor de relajación  $\alpha$  normalmente toma valores entre 0 y 1.

El criterio de convergencia utilizado para determinar 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 sea menor que un determinado porcentaje de un valor de referencia.

En este trabajo se utiliza el código de fluidodinámica computacional PHOENICS para resolver las ecuaciones que describe la aerodinámica del fluido: continuidad, cantidad de movimiento y turbulencia. A dicho código PHOENICS se le ha acoplado un método de Monte Carlo, con el cual se resuelve la ecuación de transporte de la PDF que posteriormente se tratará.

### 4.3 Método de Monte Carlo.

Para obtener la solución de la ecuación de transporte de la PDF, debido a su alta dimensionalidad, se utiliza el método de Monte Carlo, el cual consiste en simular la PDF, mediante un conjunto  $\phi$ , de  $N_P$  vectores llamados partículas, cada uno de los cuales representa una realización del estado termoquímico:

$$\phi = [\phi^{(1)}, \phi^{(2)}, \dots, \phi^{(N_P)}] \quad \phi^{(i)} = \phi_\alpha^{(i)} = [\phi_1^{(i)}, \phi_2^{(i)}, \dots, \phi_N^{(i)}] \quad (4.12)$$

En estas expresiones, el índice superior i, representa el índice de la partícula; el inferior  $\alpha$ , representa el escalar termoquímico dentro de la partícula; N es el número total de propiedades que determinan el estado termoquímico. En la notación de la P ( $\psi$ ) se incluye implícitamente la dependencia de la PDF con la Posición espacial x y el tiempo t.

## Métodos de solución

---

Los métodos de Monte Carlo simulan la función de densidad de probabilidad en el caso límite de que se consideren infinitas partículas, es decir:

$$\bar{P}(\psi) = \lim_{N_p \rightarrow \infty} \phi \quad (4.13)$$

Puesto que el número de partículas es necesariamente finito, el método de Monte Carlo comete un cierto error estadístico que depende del número de partículas y decrece con la raíz cuadrada de éste (error  $\approx N^{-1/2}$ ). Para limitar este error se requiere usar en la simulación un número de partículas tan grande como sea posible.

El método de Monte Carlo consiste en la discretización en el espacio físico y temporal (no en el espacio composicional) de la ecuación de transporte de la PDF mediante la técnica de volúmenes finitos; en cada celda la PDF se simula mediante un conjunto local de partículas.

Los procesos de convección y difusión se simulan con el intercambio estocástico de valores de partículas entre celdas vecinas, y los procesos de mezcla molecular y reacción química se simulan con un cambio en el valor de la partícula local. Los procesos de convección y difusión, mezcla y reacción se aplicarán de forma secuencial al conjunto de partículas utilizando una técnica de paso fraccionado.

A continuación se presenta este método con más detalle. La ecuación de transporte de la PDF (ec. 4.13) se puede discretizar en el espacio y en el tiempo. Esta ecuación discretizada tiene la forma (et al Pope, 1976):

$$\begin{aligned} a_T(\bar{P}_P - \bar{P}_T) &= a_e(\bar{P}_E - \bar{P}_T) + a_w(\bar{P}_E - \bar{P}_T) + \\ a_n(\bar{P}_N - \bar{P}_T) &+ a_s(\bar{P}_S - \bar{P}_T) + a_h(\bar{P}_H - \bar{P}_T) + \\ a_l(\bar{P}_L - \bar{P}_T) &+ V_P S_M + V_P S_Q \end{aligned} \quad (4.14)$$

Donde  $\bar{P}_T$  y  $\bar{P}_P$  son la PDF en la celda P al inicio y al final de un paso temporal  $\Delta t$ , respectivamente,  $V_P$  es el volumen de la celda, y  $S_M$  y  $S_Q$  representan los términos fuente de la mezcla y químico. Re-escribiendo la ecuación (4.14) de forma compacta tenemos lo siguiente:

$$\bar{P}_P = \sum_{i=E,W,N,S,H,L} \frac{a_i}{a_T} (\bar{P}_i - \bar{P}_T) + \bar{P}_T + \frac{V_P}{a_T} (S_M + S_Q) \quad (4.15)$$

La función de densidad de probabilidad  $\bar{P}(\psi)$  se representa en cada celda por el conjunto de  $N_p$  Partículas estocásticas  $\phi$ . El número total del conjunto de partículas  $N_p$  es el mismo en todas las celdas del dominio. A continuación se muestra cómo están dispuestas dichas partículas en una malla bidimensional de volúmenes finitos.

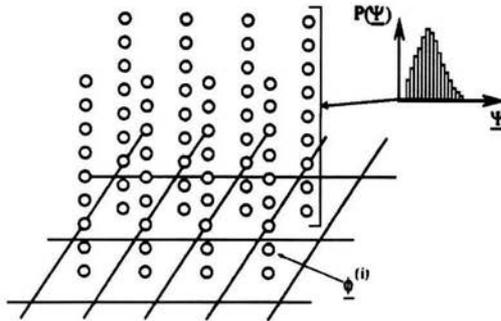


Fig. 4.3 Representación esquemática de las partículas en la malla de volúmenes finitos

Se utiliza una técnica de pasos fraccionados para la simulación estocástica de la ecuación (4.15) y para ello, debemos definir algunos operadores identidad, transporte, reacción y mezcla:

**Identidad: I**

$$P_T = P_T \quad (4.16)$$

**Transporte en cada dirección x, y, z:**

$$T_x \tilde{P}_T = \frac{a_e}{a_T} (\tilde{p}_E - \tilde{P}_T) + \frac{a_w}{a_T} (\tilde{p}_W - \tilde{P}_T) \quad (4.17)$$

$$T_y \tilde{P}_T = \frac{a_n}{a_T} (\tilde{p}_N - \tilde{P}_T) + \frac{a_s}{a_T} (\tilde{p}_S - \tilde{P}_T) \quad (4.18)$$

$$T_z \tilde{P}_T = \frac{a_h}{a_T} (\tilde{p}_H - \tilde{P}_T) + \frac{a_l}{a_T} (\tilde{p}_L - \tilde{P}_T) \quad (4.19)$$

**Reacción: S<sub>Q</sub>**

$$S_Q \tilde{P} = \frac{V_P}{a_T} S_Q \quad (4.20)$$

**Reacción: S<sub>M</sub>**

$$S_M \tilde{P} = \frac{V_P}{a_T} S_M \quad (4.21)$$

En términos de estos operadores, que forman parte de la técnica de pasos fraccionados, y dependiendo del esquema de discretización, la ecuación (4.15) se puede reescribir como un producto de operadores:

$$\tilde{P}_P = (I + T_x)(I + T_y)(I + S_M)(I + S_Q)\tilde{P}_T + O(\Delta t^2) \quad (4.22)$$

La ecuación (4.22) expresa el principio de la técnica de pasos fraccionados: el cual, en la PDF de la celda P evoluciona de un tiempo t a otro t+Δt mediante la aplicación secuencial de cada uno de los operadores. En cada paso intermedio o fraccionado, el

## Métodos de solución

---

operador se aplica al resultado del paso anterior. Esta secuencia de operación se puede escribir como sigue:

$$\tilde{P}_{T,T_i} = (I + T_i)\tilde{P}_T \quad (4.23)$$

$$\tilde{P}_{T,S} = (I + S_M)\tilde{P}_{T,T_i} \quad (4.24)$$

$$\tilde{P}_P = (I + S_Q)\tilde{P}_{T,S} \quad (4.25)$$

Donde  $P_{T,T_i}$  y  $P_{T,S}$  son las funciones de densidad de probabilidad(en la celda P) después de aplicar los operadores transporte y mezcla respectivamente.

Los dos últimos pasos fraccionados mencionados anteriormente se simulan mediante el método de Monte Carlo operando de forma estocástica con las partículas que representan la PDF en cada punto, de forma que el efecto de la simulación, cuando el número de partículas tiende a infinito, sea el mismo que el efecto sobre la PDF del término correspondiente de la ecuación de transporte

Por ejemplo, en la dirección x el paso fraccionado de transporte es:

$$\tilde{P}_{T,T_x} = (I + T_x)\tilde{P}_T \quad - \quad (4.26)$$

Donde  $P_{T,T_x}$  es la PDF en la celda P en un tiempo  $t + \Delta t$  después del paso fraccionado de transporte en la dirección x; el tiempo  $t + \Delta t$  es un tiempo (nacional) intermedio entre  $t$  y  $t + \Delta t$ . Si en la ecuación (4.26) se sustituye la definición del operador transporte en la dirección x se tiene lo siguiente:

$$\begin{aligned} \tilde{P}_{T,T_x} &= \tilde{P}_T + \frac{a_e}{a_T}(\tilde{P}_E - \tilde{P}_T) + \frac{a_w}{a_T}(\tilde{P}_W - \tilde{P}_T) \\ &= \frac{a_e}{a_T}\tilde{P}_E + \frac{a_w}{a_T}\tilde{P}_W + \left(1 - \frac{a_e}{a_T} - \frac{a_w}{a_T}\right)\tilde{P}_T \end{aligned} \quad (4.27)$$

Como la PDF en cada celda se representa por un conjunto de partículas  $\phi$  este proceso se simula con la formación en la celda P de un nuevo conjunto de partículas seleccionadas aleatoriamente de los nodos adyacentes (E y W) y del mismo nodo P en las proporciones indicadas por los coeficientes de la ecuación anterior, esto es:

- $N_P (a_w/a_T)$  partículas del nodo W
- $N_P (a_e/a_T)$  partículas del nodo E
- $N_P (1 - a_w/a_T - a_e/a_T)$  partículas de las que estaban en el nodo P antes de aplicar este paso fraccionado.

La selección de las partículas reemplazadas es aleatoria, y el reemplazamiento es sin reposición. Las partículas de los nodos adyacentes, de las cuales se obtienen los valores de reemplazo, se seleccionan también de forma aleatoria.

El efecto en la PDF en la celda P del proceso de transporte en la dirección x se ilustra a continuación (Fig. 4.4).

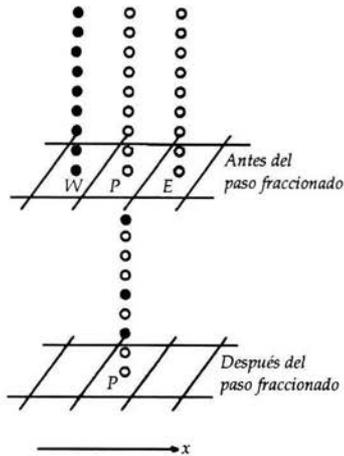


Fig.4.4 Representación del paso fraccionado de transporte en la dirección x para la celda P.

El número de partículas que se toma de cada conjunto no debe ser mayor que el número total de partículas del conjunto ( $N_p$ ).

$$N_p \geq N_p \frac{a_w}{a_T} + \frac{a_e}{a_T} \quad (4.28)$$

La ecuación (4.28) resulta una restricción al paso temporal  $\Delta t$  (debido a la aplicación del paso fraccionado de transporte en x), ya que se tiene que cumplir que:

$$\Delta t_{T_x} \leq \frac{\bar{P}_T V_P}{a_w + a_e} \quad (4.29)$$

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

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

Al implementar un marcador de las partículas intercambiadas, permite evitar que en un mismo paso fraccionado la partícula viaje más de una celda en una dirección. Puesto que la selección aleatoria de partículas puede ser computacionalmente cara cuando en una celda quedan pocas partículas sin marcar, el procedimiento utilizado en este trabajo, es inicialmente determinista, introduciendo la aleatoriedad mediante la remoción de la PDF al final de cada paso fraccionado. El procedimiento es en síntesis el siguiente:

- En el nodo P, donde se está utilizando el paso fraccionado de transporte, las partículas reemplazadas se escogen secuencialmente a partir de la primera.
- En los nodos adyacentes, las partículas reemplazadas se toman secuencialmente a partir de un número de partículas seleccionadas aleatoriamente para cada nodo.

## Métodos de solución

---

- Para garantizar la aleatoriedad del proceso, las partículas que componen la PDF en el nodo considerado son barajadas aleatoriamente en un proceso que se denominará remoción y que se describirá a continuación.

Para el proceso de remoción de partículas, que se hace después de aplicar el paso fraccionado de transporte en cada dirección, se realiza en cada nodo de la malla y consiste en un intercambio de valores entre dos partículas seleccionadas aleatoriamente.

El número de veces que se hace este intercambio de valores entre partículas es suficiente para asegurar que toda la partícula tiene la oportunidad de ser seleccionada para la remoción.

Para el paso fraccionado de mezcla, permite simular el efecto del término de mezcla molecular en la PDF (4.13). Dicho paso fraccionado es:

$$\underbrace{\tilde{P}_{T,S}}_{(a)} = (I + S_M) \underbrace{\tilde{P}_{T,T}}_{(b)} \quad (4.30)$$

Donde (a) y (b) son las funciones de densidad de probabilidad después de los pasos fraccionados de mezcla y transporte respectivamente.

A diferencia del paso fraccionado de transporte, que involucra la interacción de la PDF local con las de las celdas vecinas, el paso fraccionado de la mezcla es local, es decir, involucra partículas de la misma celda.

En cada celda del dominio, el paso fraccionado de la mezcla (4.30) se simula con un cambio en el valor de la partícula de acuerdo al modelo de mezcla usado. Con el modelo de mezcla LMSE, cada partícula estocástica cambia su valor de acuerdo a (capítulo 2):

$$\underbrace{\phi_S^{(i)}}_{(a)} = \underbrace{\phi_{T_i}^{(i)}}_{(b)} - \frac{1}{2} \Delta t \frac{1}{T_{mez}} (\phi_{T_i}^{(i)} - \tilde{\phi}_{T_i}), \quad T_{mez} = \frac{\bar{K}}{C_o \tilde{\epsilon}} \quad (4.31)$$

Donde (a) es el valor de (b) en un tiempo entre  $t$  y  $t + \Delta t$  después del paso fraccionado de mezcla;  $T_{mez}$  es el tiempo de mezcla (en donde  $C_o$ , puede adquirir diferentes valores, que para nuestro caso se tomo como 4),  $\bar{K}$  la energía cinética turbulenta y  $\tilde{\epsilon}$  es la tasa de disipación de la energía cinética turbulenta.

Con respecto al paso fraccionado de reacción química tenemos que:

$$\tilde{P}_p = (I + S_Q) \tilde{P}_{T,S} \quad (4.32)$$

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

Al igual que el paso fraccionado de mezcla, el paso de reacción química también es local. Este proceso se simula con la modificación en el valor de la partícula según la ecuación de evolución del sistema termoquímico (4.33).

## Métodos de solución

$$\frac{\partial}{\partial t}(\phi^{(i)}) = \underbrace{S_{\phi}^{(i)}}_{(a)} \quad (4.33)$$

Donde (a) de la ecuación anterior es la tasa de reacción química. La integración del sistema de ecuaciones diferenciales (4.33) es para el intervalo de tiempo  $\Delta t$ .

### 4.4 Acoplamiento de los métodos de volúmenes finitos y Monte Carlo.

En esta parte se presenta el acoplamiento entre los métodos de Monte Carlo y de Volúmenes finitos; ya que el método de Monte Carlo para resolver la ecuación de transporte de la PDF es explícito y transitorio, el método de volúmenes finitos también ha de ser transitorio.

En los cálculos realizados por cada uno de estos módulos se requiere información externa, que es proporcionada respectivamente por la otra parte.

Para un paso temporal ( $\Delta t$ ) dado, en los cálculos del método de Monte Carlo se requieren los siguientes parámetros proporcionados por el método de volúmenes finitos:

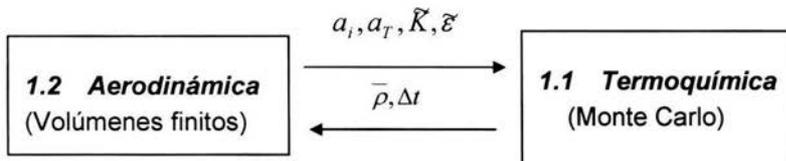
- Los coeficientes  $a_i$  y  $a_T$  de la ecuación en volúmenes finitos, que se usan para calcular el paso fraccionado de transporte en las direcciones  $x$ ,  $y$ ,  $z$ , de las ecuaciones(4.17, 4.18, 4.19)
- Los valores de  $\tilde{K}$  y  $\tilde{\varepsilon}$  que se usan en los modelos de mezcla LMSE (ecuación 4.31).

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

- El paso temporal,  $\Delta t$ , que se limita con la relación (4.29).
- La densidad promediada  $\bar{\rho}$  que se calcula del estado termoquímico de la partícula con la ecuación del gas ideal. El valor medio de la densidad se obtiene a partir del conjunto de partículas como:

$$\bar{\rho} = \left( \frac{1}{N_p} \sum_{i=1}^{N_p} \frac{1}{\rho(\phi^{(i)})} \right)^{-1} \quad (4.34)$$

Con lo anterior podemos ver que se presenta la siguiente gráfica en donde se muestra la interacción entre los métodos de volúmenes finitos y de Monte Carlo



En términos generales, la solución combinada de ambos métodos consta por tanto de los siguientes pasos:

## Métodos de solución

---

- En el inicio de un paso temporal ( $\Delta t$ ), se calcula teniendo en cuenta las restricciones del método de Monte Carlo que se expresan por la relación (4.29). Estas limitaciones se evalúan con las variables aerodinámicas del paso temporal anterior.
- Con el paso temporal ( $\Delta t$ ), calculado en la ecuación (4.1), la PDF se evoluciona en el tiempo mediante el uso de la técnica de pasos fraccionados. Al final del paso temporal, el método de Monte Carlo calcula el valor de la densidad media.
- En este valor nuevo de la densidad media, las variables aerodinámicas se recalculan en el método de volúmenes finitos.

Este proceso se repite hasta alcanzar el estado estacionario.

# Capítulo 5

## PRESENTACIÓN DE RESULTADOS

### 5.1 Introducción

En este capítulo se presentan las predicciones de la simulación de una llama de metano y aire con el modelo estocástico descrito en el capítulo anterior (4). La llama es premezclada (mezcla de metano y aire) y pobre en combustible, siendo la tasa de equivalencia de 0.586. La llama está confinada y se estabiliza mediante un cuerpo romo.

El número de Reynolds del flujo es 66000 basado en el diámetro del obstáculo estabilizador y en la velocidad de inyección del flujo; por lo tanto, el flujo es turbulento.

Para iniciar este capítulo, se presenta la configuración experimental y los detalles numéricos que se utilizan para simular esta llama. Seguidamente, veremos los contornos de algunas propiedades y especies de concentración. Además, se muestran los resultados obtenidos en la simulación (donde se utilizaron tres modelos de turbulencia diferentes), los cuales se compararon con los datos experimentales.

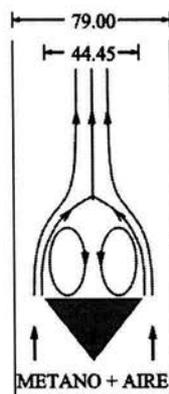


Fig. 5.1 Representación esquemática del quemador. Cotas mm



## Presentación de Resultados

Los datos experimentales disponibles que se utilizarán en esta tesis, consisten en medidas de velocidad (et al, Pan, 1991), de temperatura, de concentraciones de especies mayoritarias y minoritarias (et al, Nandula, 1996); dentro de las especies de concentración mayoritarias tenemos:  $\text{CH}_4$ ,  $\text{O}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ , y  $\text{CO}_2$ . Las concentraciones minoritarias son: OH, NO y CO; los cuales son datos fidedignos debido a que se utilizaron técnicas ópticas que permitieron saber información de cada una de las especies.

Los datos experimentales se tomaron en las estaciones axiales  $Z/D_0=0.1, 0.3, 0.6$  y  $1.0$ ; en donde la distancia axial  $Z$ , se dimensionaliza con el diámetro del cono,  $D_0$ , para poder ver las posiciones antes mencionadas, se encuentra la figura 5.3; datos importantes son reportados por Nandula (et al, 1996).

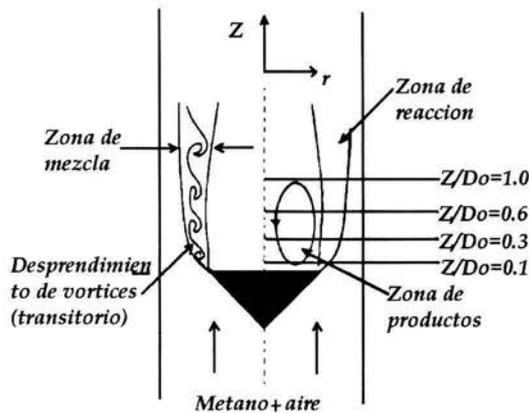


Fig. 5.3 Representación esquemática de las posiciones axiales donde se tienen medidas experimentales

Los valores de equilibrio de las especies mayoritarias y minoritarias para una mezcla de metano y aire con un ratio equivalente de 0.586 que se presenta en la tabla 1.

$\text{CH}_4$	0
$\text{H}_2\text{O}$	0.116
$\text{CO}_2$	0.058
$\text{N}_2$	0.744
$\text{O}_2$	0.081
CO	7 ppm
OH	200 ppm
NO	1492 ppm

Tabla 1: Valores de equilibrio para una mezcla de metano y aire con un ratio de equivalencia de 0.0586. Los valores de las especies están expresados en fracción molar, salvo indicación contraria.

### 5.3 Detalles Numéricos

La llama de metano y aire se simula con el modelo estocástico señalado en el capítulo anterior; la simulación de la llama se hace en dos dimensiones (coordenadas cilíndricas polares).

El dominio de cálculo se discretiza con una malla de 40 X 45 celdas en la dirección radial ( $r$ ) y axial ( $z$ ) respectivamente; en la figura 5.4 se muestra el mallado. Con fines de ahorro de memoria y tiempo de cálculo, el dominio de la simulación empieza en la base del cono estabilizador, y se extiende hasta 4.6 diámetros de cono en la dirección axial. En la dirección radial, el dominio de cálculo se extiende hasta la pared de confinamiento situada a 0.9 diámetros de cono.

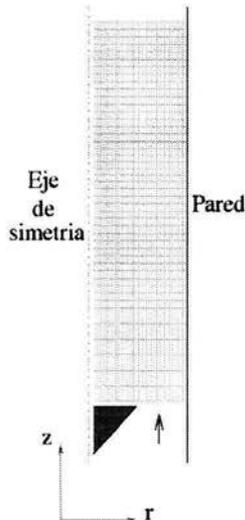


Fig. 5.4. Representación del dominio de la simulación.

Con respecto a las condiciones de velocidad, energía cinética turbulenta y tasa de disipación de la energía cinética turbulenta de la mezcla, se asignan a partir de una simulación de flujo en frío aguas arriba del cono; y como ya sabemos, la turbulencia se simula con los tres modelos mencionados con antelación, que son:  $k-\varepsilon$  estándar, el modelo de transporte de esfuerzos de Reynolds (RSTM) y el modelo de esfuerzos de Reynolds algebraico-explicito (EASM). La reacción química se modela con el mecanismo de cinco pasos de reacción de Mallampalli (et al, 1998) sistemáticamente reducido a partir del mecanismo detallado GRI 2.11 (Bowman et al, 1995).

Suponiendo que no hay pérdidas de calor, y que las especies tienen igual difusividad, la PDF del estado termoquímico de la mezcla se puede determinar unívocamente por cinco escalares (9 especies químicas menos 4 relaciones de conservación de átomos: (C, H, O y N)

## Presentación de Resultados

---

Para modelar el término de mezcla molecular de la ecuación de transporte de la PDF, se usa el modelo LMSE. El tiempo de mezcla de dicho modelo  $\tau_{mez}$  se toma como  $\frac{\tilde{k}}{4\tilde{\epsilon}}$  donde  $\tilde{k}$  es la energía cinética turbulenta y  $\tilde{\epsilon}$  es la tasa de disipación de la energía cinética turbulenta.

El tiempo de cálculo es de aproximadamente 28 horas en una estación de trabajo Sun Sparc Ultra 60.

### 5.4 Resultados

A continuación se presentan los resultados encontrados. Iniciando con los contornos de velocidad, temperatura, fracción molar de  $\text{CH}_4$  y de las especies de concentración minoritarias (CO, OH, NO). Seguidamente, se analizarán las predicciones, obtenidas de la simulación, comparadas con datos experimentales de las velocidades axiales, temperatura, especies mayoritarias y minoritarias. Por último encontraremos las frecuencias de mezcla comparadas entre las tres predicciones obtenidas de los tres modelos de turbulencia.

Cabe señalar que por semejanza en las predicciones, las comparaciones de las mismas, se presentan sólo en las estaciones axiales  $Z/\text{Do}=0.3$  y  $1.0$ , a excepción de las velocidades.

#### 5.4.1 Contornos de velocidad, temperatura, $\text{CH}_4$ , CO, OH y NO

En la figura 5.5 se muestran los vectores de velocidad media en la llama. En esta figura se aprecia cómo, detrás del cono, se forma una zona de recirculación, que tiene como propósito estabilizar la llama.

En la figura 5.6 se presentan los contornos de temperatura, fracción molar de  $\text{CH}_4$  y de las especies de concentración minoritaria (CO, OH, NO). En la zona de recirculación, las predicciones de  $\text{CH}_4$  se presentan de manera uniforme y tienden a un valor nulo. Así, esta región de recirculación es una zona de productos con una temperatura de aproximadamente 1644 K, cercana al valor de la temperatura adiabática. La alta temperatura de los gases de esta zona de recirculación va a producir la ignición de la mezcla de reactantes que entran al sistema.

## Presentación de Resultados

---

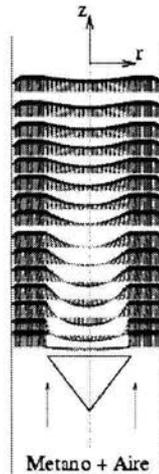


Fig. 5.5 Representación del campo de velocidades

En la frontera entre los productos calientes y los reactantes frescos se produce principalmente la reacción. En esta zona de reacción, las concentraciones de CO y OH (Fig. 5.6) son considerablemente más altas que en la zona de recirculación. Los valores medios máximos de las predicciones de CO y OH son aproximadamente 600 partes por millón (ppm) y 1200 ppm respectivamente. En la zona de recirculación, el CO tiene concentraciones próximas al valor de equilibrio (7 ppm) y el NO tiene un valor medio uniforme de aproximadamente de 5 ppm.

## Presentación de Resultados

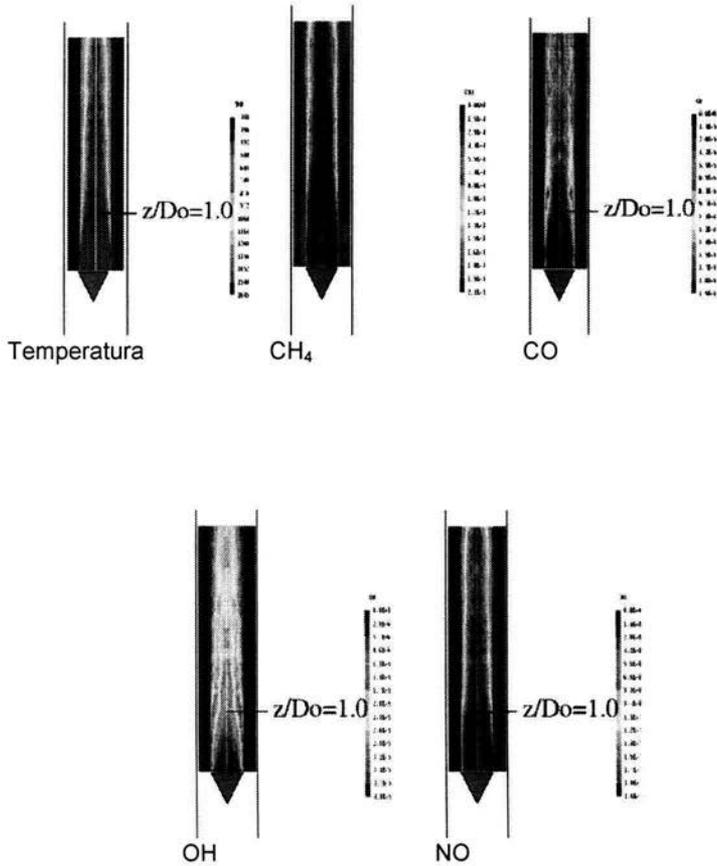


Fig. 5.6 Contornos de fracción molar media de Temperatura CH<sub>4</sub>, NO y OH, CO.

## Presentación de Resultados

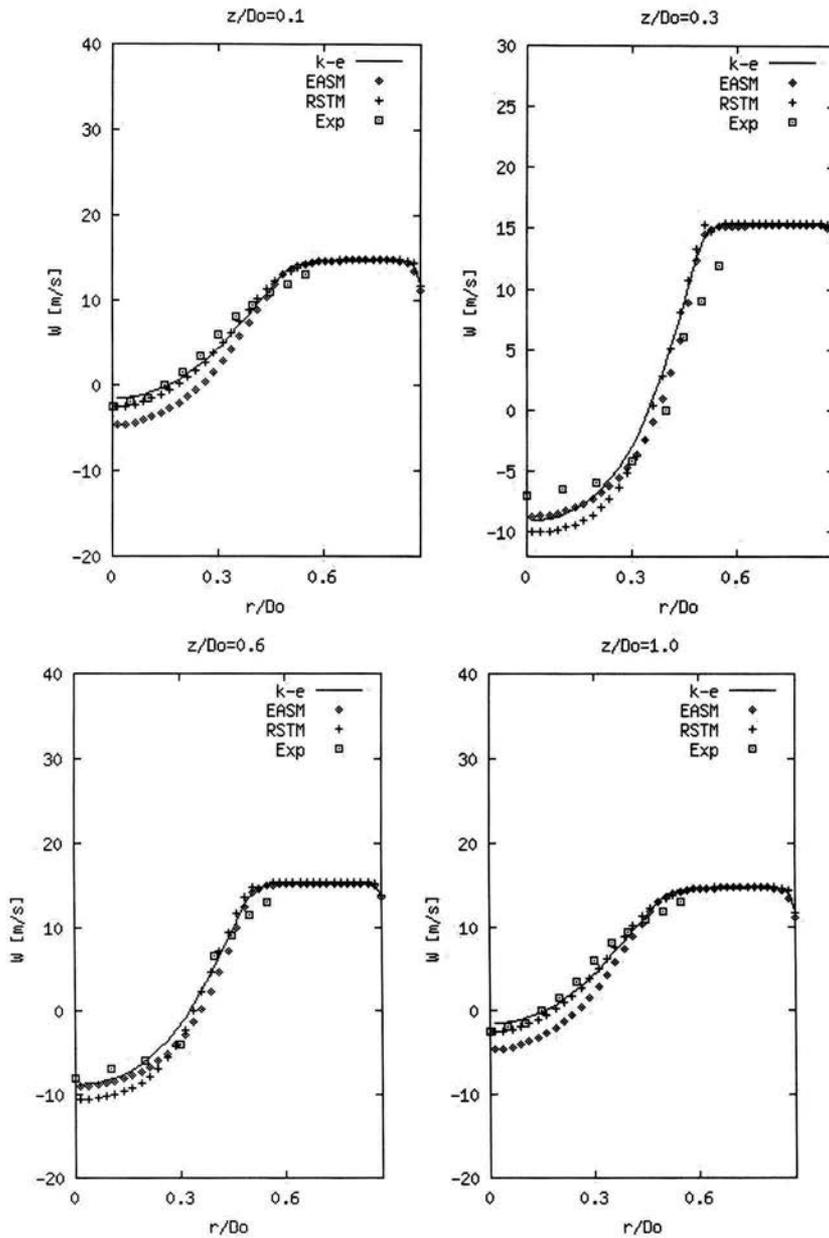
---

### 5.4.2 Velocidades Axiales y Temperatura. Comparación con datos experimentales.

En las gráficas 5.1 se muestran los perfiles de velocidad axial en las cuatro estaciones axiales. Los resultados son generalmente satisfactorios y no son enteramente concluyentes sobre que modelo de turbulencia predice mejores resultados. Sin embargo, el modelo de turbulencia EASM presenta mejores resultados en la zona de recirculación y en la capa de cortadura. Al final de la zona de recirculación todos los modelos subestiman la velocidad en la zona próxima al eje central de la llama. Estas diferencias se pueden deber a que en las proximidades de esta zona, el flujo presenta características de anisotropía, que los modelos no pueden reproducir en forma adecuada.

Los perfiles de temperatura en las estaciones  $Z/Do=0.3$  y  $1.0$  se muestran en la gráfica 5.2 (parte superior). Los tres modelos presentan una sobreestimación en la zona cercana al eje de simetría, en donde las predicciones son aproximadamente 100 K más grandes que los datos experimentales; en la zona de recirculación, las predicciones de los tres modelos tienen un valor próximo al de la temperatura adiabática 1644 K. Esta sobreestimación puede ser debida a que el modelo ignora las pérdidas de energía por radiación.

## Presentación de Resultados

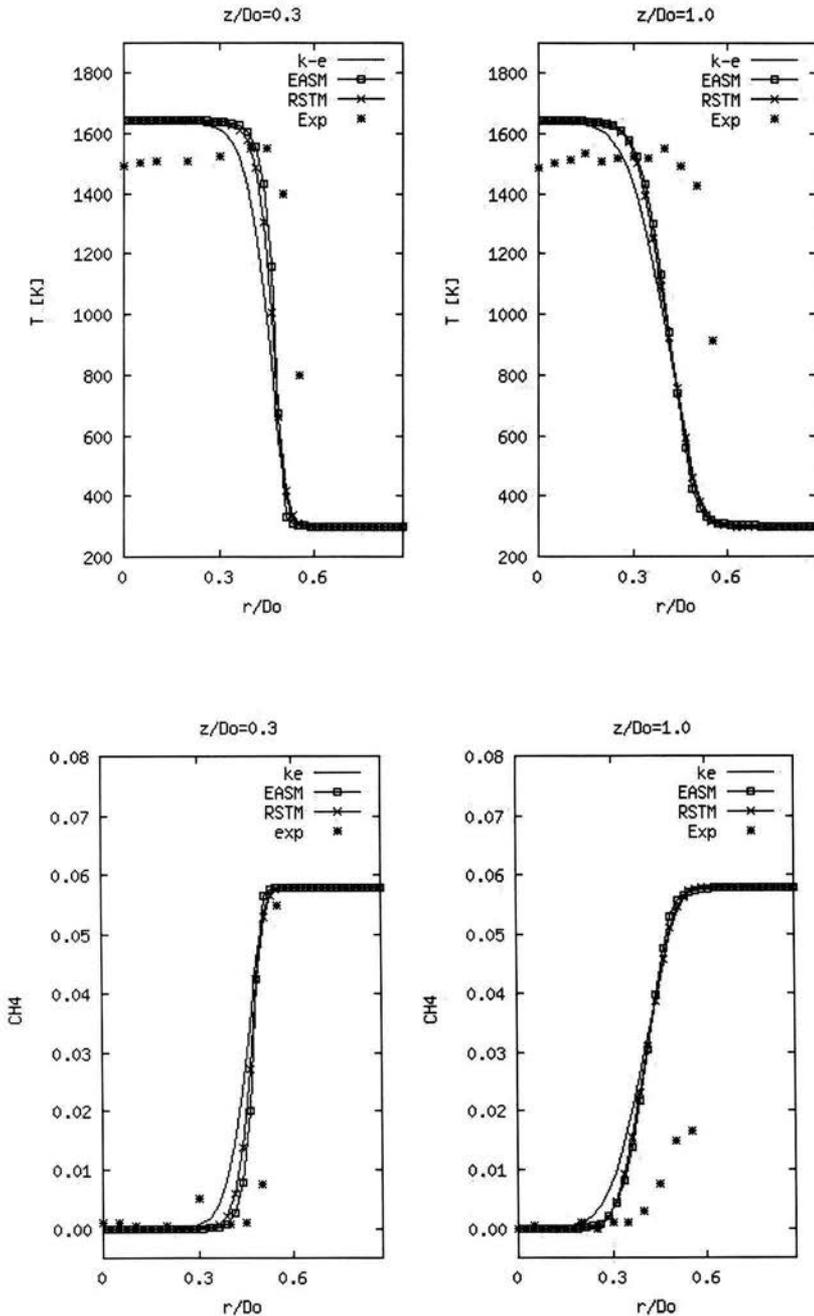


Graf. 5.1 Perfiles radiales de la velocidad axial en  $Z/Do=0.1$ ,  $Z/Do=0.3$ ,  $Z/Do=0.6$  y  $Z/Do=1.0$

### 5.4.3 Concentraciones Mayoritarias. Comparación con datos experimentales.

La gráfica 5.2 (parte inferior) presenta la evolución radial de la concentración de la especie mayoritaria  $\text{CH}_4$  y de la temperatura (parte superior) en la estación axial  $z/D_0 = 0.3$  y  $1.0$ . Las especies mayoritarias son bien predichas, tanto en la capa de cortadura como en la región de recirculación. La temperatura es sobreestimada en la zona de recirculación. Dado que los niveles de  $\text{CH}_4$  son bien predichos y cercanos al valor de equilibrio, la omisión de los efectos de radiación en la transferencia de calor es la principal causa de esta sobre predicción. Las especies de concentración mayoritaria y la temperatura son afectadas por el modelo de turbulencia en la capa de cortadura. En esta zona, la alta temperatura de los gases productos de combustión, producen la reacción de la mezcla aire y metano. Los modelos de turbulencia RSTM y EASM predicen un gradiente mayor en los escalares. Estas diferencias en las predicciones se deben principalmente al valor diferente del tiempo o frecuencia de mezcla local (ec. 4.31), que es calculado por cada uno de los modelos de turbulencia (gráfica 5.6). En la capa de cortadura, los gradientes de  $\text{H}_2\text{O}$  y  $\text{O}_2$  se predicen adecuadamente (gráfica 5.3 inferior y 5.4 superior).

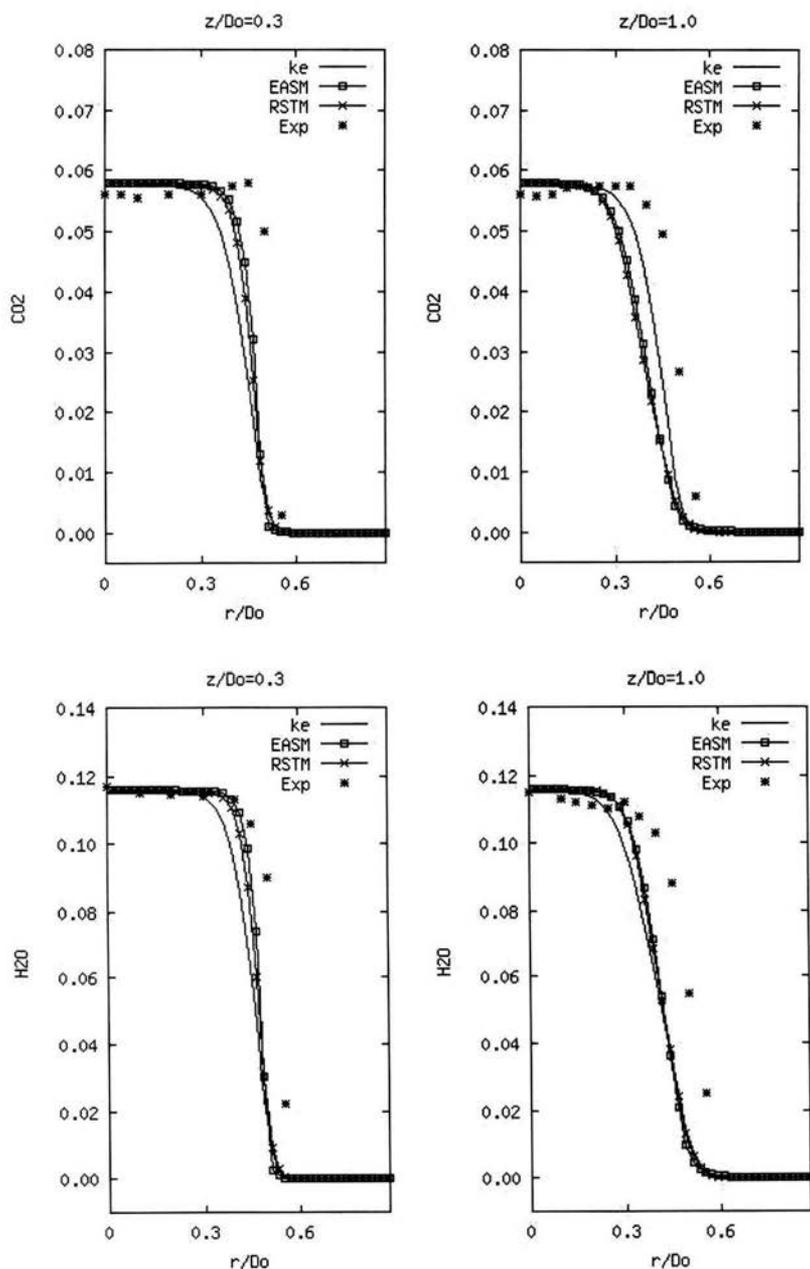
## Presentación de Resultados



Graf. 5.2 Perfiles radiales de temperatura y fracción molar de CH<sub>4</sub> en Z/Do=0.3 y

1.0

## Presentación de Resultados



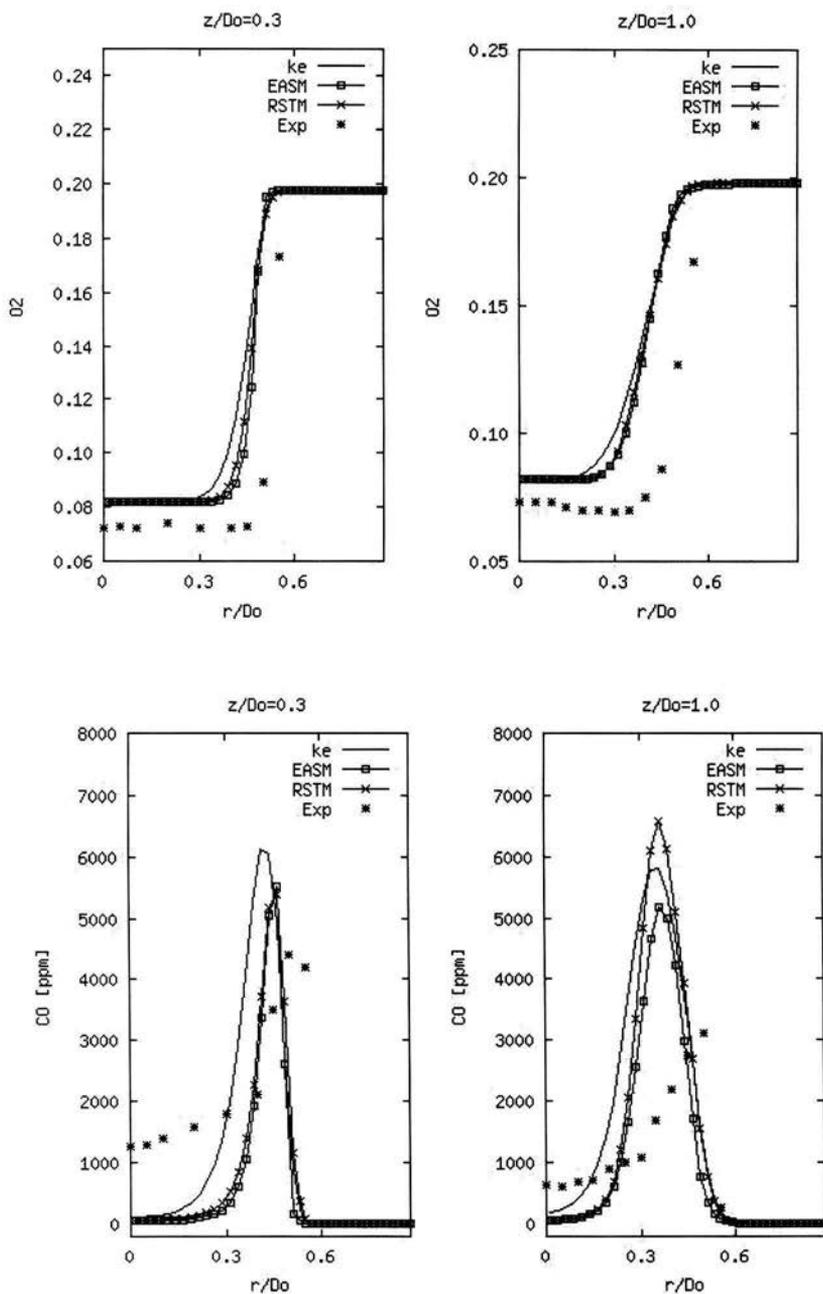
Graf 5.3 perfiles radiales de fracción molar de CO<sub>2</sub> y H<sub>2</sub>O en  $Z/Do=0.3$  y  $1.0$

### 5.4.4 Concentraciones Minoritarias. Comparación con datos experimentales.

Los perfiles radiales de la fracción molar media de CO, OH y NO en la estación axial  $z/Do=0.3$  y  $1.0$ , se presentan en la grafica 5.4 (inferior) y 5.5. Las predicciones de CO en la zona de recirculación tienen valores cercanos a los del equilibrio (7 ppm), lo cual no es consistente con los datos experimentales. Sin embargo, los perfiles y niveles máximos en la capa de cortadura son bien predichos. En la región de recirculación, las predicciones de OH son sobreestimadas y mayores a 200 ppm (valor de equilibrio). La tendencia hacia valores de superequilibrio se predice correctamente en la capa de cortadura; sin embargo los valores máximos se sobreestiman. Dada la dificultad que entraña la predicción de OH, en parte debido a sus pequeñas escalas temporales, las predicciones se consideran aceptables. La forma de los perfiles de NO se predice correctamente. Aun con las diferencias con los datos experimentales las predicciones de NO se pueden considerar como aceptables dados los bajos niveles que se presentan en el flujo (del orden de unas 5 ppm), y la sencillez del modelo químico que representa todas las rutas de formación de NO. Además, las medidas experimentales pueden estar afectadas, según reportan los autores (Nandula et al. 1996), por un error de 2 ó 3 ppm en exceso.

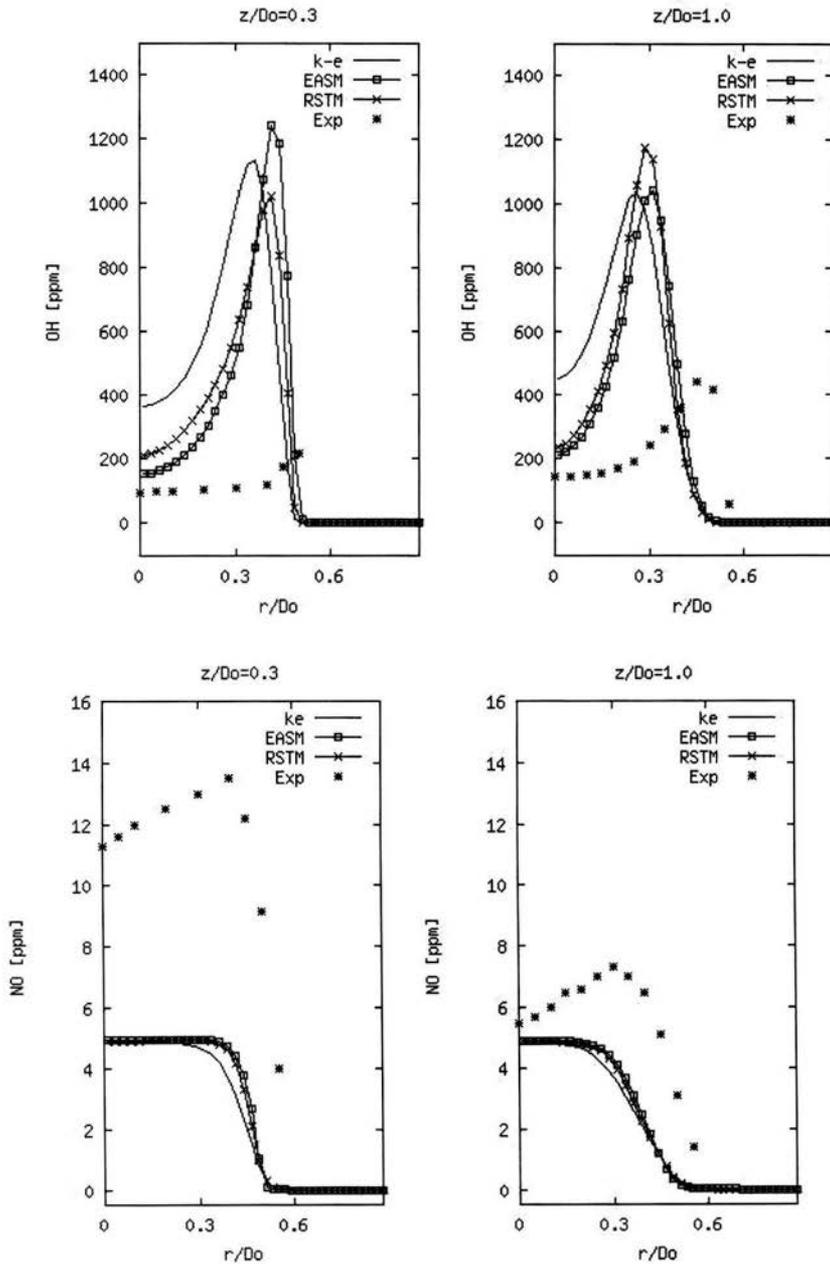
El efecto del modelo de turbulencia en las predicciones de CO, OH y NO es también representado en las graficas 5.4 y 5.5. Dichas diferencias se pueden localizar, principalmente, en la capa de cortadura. El efecto del modelo de turbulencia es más apreciable en estas especies y es causado por las mismas razones que las observadas para las especies mayoritarias. Las concentraciones de NO, no son afectadas por el modelo de turbulencia.

## Presentación de Resultados



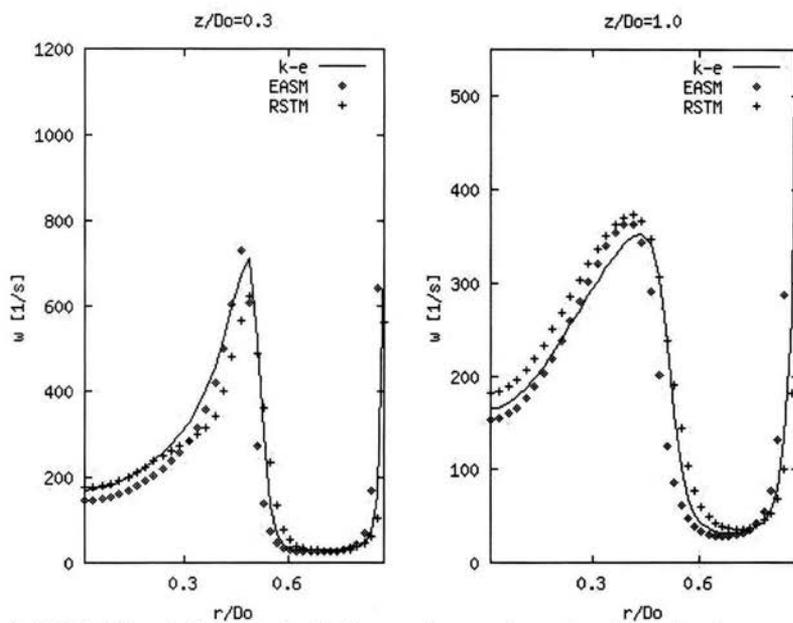
Graf. 5.4 Perfiles radiales de fracción molar de O<sub>2</sub> y CO para  $Z/Do = 0.3$  y  $1.0$

## Presentación de Resultados



Graf. 5.5 Perfiles radiales de fracción molar de OH y NO para  $Z/Do=0.3$  y  $1.0$

## Presentación de Resultados



Graf. 5.6 Perfiles de frecuencia de tiempo de mezcla molecular en los tres modelos de turbulencia utilizados.

## Capítulo 6

### CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

En este trabajo se ha simulado numéricamente la combustión en una llama de premezcla pobre de metano para la cual existen medidas experimentales detalladas. La llama se ha simulado mediante técnicas combinadas de volúmenes finitos y Monte Carlo. El método de volúmenes finitos resuelve las ecuaciones promediadas que describen la aerodinámica del flujo: continuidad, cantidad de movimiento y estadísticas de turbulencia. El método de Monte Carlo resuelve una ecuación de transporte de una función de densidad de probabilidad conjunta de los escalares (típicamente concentraciones) que controlan el sistema termoquímico. La reacción química se ha modelado mediante un mecanismo reducido de 5 pasos de reacción.

La llama de metano y aire es premezclada y turbulenta. El flujo se confina con paredes laterales y se estabiliza mediante un cuerpo romo. El número de Reynolds basado en el diámetro del obstáculo y en la velocidad del chorro de reactantes frescos es 66000. La mezcla metano y aire tiene una tasa de equivalencia de 0.586, por lo que es una mezcla pobre. Este ratio de equivalencia está cerca del límite de flamabilidad pobre de una llama metano y aire, que es de 0.51. En el diagrama de Borghi, esta llama se localiza en la zona de la reacción distribuida.

La aerodinámica del flujo se reproduce aceptablemente con los modelos de turbulencia utilizados. Detrás del cono, se forma una zona de recirculación, que tiene como propósito estabilizar la llama. Esta zona de recirculación contiene productos de la combustión a alta temperatura, que produce la ignición de los reactantes que entran al sistema, debido a la intensa mezcla con los productos calientes. Esta mezcla está favorecida por los vórtices desprendidos aguas abajo del obstáculo estabilizador y produce principalmente la mezcla de la reacción. En esta zona de reacción, la temperatura y especies químicas presentan altos gradientes, y en el caso de especies intermedias (por ejemplo, CO y OH) las concentraciones son considerablemente más altas que sus correspondientes de la zona de productos.

Comparaciones con datos experimentales muestran que las predicciones de velocidad y especies de concentración mayoritaria son aceptables tanto en la zona de recirculación como en la zona de reacción, donde se capturan bien los altos gradientes presentes. La temperatura de la zona de recirculación, si se ignoran las pérdidas de calor por radiación, se sobreestiman, pero las concentraciones de OH se predicen bien en la zona de recirculación; sin embargo, los niveles máximos de las capas de cortadura se subestiman. Las predicciones de NO se encuentran por debajo de los valores experimentales, y el resultado se puede considerar aceptable, debido tanto al extraordinariamente bajo valor de la concentración (del orden de unas cuantas ppm) como al posible error en las medidas (de unas 2 o 3 ppm en exceso) que reportan los autores del trabajo experimental (et al, Nandula, 1996).

## Conclusiones y Recomendaciones

---

Para estudiar su efecto en las predicciones, se cambia el modelo de turbulencia. Los modelos de turbulencia que se usan son:  $k-\varepsilon$  estándar (et al Launder y Spalding, 1972), el modelo de transporte de esfuerzos de Reynolds (RSTM) y el modelo de esfuerzos de Reynolds algebraico-explicito (EASM).

El modelo EASM es posiblemente el que proporciona mejores resultados ligeramente superiores. El modelo utilizado presenta una influencia poco significativa en la temperatura y especies de concentración mayoritaria. En las especies de concentración minoritaria el efecto del modelo de turbulencia es apreciable, posiblemente debido a que el tiempo de mezcla, que interviene en el modelo de reacción química, afecta más significativamente a estas especies de corta vida, varía ligeramente entre unos modelos y otros. El NO no es afectado por el modelo de turbulencia.

### Recomendaciones para trabajos futuros

En esta sección se sugieren algunos trabajos que podrían extender o mejorar los resultados de la presente tesis.

En primer lugar la no estacionariedad asociada a todo flujo turbulento puede tener una importante influencia en la termoquímica, particularmente en llamas que se encuentran próximas a la extinción, como la analizada en esta tesis. Dichos fenómenos no estacionarios pueden dar lugar a la extinción local de la llama, que sería imposible reproducir por tanto con modelos aerodinámicos estacionarios que ecuaciones promediadas en el tiempo. Se sugiere por tanto, como primera tarea futura, representar la llama mediante modelos de tipo Simulación de las Grandes Escalas (LES), que, mediante un filtrado de las ecuaciones, separan las grandes y pequeñas escalas, y resuelven de forma no estacionaria las escalas del movimiento por encima de la malla. El coste computacional de dichos modelos es considerable, y si se añade al costo de por sí alto del método de Monte Carlo para simular la PDF, pero la creciente potencia y el decremento en el precio de las computadoras empiezan a hacerlos viables.

El modelo cinético utilizado es de un cierto grado de complejidad, en términos de pasos y especies, de acuerdo al tiempo de cálculo disponible. Sin embargo es aconsejable utilizar modelos más complejos, y analizar su impacto en la predicción de especies minoritarias, particularmente CO. En la medida que en la simulación aparezcan, merced a las mejoras de los modelos indicados en la tesis, fenómenos de extinción y reignición local de la llama, el uso de modelos químicos más complejos puede ser necesario para capturar tales fenómenos.

# Capítulo 7

## BIBLIOGRAFÍA

- Aris R. Vectors, tensors and the Basic Equations of Fluid Mechanics. Prentice Hall international Series in the Physical and Chemical Engineering Sciences. 1962
- Beer, Janos, Combustion Aerodynamics, 1923
- Birkhoff Garret, Jets Wakes, and Cavities, 1911
- C. Smoot Robert, Prince Jack, Química, un curso moderno, Ed. Continental S.A., México 1979
- C.T. Bowman, R.K. Hanson, D.F. Davidson, J.W.C. Gardier, V. Lasianski, G.P. Smith, D.M.G. Olden, M. Frenklach, H. Wang, and M.V. Lisianski. GRI-Mech 2.11 <http://www.gri.org>, 1995
- Chang, Raymond, Química, 4ª Edición McGraw-Hill, México, 1992
- Charles E. Baukal, jr, Computational fluid dynamics in Industrial combustion
- Chen J.Y. A general Procedure for Constructing Reduced Mechanism with Given Independent Reactions. Combustion Science and Technology, 57:89-94, 1988
- Chrin, Alexandre Joel, Computational Fluid mechanics: selected papers.
- Correa and I.Z. HU. Calculations of Turbulent Flames Using a PSR Microstructural Library. In The combustion Institute. Editor 26<sup>th</sup> Symposium (international) on combustion. Pittsburgh, 1996.
- Dopazo C. Probability Density Function Approach for a Turbulent Axisymmetric Heat Jet Centerline Evolution. Physics of Fluid 18(4):397-404, 1975
- Garritz A., Chamizo J. A. Química, Ed. Addison Wesley, Mexico, 1995
- Garzón Guillermo, Fundamentos de Química Gral, 2ª Edición, McGraw-Hill, Mexico 1986.
- Grassman, Irvin, Combustion, 1987
- [http://gotm.net/html/4-HTML/TURBU\\_VINCI.html](http://gotm.net/html/4-HTML/TURBU_VINCI.html)
- <http://www.ucmp.berkeley.edu/history/vinci.html>
- John David Anderson, Computational Fluid Dynamics. The basic with applications
- Jones W.P. Models for Turbulent Flows with Variable Density and Combustion. In W. Kollmann, editor. Prediction Methods for Turbulent Flows. Lecture series 1979-2. Von Karman Institute for Fluids Dynamics. Rhode Saint Genese Belgium, January 1979.
- Kakhi M. The transported Probability Density Function Approach for Predicting Turbulent Combustion Flows. Phd thesis, Imperial College of Science Technology and Medicine, 1994.
- Canary A. Murty, Introduction to combustion phenomena for fire, incineration, pollution and energy applications.
- Kollman, Wolfgang, Computational Fluid dynamics, 1942
- Launder B.E. and D.B. Spalding. Lectures in mathematical models of Turbulence. Academic Press. 1972
- Launder, B., Lectures in mathematical models of turbulence.
- Lewis, Bernard, Combustion, Flames and Explosions of gases. 1899
- Lin Chia-Chio, Statistical Theories of turbulence, 1916

## Bibliografía

---

- Lumley J.L. Pressure-Strain Correction. Physics of Fluids, 18(6):750,1975
- Mallampalli, H.P., Fletcher. T.H. and Chen, J.Y: (1998) Updated CH<sub>4</sub>/NO<sub>x</sub> Global Mechanism Used for Modelling Lean Premixed Turbulent Combustion of Natural Gas. [http://www2.et.byu.edu/~tom/gas\\_turbines/updated\\_5step.html](http://www2.et.byu.edu/~tom/gas_turbines/updated_5step.html).
- Moore Jihn, C. Kotzjohn, El mundo de la Química Conceptos y aplicaciones, 2ª Edición, Prentice Hall, Mexico 2000
- Nandula, S.P., Pitz, R.W., 3in a Turbulent Lean Premixed Combustor. In 34<sup>th</sup> Aerospace Sciences Meeting Exhibit, Reno, NV, January, 15-18
- Pan J.C.M.D.Vangsness,S.P.HEneghan,W.J.Schmoll, and D.R.Ballal. Laser diagnostic Studies of Confined Turbulent Premixed Flames Stability by Conial Bluff Bodies: Data set. Technical report UDr-TR-91-102, University of Daytin, July 1991.
- Pope S.B. PDF Methods for Turbulent Reactive Flows. Progress Energy Combustion Science, 1985
- Pope S.B. A Monte Carlo Method for the PDF Equations of Turbulent Reactive Flow. Combustion Science and Tecnology. 25:159-174,1981
- Pope S.B. combustion and Flames, 1976
- Pope S.B. Transport Equation for Joint probability Density funtionof Velocity and scalar in Turbulence Flow. Physics of Fluids, 24(4):588-596,1976
- Rodi W. Turbulence Models and their Applications in Hydraulics. International Association for Hydraulics Research, ISBN 902127002-1.Delf, Holland, 1984
- Russel B. John, Larena Alicia, Química GraI, Ed. McGraw-Hill, México,1988
- Spalding D.B. Develop of the eddy-BreakUp Model of Turbulent Combustion. In the Combustion Institute. Editor, 16<sup>th</sup> Symposium (international) on combustion, p. 1657, Pittsburgh, 1976
- Spalding D.B. Mixing and Chemical Reaction in Steady, Confined Turbulent Flames. In Institute of Combustion. Edotor. 23th Symposium (international) on combustion p.649-657. Pittsburgh,1971
- Speziale, C.G., Turbulence Modeling for Time Dependent RANS and VLES: A Review. AIAA Journal, 36:2 (1998).
- Toong Tau-yi,Combustion Dynamics:The tdynamics of chemically reacting Fluids, Ed. McGraw-Hill, 1983
- Vicente, W. (2000). Numerical simulation of Combustion and Polluting in Lean Premixed Turbulent Flame. PhD thesis, Univesity of Zaragoza, Spain.
- W.P.Jones and B.E.Lauder. The prediction of laminarisation with a two equation model of turbulence. International Journal of Heat and Mass Transfer,15:301-314,1972
- Wark Kenneth, Térmodinámica, McGraw-Hill, Mexico, 1991
- Warnatz J, Combustion Phisical and Chemical fundamentals, modeling and simulation, experiments
- White M. Frank, Mecánica de Fluidos, 6ª Edición, McGraw-Hill
- Williams, Forman Arthur, Combustión Theory: The fundamental theory of chemical reacting Flow systems. 1934

ESTA TESIS NO SALE  
DE LA BIBLIOTECA

# Apéndice

## ESQUEMAS DE DISCRETIZACIÓN

Aquí podremos encontrar los esquemas lineales que se usan en la discretización del término convectivo de la ecuación general (4.1).

En la formulación de la ecuación discretizada (4.2) se requiere conocer la densidad  $\rho$  y la variable escalar  $\phi$  en la cara de la celda. Estas variables se calculan en el nodo de la celda, por lo que es necesario interpolar entre celdas para conocer su valor en la cara

Este cálculo de  $\phi$  y de  $\rho$  en la cara de la celda, da lugar a los llamados esquemas de discretización. La determinación de los valores de estas variables en la cara es importante para la precisión y convergencia de la solución numérica.

A continuación, se presentan los esquemas de discretización lineales que se usan en esta tesis. Estos esquemas se describirán en base al sistema de celdas que se ilustra en la figura A1.

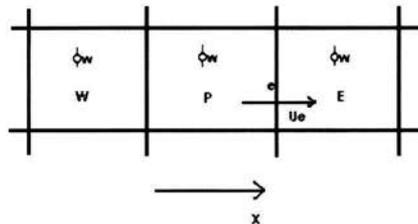


Fig. A1 Diagrama esquemático de celdas.

Como ejemplo, se obtendrá el valor de  $\phi$  en la cara e de la celda P. La velocidad de la cara e se considera positiva.

Por un lado tenemos a las diferencias desplazadas de primer orden; el cual permite tener un esquema con el cual se supone que el valor de la variable  $\phi$  en la cara e es igual al del nodo adyacente aguas arriba, es decir para  $u_e > 0$ :

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

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

Para las diferencias centradas, presenta un esquema en donde se supone una variación lineal de  $\phi$  entre los nodos P y E; por tanto el valor en la cara e es:

## Apéndice

---

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

Este esquema tiene una precisión de segundo orden pero, tiene el inconveniente de no estar acotado por lo que puede presentar inestabilidades numéricas. El límite de estabilidad de este esquema viene dado en función del número de Peclet, que es un parámetro comparativo entre los procesos convectivos y difusivos. Para situaciones en que los procesos convectivos dominan sobre los difusivos ( $Pe > 2$ ), por ejemplo flujos con número de Reynolds altos, el esquema presenta oscilaciones numéricas.

Existe un esquema híbrido, en donde consiste en combinar los esquemas de diferencias desplazadas y centradas para calcular el valor de la propiedad  $\phi$  en la cara del volumen de control. La selección del esquema se hace en función del número de Peclet de la celda.

- Si  $Pe \leq 2$ , se usan diferencias centradas
- Si  $Pe > 2$  Se usan diferencias desplazadas.