



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
PROGRAMA DE MAESTRÍA Y DOCTORADO EN INGENIERÍA
MECÁNICA – TERMOFLUIDOS

“ANÁLISIS NUMÉRICO Y EXPERIMENTAL DEL FLUJO REACTIVO EN EL
QUEMADOR DE UNA ESTUFA DOMÉSTICA”

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

PRESENTA:
PAVEL PEÑA BERNAL

TUTORES DE TESIS:
DR. WILLIAM VICENTE Y RODRÍGUEZ, INSTITUTO DE INGENIERÍA
DR. RAFAEL CHÁVEZ MARTÍNEZ, FACULTAD DE INGENIERÍA

CIUDAD DE MÉXICO, AGOSTO 2016

JURADO ASIGNADO:

Presidente: Dr. Salinas Vázquez Martin
Secretario: Dr. Fernández Zayas José Luis
1er. Vocal: Dr. Vicente y Rodríguez William
2do. Vocal: Dr. González Oropeza Rogelio
3er. Vocal: Dr. Chávez Martínez Rafael

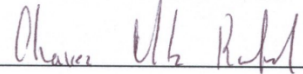
Lugar donde se realizó la tesis: Instituto de Ingeniería-UNAM

TUTORES DE TESIS:

DR. WILLIAM VICENTE Y RODRÍGUEZ



DR. RAFAEL CHÁVEZ MARTÍNEZ



CONTENIDO

INDICE DE FIGURAS	iii
INDICE DE TABLAS.....	v
RESUMEN	vi
1. INTRODUCCIÓN.....	1
1.1 Antecedentes	1
1.2 Métodos de análisis.....	2
1.3 Objetivos	6
2. ECUACIONES DE TRANSPORTE	7
2.1 Clasificación de los sistemas de reacción	7
2.1.1 Tipo de llama	7
2.1.2 Tipo de flujo	9
2.2 Descripción del problema.....	11
2.3 Continuidad	11
2.4 Conservación de cantidad de movimiento.....	11
2.5 Conservación de la energía total.....	12
2.6 Conservación de especies	13
2.7 Ecuación de estado y flujo difusivo	14
2.8 Promediado de las ecuaciones	16
2.9 Modelo de Turbulencia $\kappa - \epsilon$	20
2.10 Modelo Eddy Break Up (EBU).....	22
2.11 Modelo de combustión	23
2.11.1 Mecanismo global de un paso	23
2.11.2 Mecanismo global de dos paso	24
2.12 Modelo de radiación	24
2.13 Modelo de flotación	25
3. MÉTODO DE SOLUCIÓN	26
3.1 Método de volúmenes finitos.....	26
4. CONFIGURACIÓN Y CONSIDERACIONES REALIZADAS PARA LA SIMULACIÓN	33
4.1 Configuración geométrica del sistema a simular	33
4.2 Parámetros iniciales y de frontera del caso base	35
4.2.1 Parámetros iniciales del proceso iterativo.	35
4.2.2 Condiciones de frontera.....	36

4.3	Caso Base.....	39
4.4	Configuraciones estudiadas	40
4.4.1	Variaciones geométricas	40
4.4.2	Características del fluido/flujo	40
4.4.3	Parámetros y modelos del proceso de combustión	40
4.5	Estudio de independencia de malla y de dominio	42
5.	RESULTADOS	45
5.1	Caso base	45
5.2	Estudio de la fuerza de flotación	52
5.3	Variaciones en la geometría.....	54
5.3.1	Tamaño de portas.....	54
5.3.2	Separación entre portas	56
5.4	Características del fluido/flujo	58
5.4.1	Velocidad.....	58
5.4.2	Combustible.....	60
5.4.3	Exceso de aire	62
5.5	Parámetros del modelo	64
5.5.1	Radiación.....	64
5.5.2	Modelos químicos.....	66
5.5.3	Número de pasos	68
5.5.4	Constantes EBU	70
5.6	Transferencia de calor.....	73
6.	VALIDACIÓN EXPERIMENTAL.....	77
6.1	Instrumentos de medición utilizados	77
6.1.1	Termo-Anemómetro de hilo caliente.....	77
6.1.2	Termopares	77
6.2	Mediciones y resultados.....	79
7.	CONCLUSIONES	83
	BIBLIOGRAFIA	86

INDICE DE FIGURAS

Figura 1.1 Esquema de un quemador de estufa doméstica.	2
Figura 2.1 Configuración del tipo de llama.	8
Figura 2.2 Diagrama de Borghi.	10
Figura 3.1 Representación del sistema discretizado en volúmenes finitos.	27
Figura 3.2 Diagrama esquemático de un volumen de control bidimensional.	28
Figura 4.1 Vista lateral del quemador (Medidas en mm).	34
Figura 4.2 Vista frontal del quemador (Medidas en mm).	34
Figura 4.3 Vista del quemador en 3D.	35
Figura 4.4 Portas del quemador (Medidas en mm).	35
Figura 4.5 Dominio extendido, con fronteras.	37
Figura 4.6 Independencia de malla.	43
Figura 4.7 Independencia de dominio.	44
Figura 5.1 Contornos de perfiles de velocidad para el caso base.	45
Figura 5.2 Campos vectoriales de velocidad y líneas de corriente para el caso base.	46
Figura 5.3 Contornos de contornos de perfiles de velocidad entre portas para el caso base.	47
Figura 5.4 Contornos de temperatura para el caso base.	48
Figura 5.5 Contornos de fracción másica de oxidante para el caso base.	49
Figura 5.6 Contornos de fracción másica de combustible para el caso base.	50
Figura 5.7 Contornos de fracción másica de productos para el caso base.	51
Figura 5.8 Evolución del cociente Gr/Re^2 en el centro del quemador.	52
Figura 5.9 Evolución del cociente Gr/Re^2 en la orilla del quemador.	53
Figura 5.10 Perfil radial de temperatura para distintos tamaños de portas.	54
Figura 5.11 Perfil radial de velocidad para distintos tamaños de portas.	55
Figura 5.12 Perfil radial de temperatura para distintas separaciones entre portas.	56
Figura 5.13 Perfil radial de velocidad para distintas separaciones entre portas.	57

Figura 5.14 Perfil radial de temperatura para distintas velocidades de entrada de la mezcla.....	58
Figura 5.15 Perfil radial de velocidad para distintas velocidades de entrada de la mezcla.....	59
Figura 5.16 Perfil radial de temperatura con diferentes combustibles.....	60
Figura 5.17 Perfil radial de velocidad con diferentes combustibles.....	61
Figura 5.18 Perfil radial de temperatura para diferentes excesos de aire.	62
Figura 5.19 Perfil radial de velocidad para distintos excesos de aire.	63
Figura 5.20 Perfil radial de temperatura con modelo de radiación.	64
Figura 5.21 Perfil radial de velocidad con modelo de radiación.	65
Figura 5.22 Perfiles radiales de temperatura con 2 modelos de combustión: modelo EBU y tipo Arrhenius.	66
Figura 5.23 Perfiles radiales de velocidad con 2 modelos de combustión: modelo EBU y tipo Arrhenius.	67
Figura 5.24 Perfil radial de temperatura para distintos pasos de reacción.....	68
Figura 5.25 Perfil radial de velocidad para distintos pasos de reacción.....	69
Figura 5.26 Perfil radial de temperatura para distintas constantes EBU.	70
Figura 5.27 Perfil radial de velocidad para distintas constantes EBU.	71
Figura 5.28 Perfil radial de temperatura para el uso del parámetro de los productos EBU.....	72
Figura 5.29 Perfil radial de velocidad para el uso del parámetro de los productos EBU.....	73
Figura 6.1 Termo-anemómetro de hilo caliente.....	78
Figura 6.2 Termopar-Adquisidor de datos.....	78
Figura 6.3 Medición de velocidad.....	79
Figura 6.4 Medición de temperatura.....	81
Figura 6.5 Perfil axial de temperatura para la validación experimental.	82

INDICE DE TABLAS

Tabla 4.1 Propiedades del caso base.	39
Tabla 4.2 Parámetros de variación para el caso base.	41
Tabla 4.3 Estudio de independencia de malla.	42
Tabla 4.4 Estudio de independencia de dominio.	43
Tabla 5.1 Calor transferido para las distintas configuraciones.	75
Tabla 5.2 Diferencia porcentual de la transferencia de calor de las configuraciones estudiadas respecto al caso base.	76
Tabla 6.1 Resultados de mínima y máxima velocidad	80
Tabla 6.2 Resultados de temperaturas.	81

RESUMEN

El presente trabajo está enfocado al estudio numérico y experimental del flujo reactivo de la combustión en el quemador de una estufa doméstica a presión atmosférica; éste presenta una premezcla de alimentación de propano con aire como comburente; las especies del flujo reactivo son: C_3H_8 , O_2 , N_2 , CO_2 y H_2O . La velocidad de alimentación es de 2 m/s y la mezcla tiene un 70% de exceso de aire. También, se realizaron diferentes simulaciones para conocer el efecto que causan variaciones en la geometría, características del flujo y parámetros del modelo utilizado para la combustión. Con éste estudio se permitió conocer lo siguiente:

- Variaciones debido a cambios en la geometría del quemador, como el tamaño de las portas y la separación entre ellas.
- Los cambios debido a modificaciones en la velocidad de alimentación, exceso de aire en la mezcla y cambiando el combustible a reaccionar.
- El efecto debido a modificaciones de los parámetros del modelo, como utilizando un modelo de radiación, cambiando el modelo de combustión, aumentando la combustión a dos pasos de reacción y variando las constantes del modelo Eddy break Up.

En el primer capítulo se hace una introducción sobre los antecedentes del uso y repercusiones del gas Licuado de Petróleo (gas LP) como combustible para los quemadores de las estufas domésticas.

Enseguida, se detallan las ecuaciones constitutivas que describen el comportamiento físico del flujo reactivo que son: la ecuación de continuidad, la conservación de cantidad de movimiento, la conservación de energía y la conservación de las especies químicas. En esta parte es detallado el método RANS y modelo Eddy Break Up usado para el cálculo de la tasa media de reacción química. Debido a la complejidad de las ecuaciones resultantes se utiliza un método numérico de volúmenes finitos con la ayuda del software PHOENICS, por lo que se hace también una descripción de este método. Continúan las configuraciones y

consideraciones para simulación; se hace una descripción detallada del caso base y sus parámetros de estudio.

Finalmente, son mostrados los resultados del caso base y el efecto de sus alteraciones, su validación experimental y conclusiones obtenidas a partir de este estudio.

1. INTRODUCCIÓN

1.1 Antecedentes

Desde el inicio de la Revolución Industrial hasta hoy en México y en el mundo, ha venido aumentando el uso intensivo de combustibles de origen fósil (gas Licuado de Petróleo (gas LP), carbón mineral y petróleo), los cuales por no ser renovables se están agotando y además su combustión produce gases de invernadero principalmente CO₂. Estas concentraciones han ido aumentando según la NASA [1], lo cual provoca el calentamiento global, problema ambiental reconocido por la Organización de Naciones Unidas (ONU) [2]. Adicionalmente, las normas ambientales son cada vez más rigurosas en cuanto a las emisiones permitidas que son enviadas a la atmósfera. Por lo anterior es necesario reducir su consumo mejorando el uso eficiente de estos combustibles.

El gas LP es una fuente energética, teniendo usos domésticos, industriales y comerciales; este gas se obtiene ya sea de yacimientos independientes o de la refinación del petróleo y aunque su composición varía en función del yacimiento, su principal especie química es el propano (90% volumétrico). Uno de los principales usos, es en las estufas de los hogares, donde se genera el proceso de combustión para calentar alimentos por medio de utensilios de cocina.

Actualmente, en las estufas de uso doméstico, uno de los principales problemas es la baja eficiencia que presentan los quemadores, lo que provoca alto consumo del combustible y mayor emisión de contaminantes. Los quemadores de las estufas domesticas funcionan de la siguiente manera: entra combustible y aire mezclados por la parte inferior y éste es conducido hasta las salidas de las portas (orificios por donde sale la mezcla de aire y gas); hay una porta chica y una grande intercaladamente. La porta chica tiene el propósito de estabilizar la llama (Figura 1.1).

El aire que se utiliza en la mezcla proviene del medio ambiente y se introduce de forma primaria previo a la combustión, y de forma secundaria por arrastre cuando se está llevando a cabo la misma.

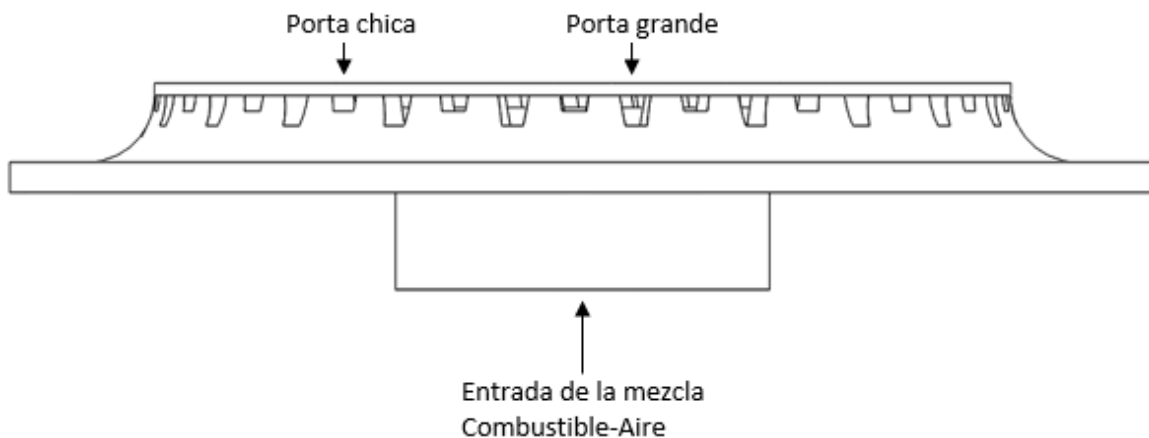


Figura 1.1 Esquema de un quemador de estufa doméstica.

Para aumentar la eficiencia en este tipo de quemadores, los fabricantes han realizado modificaciones como aumentar la cantidad de aire en la mezcla, variar los tamaños y separaciones de las portas así como sus ángulos de salida.

El conocimiento previo que se tiene es únicamente por trabajo experimental, el cual está desarrollado a nivel industrial, y por lo tanto la información obtenida no es de dominio público. Por lo tanto, para fabricar quemadores eficientes y poco contaminantes se requiere un conocimiento de las características del fluido y de su interacción con la cinética química.

1.2 Métodos de análisis

Para el diseño de quemadores eficientes y menos contaminantes se requiere un estudio del flujo reactivo de la combustión en el quemador, los cuales se basan principalmente de la experimentación práctica, la cual tiene un rango de aplicación muy limitada.

Para llevar a cabo un trabajo experimental se requiere la fabricación del modelo físico original o de un prototipo a escala donde se puedan realizar las pruebas, con el inconveniente de que para su construcción el costo es elevado y para sus pruebas el tiempo es muy grande. Debido a estas dificultades los científicos han venido

utilizando la alternativa de la simulación numérica, ya que no solo es más económica y rápida, si no también proporciona información detallada de las variables importantes en el estudio.

En el problema a analizar ocurre el fenómeno de turbulencia, el cual se hace notar especialmente al momento de iniciar la combustión en las salidas de las portas del quemador. En 1937, Taylor y Von Kármán [3] propusieron la siguiente definición de turbulencia: “la turbulencia es un movimiento irregular el cual en general hace su aparición en fluidos, gaseoso o líquido, cuando fluyen por superficies sólidas o hasta cuando las corrientes vecinas del mismo fluido fluyen una en otra o sobre otra”. La turbulencia se caracteriza por la presencia de un gran rango de escalas espaciales y temporales.

Cuando la turbulencia y la combustión se combinan en un solo problema se presenta la dificultad de interacción entre la aerodinámica y la cinética química, teniendo lugar en las pequeñas escalas de flujo turbulento. También se suma la complejidad en la cinética química, aun para el propano (C_3H_8), como combustible a utilizar en este análisis, cuando reacciona químicamente con el aire se hacen presente alrededor de 279 reacciones y 49 especies distintas, conocido como el mecanismo detallado de la reacción GRI 2.11 [4].

Los modelos matemáticos más conocidos para representar los flujos turbulentos son: La simulación numérica directa (Direct Numerical Simulation, DNS), la simulación de Grandes Escalas (Large Eddy Simulation, LES) y Promediados de Reynolds de las Ecuaciones de Navier-Stokes (Reynolds Averaged Navier-Stokes Equation, RANS).

El método DNS resuelve las ecuaciones de Navier-Stokes numéricamente sin ninguna simplificación para todos los movimientos en un flujo turbulento (sin emplear modelos de turbulencia). Este modelo tiene como limitación el gran tiempo de cómputo necesario para su resolución, lo que restringe su uso a estudios de geometrías muy sencillas.

LES consiste en resolver los movimientos de las escalas más grandes del flujo mientras se aproximan los movimientos de escalas pequeñas. Debido a que la mayor parte de las reacciones químicas se presentan en las escalas más pequeñas, no es factible utilizar este método al menos que se hiciera más fino el tamaño de la malla lo cual nuevamente implicaría un costo computacional elevado dejando este método poco viable para el estudio.

Por último, el método RANS el cual ha sido ampliamente estudiado y ha resultado bastante útil para la mayoría de los problemas ingenieriles. Este modelo descompone todas las variables en su valor medio y su valor fluctuante. Para propósitos de ingeniería es más importante resolver los valores medios de las variables que los detalle los valores de las fluctuaciones. Para ello, es posible utilizar alguno de los llamados “modelos de turbulencia”, el más usado comúnmente es el $\kappa - \varepsilon$ estándar desarrollado por Launder y Spalding en 1974 [5].

Conforme se avanza por cada categoría, los movimientos turbulentos se calculan utilizando más aproximaciones, lo cual hace que los métodos sean menos exactos. Sin embargo, el tiempo de cálculo se disminuye considerablemente. Debido a esto, se utilizará la aproximación de las ecuaciones RANS con el modelo $\kappa - \varepsilon$ en la investigación presente.

Una de las implicaciones al utilizar el método de RANS es que el término del promedio de la tasa de reacción química es altamente no lineal, por lo que no puede ser calculada a partir de sus valores medios.

Para modelar la tasa de reacción química existe la hipótesis de dos posibles casos: reacciones infinitamente rápidas y muy lentas. Para determinar esta hipótesis se usa el número de Damköhler (Da), que se usa para conocer si la interacción de la cinética química tiene más importancia que la turbulenta; este número es la relación entre la escala de tiempo de la turbulencia t_I y la escala de tiempo de la reacción química t_q .

$Da = t_I/t_q$, la hipótesis muestra que cuando $t_q \ll t_I$ o $Da \gg 1$ se dice que la reacción es rápida y para números de Damköhler muy altos una consideración

adicional permite considerar la reacción como infinitamente rápida e ignorar totalmente la cinética química. Entre esta clase de modelos se encuentra el modelo Eddy Break Up. Del otro lado si $t_q \gg t_l$ o $Da \ll 1$ se dice que la cinética química ocurre lentamente, y se considera al fluido completamente mezclado y su tasa de reacción media puede ser calculada con valores medios de sus escalares termoquímicos. Pero cuando los valores de t_q y t_l andan en el mismo orden de magnitud una tercera hipótesis puede usarse, para esto es posible utilizar un función de densidad de probabilidad (FDP), la cual contiene todos los datos estadísticos sobre los parámetros que influyen en la reacción, por lo que es posible calcular el término del promedio de la tasa de reacción química sin ninguna aproximación. La FDP es comunmente usada cuando se presentan formación de contaminantes como el CO y NO, para calcularla existen dos casos, suponer una forma genérica de la FDP y calcular numéricamente la FDP a partir de una ecuación de transporte. Debido a que este estudio utiliza una geometría compleja el uso de la FDP se vuelve inviable para su análisis con esta técnica. Por lo que, se utilizará el modelo Eddy Break Up para representar a la cinética química.

1.3 Objetivos

Objetivo general

Estudiar numéricamente el flujo reactivo de la combustión en el quemador de una estufa doméstica para una mezcla de propano y aire.

Objetivos específicos

1. Generar un modelo numérico que represente las características fundamentales de la llama de propano, como especies mayoritarias y temperaturas en el quemador de una estufa doméstica.
2. Validar experimentalmente los cálculos numéricos.
3. Estudiar el efecto en el flujo reactivo que causan las variaciones en la geometría, características del fluido y flujo, y parámetros del modelo de combustión.
4. Determinar la transferencia de calor en el quemador para las condiciones de operación seleccionadas.

2. ECUACIONES DE TRANSPORTE

A continuación, se describe la metodología seguida en el presente trabajo, comprendiendo la descripción del problema físico en donde se detallan las características del tipo de llama y flujo usadas para modelar un proceso de combustión, así como se presenta el modelo matemático en coordenadas cartesianas que se utilizara para dar solución al flujo reactivo turbulento de este trabajo.

2.1 Clasificación de los sistemas de reacción

Antes de proponer las ecuaciones que determinaran el comportamiento del flujo es necesario clasificar a nuestro sistema de reacción en el tipo de llama, el cual depende de la forma que ingresan los reactantes a la zona de reacción; el tipo de flujo es clasificado según el diagrama propuesto por Borghi.

2.1.1 Tipo de llama

Las llamas se clasifican de acuerdo al estado de los reactantes cuando llegan a la zona de reacción en llamas difusivas y de premezcla (Figura 2.1).

Las llamas son también clasificadas por su régimen de flujo en llamas laminares o turbulentas y a su vez en difusivas o premezcladas; para un flujo dentro de una tubería, ésta se presentan a un $Re \geq 2000$. A continuación una breve descripción de estas llamas.

Llamas de premezcla: Cuando el aire y el gas se mezclan antes de la zona de combustión. Si el aire premezclado con el comburente representa la cantidad total requerida en la combustión, se tiene una llama de premezcla total. Cuando el aire premezclado representa sólo una fracción del aire requerido, la llama se denomina de premezcla parcial.

Llamas de difusión: Cuando el aire y el gas se mezclan justamente en la zona de combustión. En este caso el aire se difunde hacia la llama por difusión molecular y/o turbulencia.

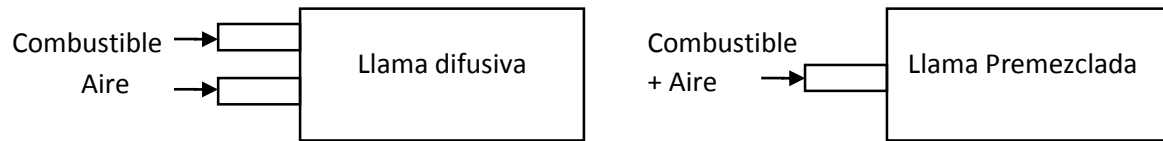


Figura 2.1 Configuración del tipo de llama.

Ventajas de las llamas de premezcla.

- Concentra la fuente de calor ya que la combustión inicia inmediatamente en la zona de reacción (debido a que los reactantes ya van previamente mezclados).
- Reduce el volumen de la cámara de combustión.
- Se alcanzan mayores temperaturas de llama para las mismas condiciones de una llama difusiva.
- Se presenta menos formación de depósito de carbono sobre las paredes para las mismas condiciones de una llama difusiva.

Inconvenientes de las llamas de premezcla.

- No es posible establecer la combustión en zonas de grandes longitudes (por lo que la superficie a calentar debe de estar muy próxima a la zona de reacción).
- Pueden presentar el fenómeno de retrollama (flashback).

Ventajas de la llamas de difusión.

- En régimen laminar la llama tiene buenas propiedades radiantes, permitiendo obtener un rendimiento elevado.
- Pueden obtener llamas de grandes longitudes, propiedad interesante en ciertos equipos industriales.
- En los gases combustibles que tienen altos contenidos de hidrógeno, la llama soporta altas variaciones de caudal.

- El fenómeno de retrollama es imposible, dado que no existe premezcla del gas y el aire.

Inconvenientes de la llama difusiva.

- La zona de alta temperatura para una llama adiabática es menor que la de premezcla para las mismas condiciones.
- Sensibles al contacto con las paredes, lo cual puede llevar a la formación de depósitos de carbono.

2.1.2 Tipo de flujo

Debido a que en este trabajo el sistema reactivo bajo análisis es de tipo premezclado, éste será revisado más a detalle. Los flujos premezclados pueden ser clasificados según el diagrama propuesto por Borghi [6] (Figura 2.2). En el eje de la ordenada es la relación entre la intensidad turbulenta y la velocidad de propagación de la llama laminar \sqrt{k}/u_F , y la abscisa la relación entre la escala de turbulencia y el espesor de llama laminar l_I/l_F . Para el análisis de las zonas de combustión en el diagrama de Borghi es necesario definir el número de Damköhler, Da_I , que es la relación del tiempo de la escala integral al tiempo químico:

$$Da_I = \frac{t_I}{t_q} = \frac{u_F l_I}{\sqrt{k} l_F} \quad (2.1)$$

donde u es la velocidad, k es la energía cinética turbulenta, y l y t se refieren a la longitud y tiempo característico respectivamente. Los subíndices indican: I la escala integral, F una característica de la llama turbulenta, y q la cinética química. A continuación se definen las diferentes zonas del diagrama:

Zona de mezcla perfecta ($Da_I \ll 1$): la mezcla inducida por la turbulencia, tiene lugar de forma mucho más rápida que la reacción. En esta zona la tasa media de reacción se calcula frecuentemente con valores medios de las variables.

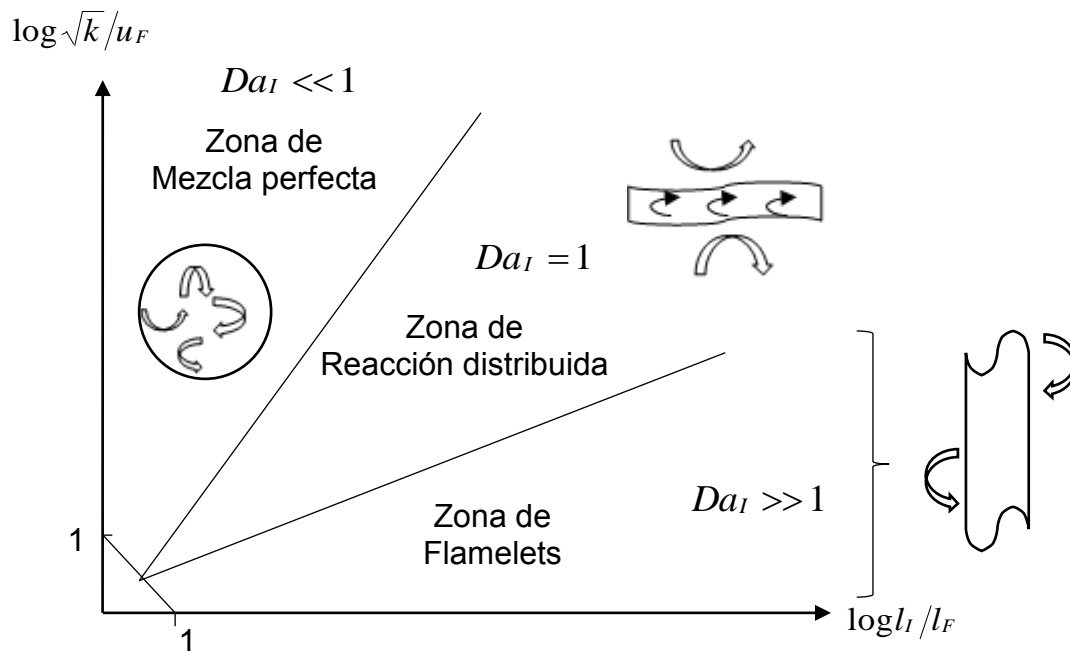


Figura 2.2 Diagrama de Borghi.

Zona de flamelets ($Da_I \gg 1$): para estas reacciones la zona reactiva tiende a ser muy delgada y no es afectada internamente por la turbulencia, por lo que la zona de reacción es simplemente ondulada por la escala de la turbulencia. Para números de Damköhler muy altos es común considerar la reacción como infinitamente rápida, e ignorar totalmente la cinética química. En esta clase de modelos se encuentran los modelos del tipo “lo que se mezcla reacciona”, incluyendo el popular modelo Eddy Break Up (EBU). El modelo EBU supone que en la reacción química, el factor limitante es la velocidad a la que los reactantes se mezclan a nivel molecular.

Zona de reacción distribuida ($Da_I = 1$): aquí la velocidad de la reacción química es de la misma escala que la velocidad de la cinética química por lo que ambos parámetros influyen de manera definitiva en la combustión.

2.2 Descripción del problema

El problema considerado en esta investigación corresponde al estudio numérico de la combustión del flujo reactivo de una estufa doméstica. El fluido que ingresa al quemador es una premezcla de gas de propano-aire los cuales reaccionan químicamente. El flujo se encuentra en régimen turbulento y la geometría es multidimensional.

2.3 Continuidad

La ecuación de continuidad se basa en la ley de conservación de masa. Aplicando el concepto de movimiento de un fluido, la tasa de variación de la masa en coordenadas cartesianas para un volumen de control diferencial es equivalente a la diferencia de la masa que entra y sale a través de sus fronteras. Enseguida la ecuación de continuidad en estado estacionario es:

$$\nabla \cdot (\rho \vec{v}) = 0 \quad (2.2)$$

donde ρ es la densidad y \vec{v} la velocidad. El término representa la entrada y salida de masa por las fronteras del dominio.

2.4 Conservación de cantidad de movimiento

Esta ecuación representa matemáticamente a la segunda ley de Newton, la cual establece que el incremento temporal del momento lineal en el volumen de control (VC) más el flujo neto de momento lineal de salida del VC debe ser igual a la suma de las fuerzas que actúan sobre el VC.

Estas fuerzas son de dos tipos: las fuerzas másicas o de cuerpo y las fuerzas superficiales. Las fuerzas másicas actúan directamente sobre la masa volumétrica del VC (fuerza de gravedad, centrífuga, coriolis, eléctrica y magnética). En

semejanza las fuerzas superficiales actúan sobre la superficie del VC del fluido; como es la presión ejercida sobre la superficie impuesta por el fluido exterior al VC y las fuerzas causadas por las tensiones viscosas (normales y tangenciales) que actúan sobre la superficie del VC debido al contacto directo causado por el fluido exterior. Como consideraciones, el flujo es incompresible ya que el fluido lleva una baja velocidad ($Ma < 0.3$), viscosidad constante y se encuentra en estado estacionario.

A continuación se presenta la ecuación de conservación de momento para fluidos newtonianos, en notación tensorial:

$$\nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) = -\nabla p + \mu \nabla^2 \cdot \vec{v} + \rho \vec{g} \quad (2.3)$$

donde p es la presión, μ es la viscosidad molecular de la mezcla y g es la gravedad.

2.5 Conservación de la energía total

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

$$e = u + \frac{1}{2} |\vec{v}|^2 + U \quad (2.4)$$

donde e , u y U son respectivamente, la energía específica total, interna y potencial, y $g = -\nabla U$. Como consideraciones el fluido es incompresible ya que el fluido lleva una baja velocidad ($Ma < 0.3$), su viscosidad es constante, se encuentra en estado estacionario, no hay intercambio de calor por radiación, se desprecia la disipación viscosa ($Ec \ll 1$), no se toman en cuenta las fuerzas gravitatorias ($Fr \gg 1$) y se omite la derivada sustancial de la presión (no hay gradientes de presión extrema).

La ecuación de la energía total es:

$$\nabla \cdot (\rho \vec{v} h) = \nabla \cdot \vec{J}_h \quad (2.5)$$

donde \vec{J}_h es el flujo difusivo de calor y h es la entalpía de la mezcla.

2.6 Conservación de especies

Para una mezcla de α gases y en un determinado volumen se encuentren n_α moles de cada uno. Se define la fracción molar de la siguiente manera:

$$X_\alpha = \frac{n_\alpha}{n_T} \quad (2.6)$$

donde n_α son los moles de la especie α y n_T son los moles totales. Si los pesos moleculares de las especies son n_w , definimos la fracción másica:

$$Y_\alpha = \frac{n_\alpha W_\alpha}{n_T W_T} = \frac{m_\alpha}{m_T} \quad (2.7)$$

donde m_α es la masa de la especie α y m_T es la cantidad de masa total en el volumen de control.

Y por definición:

$$\sum_{\alpha=1}^N Y_\alpha = 1 \quad (2.8)$$

La conservación de la especie α para un estado estacionario, se expresa en términos de la fracción másica por la ecuación:

$$\nabla \cdot (\rho \vec{v} Y_\alpha) = -\nabla \cdot \vec{J}_\alpha + \dot{\omega}_\alpha \quad \alpha = 1, 2, \dots, N \quad (2.9)$$

donde \vec{J}_α es el flujo difusivo de la especie α y $\dot{\omega}_\alpha$ es la tasa de reacción química neta. Para satisfacer la ecuación de continuidad (2.2), se cumple lo siguiente:

$$\sum_{\alpha=1}^N \dot{\omega}_\alpha = 0 \quad \sum_{\alpha=1}^N \vec{J}_\alpha = 0 \quad (2.10)$$

2.7 Ecuación de estado y flujo difusivo

Las ecuaciones de transporte deben ser suplementadas con ecuaciones de estado que relacionen la densidad, la presión y temperatura por expresiones para el flujo difusivo.

La densidad de la mezcla en términos de la densidad de las especies constitutivas queda expresada como.

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

Modelando cada especie como un gas ideal, la ecuación de gas ideal se puede escribir como:

$$\rho = \frac{p}{RT \sum_{\alpha=1}^N \frac{Y_\alpha}{W_\alpha}} \quad (2.12)$$

La entalpía de la mezcla se define como:

$$h = \sum_{\alpha=1}^N Y_\alpha h_\alpha \quad (2.13)$$

donde h_α es la entalpía de cada especie de la mezcla. La entalpía de la especie α es la suma de las entalpías térmica y química:

$$h_\alpha = \int_{T_0}^T C_{p,\alpha} T dT + \Delta h_{f,\alpha} \quad (2.14)$$

siendo C_p el calor específico a presión constante de la especie α y $\Delta h_{f,\alpha}$ es la entalpía de formación de la especie α y T_0 es la temperatura de referencia.

El flujo difusivo \vec{J}_α , se produce por gradiente de especies, de temperatura y de presión [7]. \vec{J}_α , se expresa según la ley de Fick, que se escribe como [8]:

$$\vec{J}_\alpha = \frac{\rho W_\alpha}{W_m^2} \sum_{\beta \neq \alpha}^N D_{\alpha\beta} W_\beta \nabla X_\beta \quad (2.15)$$

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

$$\vec{J}_\alpha = -D_\alpha^M \rho \frac{Y_\alpha}{X_\alpha} \nabla X_\alpha \quad (2.16)$$

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

$$D_{\alpha}^M = \frac{1 - Y_{\alpha}}{\sum_{\beta \neq \alpha}^N x_{\beta} / D_{\alpha\beta}} \quad (2.17)$$

El flujo difusivo de calor \vec{J}_h , se produce por conducción de calor, por el efecto Dufour y por el flujo difusivo de la especie. Por lo tanto el término \vec{J}_h se expresa con la ley de Fourier:

$$\vec{J}_h = -k\nabla T \quad (2.18)$$

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

2.8 Promediado de las ecuaciones

En la mayoría de los problemas ingenieriles, el flujo de trabajo mantiene un estado turbulento. La turbulencia en un fluido tiene como característica la variación aleatoria, arbitraria e irregular de las propiedades a través del espacio y del tiempo. El método del promediado de las ecuaciones de conservación consiste en promediar las fluctuaciones de todas las escalas temporales, resolviendo las ecuaciones de transporte para los valores promedio del fluido.

Debido a que el flujo reactivo es de densidad variable se pueden usar dos alternativas de promediado, el promediado de Reynolds y el de Favre, el primero considera a la densidad constante y el segundo no.

Suponiendo a Φ como cualquier propiedad transportada como la fracción másica de una especie química o la entalpia, los valores instantáneos se desglosan en términos de un promedio y una fluctuación turbulenta:

$$\Phi = \bar{\Phi} + \Phi' \text{ (Promedio de Reynolds)} \quad (2.19)$$

$$\Phi = \tilde{\Phi} + \Phi'' \text{ (Promedio de Favre)} \quad (2.20)$$

El promedio de Reynolds y de Favre se definen como:

$$\bar{\Phi} = \lim_{n_e \rightarrow \infty} \frac{1}{n_e} \sum_{i=1}^{n_e} \Phi^{(i)} \quad (2.21)$$

$$\tilde{\Phi} = \lim_{n_e \rightarrow \infty} \frac{1}{n_e} \sum_{i=1}^{n_e} \rho^{(i)} \Phi^{(i)} \quad (2.22)$$

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

A continuación las características generales de los promedios de Reynolds y Favre:

$$\overline{\Phi'} = 0, \overline{\rho\Phi'} = 0, \overline{\Phi''} \neq 0, \overline{\rho\Phi''} = 0 \quad (2.23)$$

Con estas definiciones se obtienen:

$$\bar{\Phi} = \tilde{\Phi} + \overline{\Phi''} \quad (2.24)$$

$$\overline{\Phi''} = - \frac{\overline{\rho'\Phi''}}{\bar{\rho}} \quad (2.25)$$

$$\overline{\rho'\Phi''} = \overline{\rho'\Phi'} \quad (2.26)$$

$$\overline{u_i \Phi'} = u_i \tilde{\Phi}'' + \frac{\overline{\rho' u_i \Phi''}}{\bar{\rho}} + u_i \overline{\Phi''} \quad (2.27)$$

El método de promediado de Favre utiliza las ecuaciones instantáneas de transporte debido a que no toma en cuenta las fluctuaciones de la densidad, dando el siguiente resultado: Ecuación de continuidad (2.28). Ecuación de cantidad de movimiento (2.29). Ecuación de la energía total (2.30) y la ecuación de conservación de especies químicas (2.31).

$$\nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\vec{v}}) = 0 \quad (2.28)$$

$$\nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\vec{v}} \tilde{\vec{v}}) = -\nabla \bar{p} + \underbrace{\mu \nabla^2 \cdot \tilde{\vec{v}}}_I + \underbrace{\nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\vec{v}}'' \tilde{\vec{v}}'')}_{II} + \rho \vec{g} \quad (2.29)$$

$$\nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\vec{v}} \tilde{h}) = -\underbrace{\nabla \cdot \tilde{\vec{J}}_h}_I - \underbrace{\nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\vec{v}}'' \tilde{h}'')}_{II} \quad (2.30)$$

$$\nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\vec{v}} \tilde{Y}_\alpha) = \underbrace{\nabla \cdot \tilde{\vec{J}}_\alpha}_I + \underbrace{\nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\vec{v}}'' \tilde{Y}_\alpha'')}_{II} + \bar{\omega}_\alpha \quad (2.31)$$

Estas ecuaciones comparadas con las ecuaciones instantáneas tienen el término adicional ($u_i'' \Phi''$), el cual representa físicamente el transporte convectivo de Φ debido a los movimientos turbulentos. En flujos turbulentos el término I de las ecuaciones pasadas son despreciables comparadas con el término II , por lo podemos despreciarlo dando origen a las siguientes ecuaciones:

$$\nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{v}) = 0 \quad (2.32)$$

$$\nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{v} \tilde{v}) = -\nabla \bar{p} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{v}'' \tilde{v}'') + \bar{\rho} \vec{g} \quad (2.33)$$

$$\nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{v} \tilde{h}) = -\nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{v}'' \tilde{h}'') \quad (2.34)$$

$$\nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{v} \tilde{Y}_\alpha) = \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{v}'' \tilde{Y}_\alpha'') + \bar{\omega}_\alpha \quad (2.35)$$

Debido a que el flujo es de baja velocidad ($Ma < 0.3$), se supondrá que las fluctuaciones de la presión son despreciables. Por lo tanto los valores promedios de la densidad y de la tasa de reacción química pueden ser expresados en función de la presión de referencia P_0 .

$$\bar{\rho} = P_0 \left(R_U T \sum_{\alpha=1}^N \frac{Y_\alpha}{W_\alpha} \right)^{-1} \quad (2.36)$$

$$\bar{\omega}_\alpha(P, \rho, \phi_\alpha) = \dot{\omega}_\alpha(P_0, \bar{\rho}, \tilde{\phi}_\alpha) \quad (2.37)$$

donde $\tilde{\phi}_\alpha$ representa la fracción másica de la especie química y la entalpia.

El término $(\bar{\rho} \tilde{v}'' \tilde{\Phi}_\alpha'')$ de las ecuaciones anteriores son desconocidos, por lo que requieren de modelación. Para el cierre del término $(\bar{\rho} \tilde{v}'' \tilde{v}'')$ de la ecuación promedio de cantidad de movimiento se utiliza un modelo de turbulencia, el cual resuelve a detalle todas las fluctuaciones turbulentas; éste deberá ser ampliamente

aplicable, preciso, simple y computacionalmente económico. Para ésto, se seleccionó el modelo de turbulencia $\kappa - \varepsilon$.

2.9 Modelo de Turbulencia $\kappa - \varepsilon$

Éste modelo de turbulencia es uno de los más utilizado y fue propuesto originalmente propuesto por Launder y Spalding [9]. Éste emplea la ecuación modelada de la energía cinética turbulenta κ , junto con una ecuación de transporte de la tasa de disipación viscosa ε . A continuación, se muestra la ecuación de conservación de κ [10].

$$\underbrace{\frac{\partial \rho \kappa}{\partial t}}_I + \underbrace{\nabla \cdot (\rho \kappa \bar{u}_i)}_{II} = - \underbrace{\nabla \cdot (-P u_i)}_{III} + \underbrace{\nabla \cdot (2 \mu \overline{u'_i e'_{ij}})}_{IV} - \underbrace{\nabla \cdot \rho \frac{1}{2} (\overline{u'_i \cdot u'_i u'_j})}_V \quad (2.38)$$

$$- \underbrace{2 \mu \overline{e'_{ij} \cdot e'_{ij}}}_{VI} - \underbrace{\rho \overline{u'_i u'_j \cdot E_{ij}}}_{VII}$$

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

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

El término *VI* representa la disipación de energía debido a los remolinos más pequeños existentes en el régimen de flujo turbulento. Este término siempre es negativo, al igual que los *III*, *V* y *VII*, debido al transporte de la propiedad que se tiene en un punto del flujo y sus vecinos. El término $\varepsilon = 2\nu \overline{e'_{ij} e'_{ij}}$ es conocido como la tasa de disipación de la energía cinética turbulenta. A continuación, la ecuación de transporte para κ y ε (ecuaciones 2.42 y 2.43, respectivamente).

$$U = \kappa^{\frac{1}{2}} \quad (2.39)$$

$$1 = \frac{\kappa^{\frac{3}{2}}}{\varepsilon} \quad (2.40)$$

$$\mu_T = \rho C_\mu \frac{\kappa^2}{\varepsilon} \quad (2.41)$$

$$\underbrace{\frac{\partial \rho \kappa}{\partial t}}_I + \underbrace{\nabla \cdot (\rho \kappa \bar{u}_i)}_{II} = \underbrace{\nabla \cdot \left(\frac{\mu_T}{\sigma_\kappa} \nabla \kappa \right)}_{III} + \underbrace{2 \mu_T E_{ij} \cdot E_{ij}}_{IV} - \underbrace{\rho \varepsilon}_V \quad (2.42)$$

$$\underbrace{\frac{\partial \rho \varepsilon}{\partial t}}_I + \underbrace{\nabla \cdot (\rho \varepsilon \bar{u}_i)}_{II} = \underbrace{\nabla \cdot \left(\frac{\mu_T}{\sigma_\varepsilon} \nabla \varepsilon \right)}_{III} + \underbrace{C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{\kappa} 2 \mu_T E_{ij} \cdot E_{ij}}_{IV} - \underbrace{C_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{\kappa}}_V \quad (2.43)$$

Estas dos ecuaciones presentan cinco incógnitas, los valores de ellas son obtenidas mediante ajuste para un amplio rango de flujos turbulentos, a continuación se presentan:

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

Para realizar el cierre de las ecuaciones (2.32), (2.33), (2.34) y (2.35) es necesario conocer el promedio de la tasa de reacción química $\bar{\dot{\omega}}$, debido a que la reacción no es lenta comparada con el tiempo característico de la turbulencia y ésta no puede ser calculada a partir de sus valores medios. Adicionalmente, debido a la complejidad de la geometría no es viable computacionalmente utilizar una FDP. Por lo que en este estudio se utilizara el modelo Eddy Break Up (EBU) para representar la cinética química. A continuación se presenta el método.

2.10 Modelo Eddy Break Up (EBU)

El modelo Eddy Break Up se utiliza para reacciones de cinética química muy rápidas $Da_I \gg 1$, para modelar la tasa de reacción química $\bar{\dot{\omega}}$. Este modelo propuesto inicialmente por Spalding [11] y [12], y después modificado por varios autores, supone que el valor limitante en la tasa de reacción química no es la velocidad cinética, sino la velocidad a la que los reactantes se mezclan a nivel de las partículas. La velocidad de mezcla puede ser representada mediante un término proporcional a la velocidad de disipación de las fluctuaciones del escalar, se puede modelar como:

$$\bar{\dot{\omega}} = -C_{EBU} \bar{\rho} \frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{\kappa}} \sqrt{\tilde{Y}_C^2} \quad (2.44)$$

donde C_{EBU} es una constante y \tilde{Y}_C^2 es la varianza de Favre de la fracción másica del combustible. Para escalares pasivos, esta varianza puede moldearse mediante una ecuación de transporte; para escalares reactivos, el término de reacción química da lugar a correlaciones no cerradas, difíciles de modelar y que en combustión turbulenta pueden ser importantes.

Magnussen et al [13] proponen, para evitar este problema, sustituir $\sqrt{\tilde{Y}_C^2}$ por la fracción másica media de la especie con menor presencia:

$$\bar{\dot{\omega}} = -C_{EBU} \bar{\rho} \frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{\kappa}} \min\left(\tilde{Y}_C, \frac{\tilde{Y}_O}{S}, \frac{\tilde{Y}_P}{1+S}\right) \quad (2.45)$$

donde S es el coeficiente de relación aire-combustible (es la masa de oxidante por unidad de combustible que se necesita para la reacción completa) y los subíndices C , O , P , se refieren al combustible, oxidante y productos respectivamente. La presencia de los términos en la función mínimo en la ecuación (2.45) asegura que la velocidad de reacción es nula cuando alguno de los reactantes no está en proporciones suficientes para la reacción.

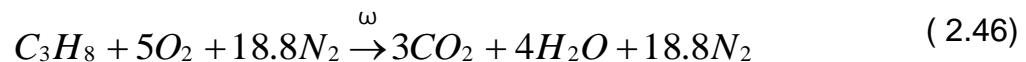
Para aplicaciones prácticas este modelo de combustión es frecuentemente utilizado para describir reacciones químicas de flujos premezclados. Las constantes C_{EBU} de la ecuación (2.45), suelen tomar valores entre 2 y 8 según la configuración estudiada.

2.11 Modelo de combustión

Debido a la dificultad de interacción entre la aerodinámica y la cinética química, no es posible utilizar el mecanismo de tallado de la reacción (GRI 2.11), debido a su gran costo computacional. Por lo que, se maneja un mecanismo químico reducido global para el propano, y éste será suficiente para determinar las características fundamentales de la llama, tales como especies mayoritarias y temperaturas.

A continuación se presentan los mecanismos reducidos globales de uno y dos pasos de reacción para el propano usados en esta tesis, propuestos por Westbrook y Dryer [14].

2.11.1 Mecanismo global de un paso



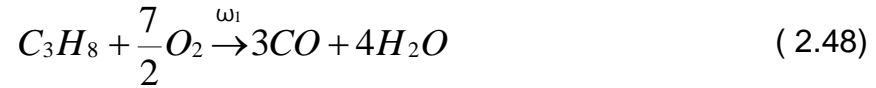
Esta reacción es irreversible y su velocidad de reacción es:

$$\omega = 8.6(10^{11})e^{-\frac{1.2558 \times 10^8}{RT}} [C_3H_8]^{0.1} [O_2]^{1.65} \quad (2.47)$$

donde ω son $kmol/m^3s$.

2.11.2 Mecanismo global de dos paso

Westbrook y Dryer también propusieron un mecanismo global de dos pasos para la combustión del propano que incluye la oxidación del C_3H_8 a CO y la oxidación del CO a CO_2 .



Las velocidades de reacción son:

$$\omega_1 = 1.0(10^{12}) e^{-\frac{1.2558 \times 10^8}{RT}} [C_3H_8]^{0.1} [O_2]^{1.65} \quad (2.50)$$

$$\omega_2 = 4.778(10^7) e^{-\frac{6.698 \times 10^7}{RT}} [CO][H_2O]^{0.5} [O_2]^{0.3} \quad (2.51)$$

donde ω_1 y ω_2 son $kmol/m^3s$.

Las reacciones anteriores se consideran irreversibles, esto es, la proporción de la reacción inversa o hacia atrás se supone muy baja.

2.12 Modelo de radiación

Las pérdidas de energía por radiación, particularmente en la formación del contaminante CO, se incluyen en la simulación un modelo sencillo de radiación.

El modelo usado calcula la radiación a partir de especies "luminosas" como el CO_2 y H_2O .

Este modelo considera la hipótesis de llama ópticamente delgada (absorción del gas despreciable) y desprecia el efecto de la dispersión. Por lo tanto, el flujo de calor por radiación se puede escribir como [15]:

$$q_{rad} = -4\sigma K_p (T^4 - T_\infty^4) \quad (2.52)$$

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

$$K_p = X_{CO_2} K_{p,CO_2}(T) + X_{H_2O} K_{p,H_2O}(T) \quad (2.53)$$

donde K_{p,CO_2} y K_{p,H_2O} son los coeficientes de absorción del CO₂ y H₂O.

2.13 Modelo de flotación

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

$$F = (\rho - \rho_{ref}) * g \quad (2.54)$$

en donde ρ_{ref} es una constante.

3. MÉTODO DE SOLUCIÓN

El sistema de ecuaciones presentadas en el capítulo anterior no tiene solución analítica por lo que se utilizara el cálculo numérico para su resolución. Se utilizara el método volúmenes finitos para resolver las ecuaciones promediadas de la aerodinámica. También se presentará el método SIMPLE y los métodos de relajación.

3.1 Método de volúmenes finitos

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

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{\phi}) + \nabla \cdot (\bar{\rho}\tilde{u}_i\tilde{\phi}) - \nabla \cdot (\Gamma_\phi \nabla_\phi) = \bar{S}_\phi \quad (3.1)$$

donde Γ_ϕ es el coeficiente de difusión y \bar{S}_ϕ es el término fuente. Los términos del lado izquierdo de la ecuación (3.1) son el término transitorio, convectivo y difusivo, respectivamente. Los términos Γ_ϕ y \bar{S}_ϕ están especificados para cada variable $\tilde{\phi}$. En el caso de la ecuación de continuidad, $\tilde{\phi} = 1$.

Esta ecuación general (3.1), se puede discretizar con el método de volúmenes finitos. Con este método, el dominio se divide en pequeños volúmenes de control (Figura 3.1), asociando a cada uno de ellos un punto nodal. De manera similar, se discretiza el tiempo en intervalos temporales. La ecuación diferencial resultante, se integra en cada volumen de control y en cada intervalo temporal, y el resultado es una ecuación discretizada que relaciona los valores de $\tilde{\phi}$ para un determinado grupo de puntos nodales. Esta ecuación algebraica expresa el principio de conservación de $\tilde{\phi}$ en el volumen finito, de la misma manera que la ecuación

diferencial lo expresa para un volumen infinitesimal. La ecuación algebraica para un nodo P puede expresarse en forma general como:

$$a_P \tilde{\phi}_P = \sum_{i,I=E,W,N,S,H,L} a_i \tilde{\phi}_I + a_T \tilde{\phi}_T + B \quad (3.2)$$

donde el subíndice I representa las celdas vecinas, i la cara entre las celdas P e I , T el valor correspondiente en el intervalo temporal anterior, y B el término fuente [16].

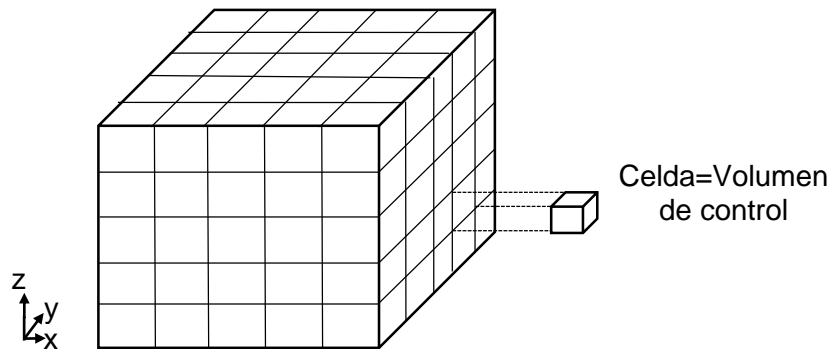


Figura 3.1 Representación del sistema discretizado en volúmenes finitos.

En el caso de una malla cartesiana, escalona (“staggered”) y uniforme (celdas de iguales dimensiones espaciales), se puede emplear por sencillez un volumen de control bidimensional, como el que se muestra en la Figura 3.1 (el espesor de la celda en dirección z puede considerarse la unidad.) En una malla escalonada, las variaciones se encuentran definidas en el centro de la celda, mientras que las componentes de velocidad en cada dirección, correspondientes a la celda, se encuentran desplazadas a las caras de la celda.

En la Figura 3.2, se muestra la notación de la celda y de sus vecinas. Dada una celda P , sus vecinas se nombrarán según las iniciales de los puntos cardinales (en inglés) en las direcciones “ x ” e “ y ” y como “Low” y “High” en la dirección z . Las caras de la celda se nombran con la misma nomenclatura, pero con letras minúsculas. A

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

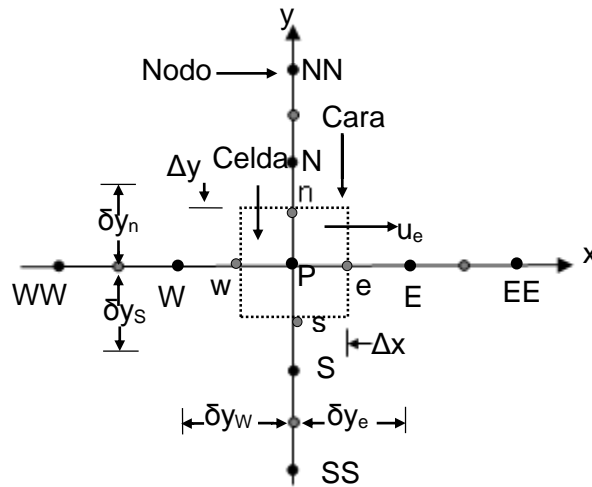


Figura 3.2 Diagrama esquemático de un volumen de control bidimensional.

A continuación, se presentan los términos de la ecuación discretizada (3.2). Definiendo tres expresiones mediante los símbolos F , D , y Pe como:

$$F = \bar{\rho} \tilde{v}_i, \quad D = \frac{\Gamma}{\delta_i}, \quad Pe = \frac{F}{D} \quad (3.3)$$

donde \tilde{v}_i es la velocidad en la cara i , δ_i es la distancia entre los nodos que incluyen la cara i y Pe es de número de Péclet, que es una relación entre la convección y la difusión. Las expresiones para F y D representan el efecto de los términos convectivo y difusivo, respectivamente, de la ecuación de transporte (3.1).

Los coeficientes a_i de la ecuación (3.2) son:

$$a_i = D_i f(|Pe|_i) + \max(-F_i, 0) \quad (3.4)$$

Los valores F y D en la cara de la celda de la ecuación (3.3) son:

$$F_i = \left(\bar{\rho} \tilde{v} \right)_i \Delta_i \quad D_i = \frac{\Gamma_i \Delta_i}{(\delta i)}, i = n, s, e, w \quad (3.5)$$

donde Δ_i es la longitud de la cara i .

Para determinar F_i se necesita conocer $\bar{\rho}$ y \tilde{u}_i en la cara de la celda. El cálculo del término convectivo de la ecuación de transporte (3.1) requiere también el conocimiento de la variable escalar, $\tilde{\phi}$, en la cara de la celda. La velocidad \bar{v}_i está calculada en la cara de la malla escalonada; pero $\bar{\rho}$ y $\tilde{\phi}$ están calculados en el nodo y necesitan ser interpolados a la cara para calcular los coeficientes a_i de la ecuación discretizada (3.2). La obtención de estas variables en la cara de la celda es importante para la precisión y convergencia de la solución. El cálculo de $\bar{\rho}$ y $\tilde{\phi}_i$ da lugar a los llamados esquemas de discretización. La función $f(|Pe|)$ de la ecuación (3.4) depende del esquema de interpolación; por ejemplo, en el esquema de diferencias desplazadas, $f(|Pe|) = 1$. Para el sistema híbrido [17]:

$$f(|Pe|) = \max(0.1 - 0.5|Pe|) \quad (3.6)$$

El coeficiente para el término transitorio es:

$$a_T = \frac{\bar{\rho}_T \Delta x \Delta y}{\Delta t} \quad (3.7)$$

Para el cálculo del término D_i (3.5) se necesita obtener el coeficiente de difusión, Γ , en la cara de la celda. El coeficiente Γ no es necesariamente una constante, probablemente puede ser función de valores variables que se conocen en los nodos (por ejemplo la temperatura) y por tanto es necesario interpolarlo en la cara. Esta interpolación puede ser aritmética o armónica. Como ejemplo, para la cara e , estas interpolaciones son:

$$\Gamma_e = \frac{\Delta x(\Gamma_P + \Gamma_E)}{2\delta x_e} \quad \Gamma_e = \frac{2\delta x_e}{\Delta x\left(\frac{1}{\Gamma_P} + \frac{1}{\Gamma_E}\right)} \quad (3.8)$$

El término fuente de la ecuación general (3.1), \bar{S}_ϕ , se linealiza como:

$$\bar{S}_\phi = \bar{S}_{\phi,c} + \bar{S}_{\phi,v}\tilde{\phi}_P \quad (3.9)$$

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

Con esta suposición, los términos B y a_p de la ecuación (3.2) son:

$$B = \bar{S}_{\phi,c} \Delta x \Delta y + a_T \tilde{\phi}_T \quad (3.10)$$

$$a_p = a_e + a_w + a_n + a_s + a_T - \bar{S}_{\phi,v} \Delta x \Delta y \quad (3.11)$$

La ecuación (3.2) se aplica en cada celda del dominio, para cada $\bar{\phi}$ y para cada paso temporal Δt , por lo que se tiene un sistema de ecuaciones lineales (los coeficientes a pueden depender, directa o indirectamente de $\tilde{\phi}$, por lo que el sistema es realmente pseudo-lineal). Para resolver este sistema de ecuaciones se puede utilizar cualquier método de resolución de ecuaciones lineales.

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

Entre los algoritmos iterativos que se basan en este procedimiento, están los de la familia SIMPLE (Semi-Implicit Method for Pressure- Linked Equations), ([18] y [17]). El algoritmo utilizado en esta tesis para resolver el problema de acoplamiento velocidad-presión pertenece a esta familia.

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

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

$$\bar{S}_{\phi,r} = \frac{\bar{\rho}V_P}{\Delta t_f} \left(\tilde{\phi}_P^{(n-1)} - \tilde{\phi}_P^{(n)} \right) \quad (3.12)$$

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

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

$$\tilde{\phi}_P^{(n)} = \alpha \tilde{\phi}_P^{sol} + (1 - \alpha) \tilde{\phi}_P^{(n-1)} \quad (3.13)$$

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

El criterio de convergencia utilizado para detener el proceso iterativo para un paso temporal dado y pasar al siguiente es tal que, para cada variable, la suma de los

valores absolutos de los residuos en todo el dominio sea menor que un determinado porcentaje de un valor de referencia.

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

Dado que el quemador es circular y simétrico, y con fines de ahorro en memoria y tiempo de cálculo, el dominio de la simulación es aproximadamente una octava parte del quemador ($\theta = 41.25^\circ$), en la cual tenemos tres portas grandes y dos chicas.

4. CONFIGURACIÓN Y CONSIDERACIONES REALIZADAS PARA LA SIMULACIÓN

En éste estudio se simulará el flujo reactivo de la combustión en el quemador de una estufa doméstica, donde se analizará el efecto que causan las variaciones en la geometría, características del fluido y parámetros del modelo de la cinética química. A continuación se describe la configuración geométrica y los detalles numéricos para simular el sistema bajo estudio.

4.1 Configuración geométrica del sistema a simular

Las dimensiones del quemador utilizado para este estudio fueron tomadas de una estufa doméstica comercial. En la Figura 4.1 y Figura 4.2 se muestran la vista lateral y frontal del quemador, respectivamente, así como una imagen en 3 dimensiones del mismo (Figura 4.3); en su parte inferior presenta una entrada, por la cual entrará una mezcla de aire-combustible y saldrá por los orificios laterales denominadas portas (véase Figura 4.4). El quemador de la estufa cuenta con portas grandes y otras chicas intercaladamente (32 portas en total). La función de la porta chica es que el flujo salga a una velocidad menor a la de la porta grande y así permitir la estabilidad de la llama del quemador.

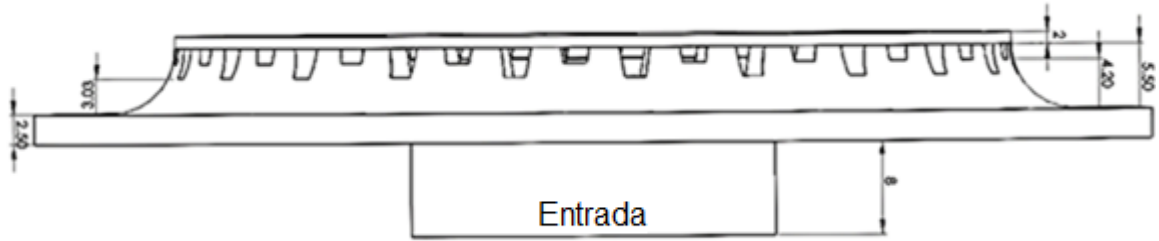


Figura 4.1 Vista lateral del quemador (Medidas en mm).

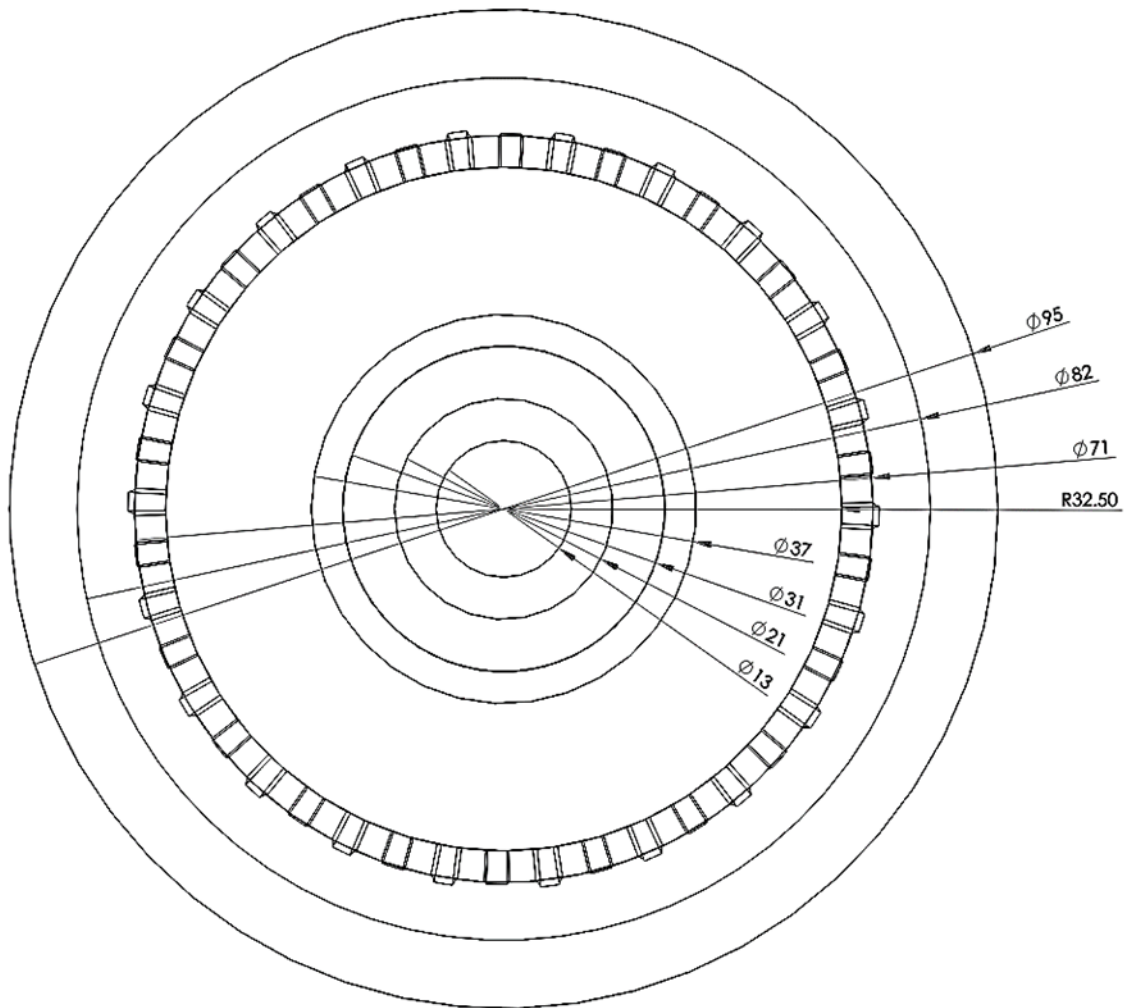


Figura 4.2 Vista frontal del quemador (Medidas en mm).

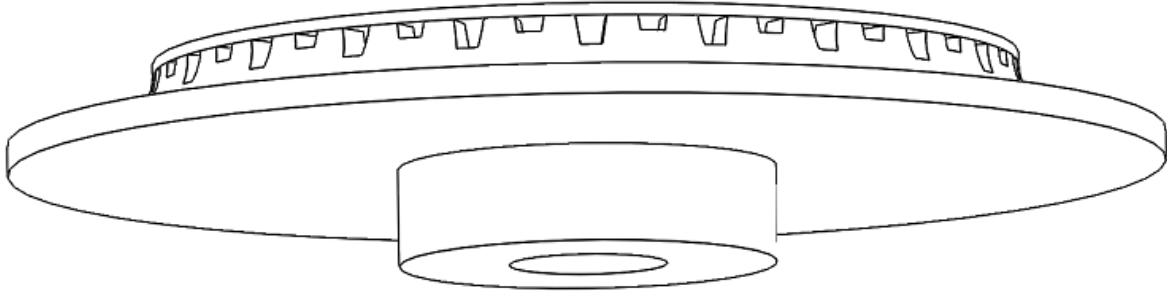


Figura 4.3 Vista del quemador en 3D.

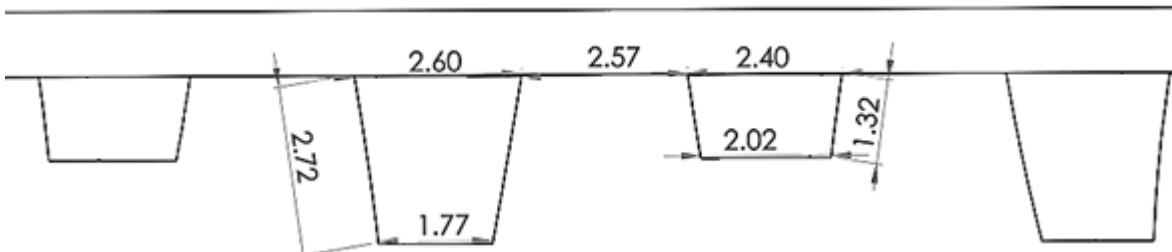


Figura 4.4 Portas del quemador (Medidas en mm).

4.2 Parámetros iniciales y de frontera del caso base

Una vez planteado el sistema a analizar es necesario especificar los parámetros iniciales del caso y las condiciones de contorno para resolver las ecuaciones que describen el proceso. En la Figura 4.5 se muestran las fronteras del caso de estudio.

4.2.1 Parámetros iniciales del proceso iterativo.

Se requieren especificaciones para iniciar el proceso iterativo. El quemador está rodeado de aire a una presión atmosférica y a temperatura ambiente, donde las condiciones iniciales son:

$$\bar{P} = 77000Pa, \bar{T} = 300K$$

4.2.2 Condiciones de frontera

En la Figura 4.5 se muestran las fronteras determinadas para este caso de estudio, como condiciones de pared y condiciones abiertas.

Condiciones de pared:

Quemador y frontera baja: en ésta se aplica la condición de no-deslizamiento, imponiendo velocidad nula en todos los nodos del contorno. El quemador se considera de un material de acero (1% de carbono).

$$\tilde{u}_\theta = \tilde{u}_r = \tilde{u}_z = 0.0.$$

Condiciones abiertas:

Frontera superior, en esta se aplica condición libre:

$$\frac{\partial u_z}{\partial z} = 0, \quad \frac{\partial T}{\partial z} = 0 \text{ y } P = 77000Pa$$

Frontera lateral, se aplica condición libre:

$$\frac{\partial u_r}{\partial r} = 0, \quad \frac{\partial T}{\partial r} = 0 \text{ y } P = 77000Pa$$

Entrada: en la entrada son especificadas la velocidad, la temperatura del flujo y las fracciones másicas de los componentes del fluido. Para definir las condiciones de la entrada es necesario un cálculo previo; se utilizaran los siguientes datos de entrada:

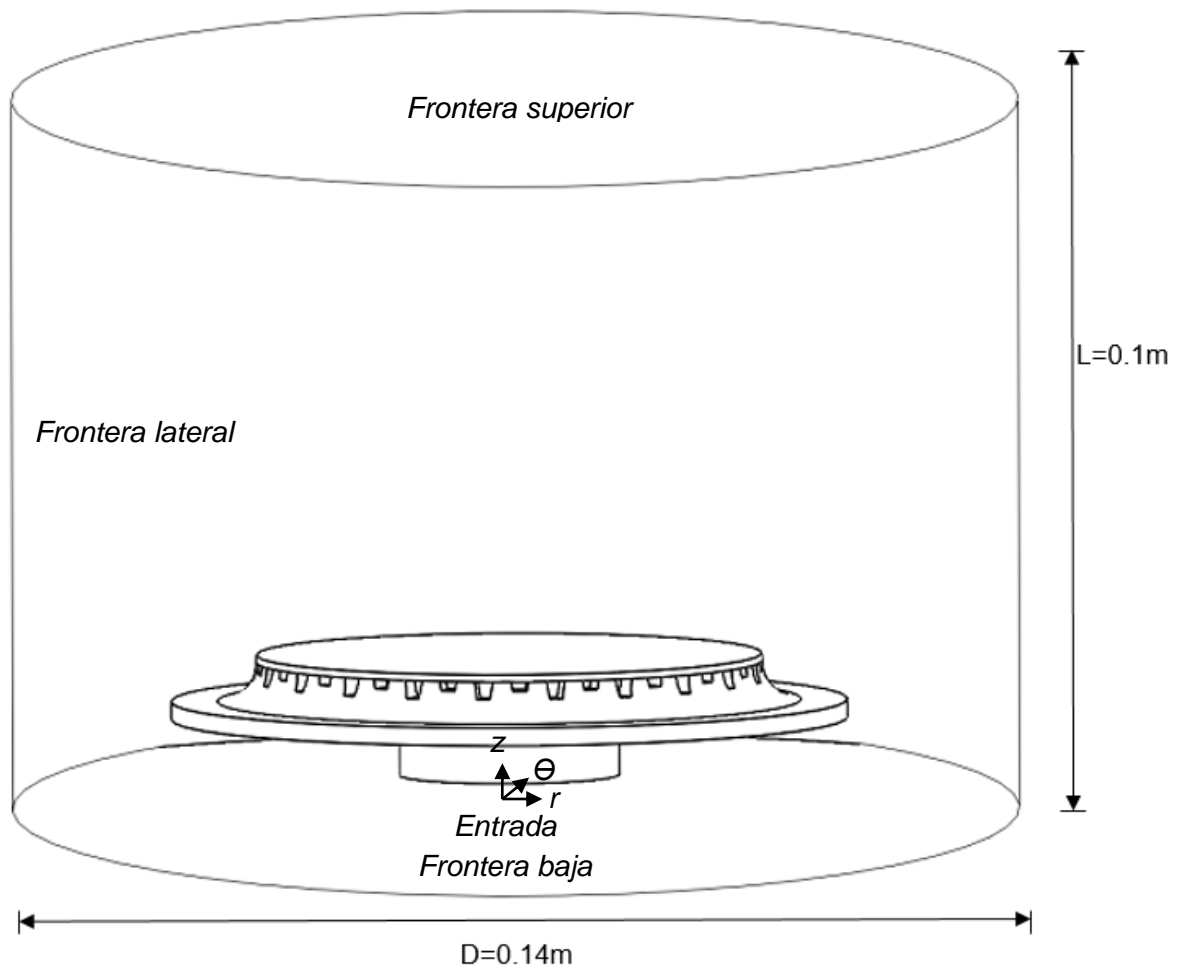


Figura 4.5 Dominio extendido, con fronteras.

Densidad del gas combustible propano (COMB), $\rho_{COMB} = 2.01 \text{kg}/\text{m}^3$

Densidad del oxidante (OXID), $\rho_{OXID} = 1.16 \text{kg}/\text{m}^3$

Esto para condiciones de 300 K y 77000 Pa.

El flujo volumétrico del combustible (gas-propano) máximo que consume la estufa comercial (tomado de catálogo) es $\dot{V}_{COMB} = 0.023 \text{m}^3/\text{hr} = 0.000006389 \text{m}^3/\text{seg}$, el cual genera una potencia de $= 7.0 \text{kJ}/\text{hr}$.

Con estos datos se determinará la cantidad de oxidante necesaria para la combustión con un 70% de exceso de aire. En el capítulo 3, se presentó la definición del coeficiente S (Relación aire-combustible necesaria para que se lleve a cabo la combustión); para un exceso de 70% de aire corresponde una $S = 26.52$. Nota: Para una relación estequiométrica (0% de exceso de aire) corresponde a una $S = 15.6$

$$\dot{m}_{COMB} = (\dot{V}_{COMB})(\rho_{COMB}) = 0.000012842 \text{ kg/seg}$$

$$\dot{m}_{OXID} = (\dot{m}_{COMB})(S) = 0.00034057 \text{ kg/seg}$$

$$\dot{m}_{TOT} = \dot{m}_{COMB} + \dot{m}_{OXID} = 0.000353412 \text{ kg/seg}$$

$$\dot{V}_{OXID} = \dot{m}_{OXID} / \rho_{OXID} = 0.000293595 \text{ m}^3/\text{seg}$$

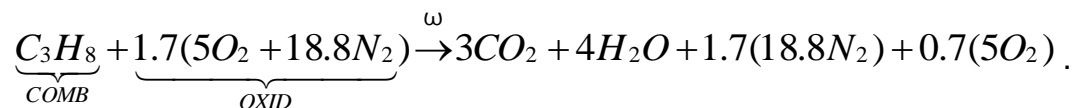
$$\dot{V}_{TOT} = \dot{V}_{COMB} + \dot{V}_{OXID} = 0.000299984 \text{ m}^3/\text{seg}$$

$$\text{Área de entrada de la mezcla, } A = \frac{\pi(0.013\text{m})^2}{4} = 0.00013273 \text{ m}^2$$

Velocidad de entrada de la mezcla

$$V = \dot{V}_{TOT} / A = 2.26 \text{ m/seg} .$$

Ahora se obtendrán las fracciones másicas del combustible y del oxidante, que tienen a la entrada estos reactantes para una mezcla con un 70% de exceso de aire:



$$PM_{COMB} = 44 \text{ kg/mol}, PM_{OXID} = 1166.88 \text{ kg/mol}, PM_{TOT} = 1210.88 \text{ kg/mol} .$$

$$\tilde{Y}_{COMB} = PM_{COMB} / PM_{TOT} = 0.036, \tilde{Y}_{OXID} = 1 - \tilde{Y}_{COMB} = 0.964 .$$

Por lo tanto las condiciones de entrada son:

$$V = 2.26 \text{ m/seg}, \tilde{Y}_{COMB} = 0.036, \tilde{Y}_{OXID} = 0.964 \text{ y } \bar{T} = 300^\circ K.$$

4.3 Caso Base

El caso base se seleccionó a partir de una geometría de un quemador comercial (presentado en el apartado 4.1), a la entrada se tiene mezcla propano-aire (70% de exceso de aire) a una velocidad de 2 m/s a partir de los cálculos en la sección anterior. Para simular el flujo reactivo, se usará el modelo Eddy Break Up (EBU) con un paso de reacción y el efecto de la radiación será omitido. Enseguida se muestra la Tabla 4.1 con las condiciones y parámetros del caso base de este estudio.

Tabla 4.1 Propiedades del caso base.

Geométricas	
Tamaño porta (chica)	2.4 mm
Separación entre portas	2.57 mm
Características del fluido/flujo	
Velocidad	2.0 m/s
Combustible	Propano
Exceso de aire	70%
Parámetros del modelo de combustión	
Radiación	No aplicada
Modelo combustión	EBU
Pasos de reacción	1
Parámetro $\left(\frac{\tilde{Y}_P}{1+S} \right)$ del modelo EBU	No aplicada
Cte. EBU	4

A continuación se establecen las variaciones que tendrá el caso base, con la finalidad de encontrar el efecto que éstas presentan en el flujo reactivo del quemador.

4.4 Configuraciones estudiadas

Las configuraciones estudiadas del quemador serán con variaciones geométricas, características del fluido/flujo, así como parámetros del modelo de combustión; con el fin de conocer sus efectos en el flujo reactivo y la transferencia de calor.

4.4.1 Variaciones geométricas

Tamaño de Porta: Se estudiaron cuatro configuraciones para el tamaño de la porta chica (considerando la medida de la parte superior, Figura 4.4); Los tamaños cambiarán a 2.0, 2.6 y 2.8 mm. El caso base tiene un tamaño de 2.4.

Separación entre portas: la medida original de la separación de las portas es 2.57 mm. Para este efecto se le aumentó o disminuyó un porcentaje de 0.75, 1.25 y 1.75.

4.4.2 Características del fluido/flujo

Variación de velocidad: La velocidad en la entrada de la mezcla del quemador se varió a 1.3 y 2.8 m/s. El caso base tiene una velocidad de 2.0.

Combustible: Se cambió a metano como combustible de la mezcla.

Exceso de aire en la mezcla: Se varió el exceso a 0 (estequiométrico) y 100%. Un exceso de 70% es para el caso base.

4.4.3 Parámetros y modelos del proceso de combustión

Modelo de radiación: Se aplica un modelo de pérdidas de calor por radiación referido en el capítulo 3.

Modelos químicos: Se cambia a un modelo con cinética química (Arrhenius) con un mecanismo reducido de un paso de reacción. El caso base usa el modelo EBU.

Número de pasos: Se incrementó la reacción a dos pasos.

Constantes de modelo EBU (ecuación 2.45): Las constantes del modelo EBU (C_{EBU}) se modifican para 1, 2 y 8; el caso base utiliza una $C_{EBU} = 4$. También, se estudiará

el efecto de utilizar el parámetro $\left(\frac{\tilde{Y}_P}{1+S} \right)$; que no es incluido en el caso base.

A continuación, en la Tabla 4.2 se muestran los parámetros que se le variaran al caso base.

Tabla 4.2 Parámetros de variación para el caso base.

Variaciones geométricas			
Parámetro	Variación 1	Variación 2	Variación 3
Portas (caso base 2.4 mm)	2.0 mm	2.6 mm	2.8 mm
Separación (caso base 2.57 mm)	0.75*Separación	1.25*Separación	1.75*Separación
Características del fluido/flujo			
Velocidades (caso base 2.0 m/s)	1.3 m/s	2.8 m/s	-----
Combustibles	Metano	-----	-----
Exceso Aire (caso base 70 %)	0%	100%	-----
Parámetros del modelo de combustión			
Radiación	Con Rad	-----	-----
Modelos químicos (caso base, modelo EBU)	Arrhenius	-----	-----

Pasos (caso base 1 paso de reacción)	2 pasos	-----	-----
C_{EBU} (caso base $C_{EBU}=4$)	$C_{EBU}=1$	$C_{EBU}=2$	$C_{EBU}=8$
Parámetro EBU	Con Parámetro	-----	-----

4.5 Estudio de independencia de malla y de dominio

En esta parte, se realiza un estudio de independencia de malla utilizando la posición del centro de la tapa y la altura de 0.018 m hasta 0.1 m (dirección z) para proponer la independencia para el caso base, los resultados se muestran en la Tabla 4.3 y en la Figura 4.6 Independencia de malla. Con los resultados obtenidos se decidió trabajar con una malla de 1.6×10^6 elementos, con 1.43% de error.

Para la independencia del dominio se hicieron modificaciones en la dirección radial, incrementando el dominio hasta 2.5 veces el radio del quemador, como se muestra en la Tabla 4.4 y en la Figura 4.7. Con los resultados obtenidos se decidió trabajar con un dominio extendido en dirección radial multiplicado por dos veces el radio del quemador (r_i).

Tabla 4.3 Estudio de independencia de malla.

Tamaño de la malla [celdas]	Temperatura promedio (K)	Diferencia porcentual
1×10^6	939	-----
1.2×10^6	958	1.98
1.4×10^6	974	1.67
1.6×10^6	988	1.43

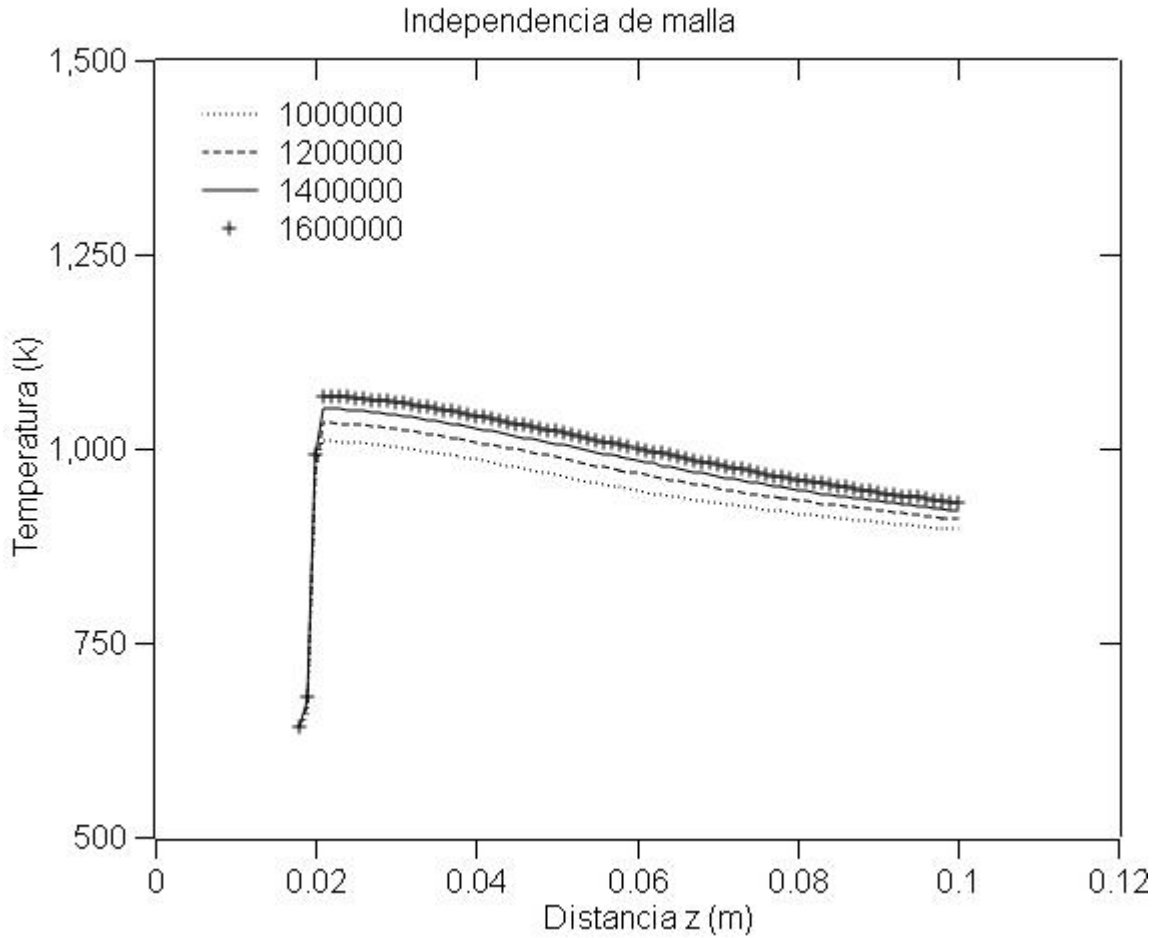


Figura 4.6 Independencia de malla.

Tabla 4.4 Estudio de independencia de dominio.

Tamaño del dominio [x, y, z]	Temperatura promedio (K)	Diferencia porcentual
$1/8 \times (2 \cdot r_i) \times 0.1 \text{m}$	844	1.07
$1/8 \times (2.5 \cdot r_i) \times 0.1 \text{m}$	845	0.11

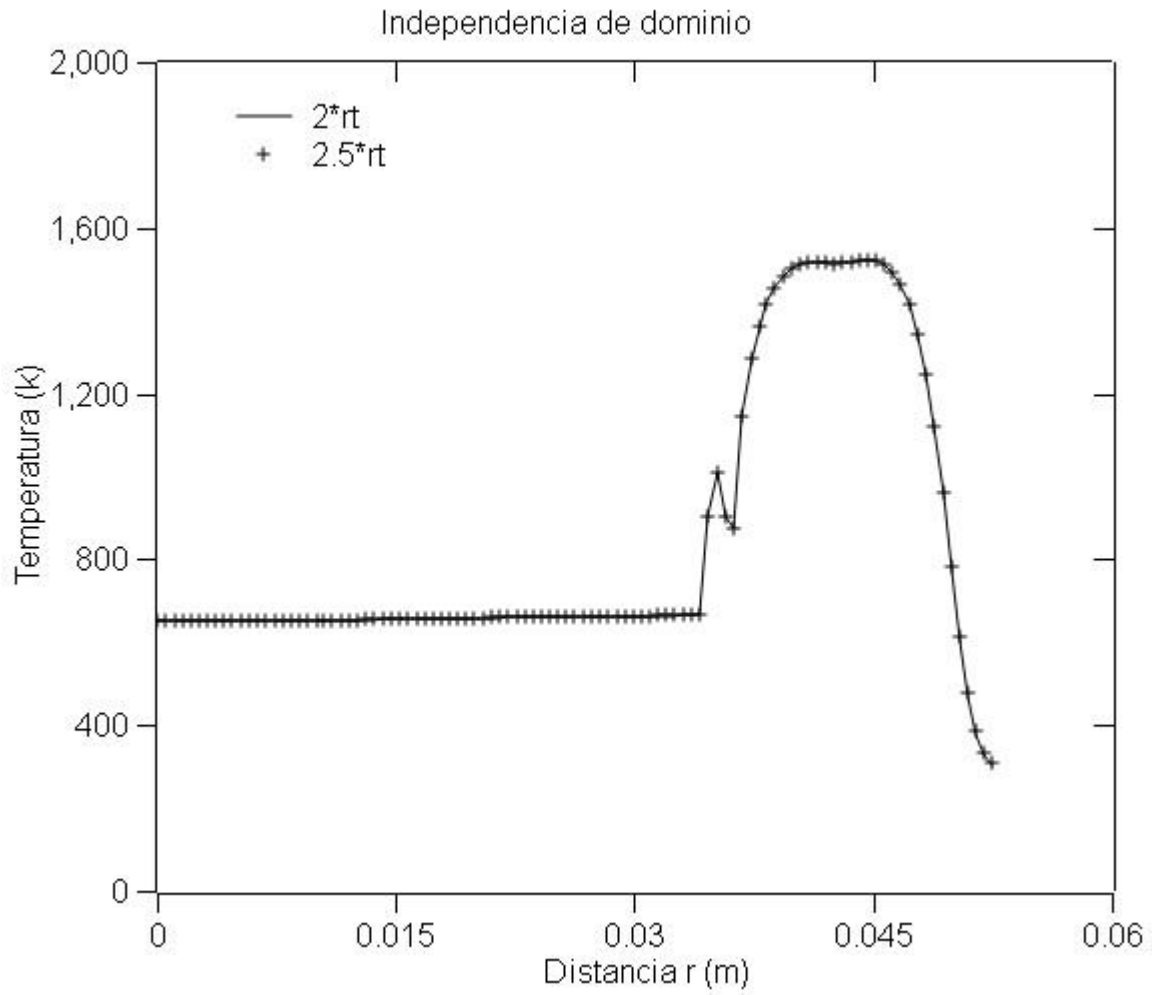


Figura 4.7 Independencia de dominio.

5. RESULTADOS

En este capítulo se muestran los resultados obtenidos del caso base para la llama de propano. Estos se presentarán para contornos de velocidad, temperatura y de fracciones másicas de oxidante, combustible y productos. Después se compararan con los resultados de las configuraciones modificadas, que se presentan en la estación axial $z/r_i=1.0$. Las longitudes axiales y radiales fueron adimensionalizadas con el radio de la tapa r_i .

5.1 Caso base

En esta sección se presentan los resultados obtenidos numéricamente para el caso base.

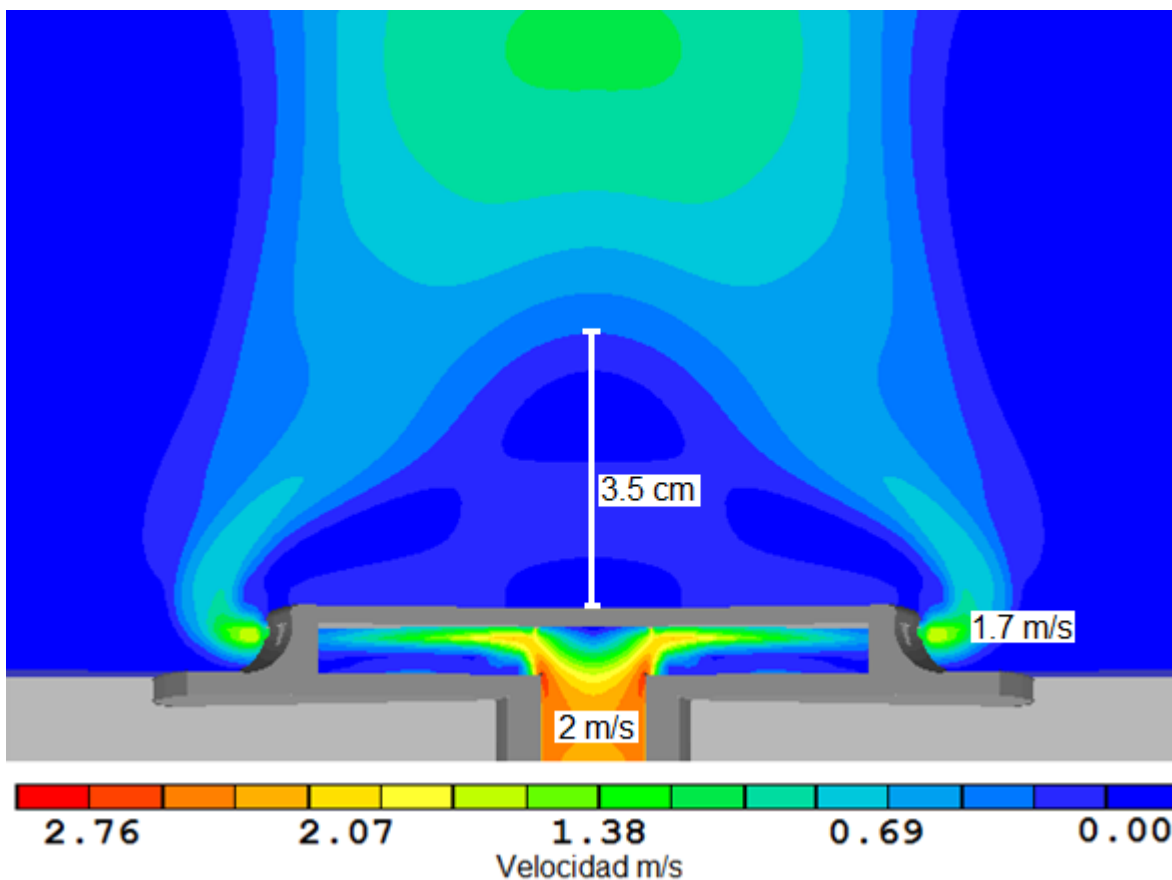


Figura 5.1 Contornos de perfiles de velocidad para el caso base.

Los contornos de velocidad para el caso base son presentados en la Figura 5.1. La mezcla de aire-combustible entra por la parte inferior a una velocidad de 2 m/s y realiza su recorrido en el interior del quemador hasta salir por las portas; a la salida de la porta grande se tiene una velocidad aproximada de 2.7 m/s y en la porta chica una velocidad de 2.2 m/s. Inmediatamente a la salida de las portas la mezcla inicia su proceso de combustión, que va a dar lugar a la formación de gases calientes, los cuales ascienden verticalmente debido al efecto de flotación y cantidad de movimiento. Desde la tapa del quemador hasta aproximadamente 3.5 cm (1 radio de la tapa, r_i) axialmente y con un radio de 3.5 cm se crea una zona de recirculación, donde los gases productos de la combustión serán atrapados; esta zona es también mostrada en la Figura 5.2; donde campos vectoriales de velocidad y líneas de corriente, se observa que el flujo después de la zona de recirculación, prácticamente tiene un movimiento vertical. Una vista sobre las portas es presentada en la Figura 5.3 donde se aprecia como entre portas se crea una zona de recirculación; ésto se propiciará por las velocidades diferentes entre las portas, debido a la diferencia en el área de salida de cada porta.

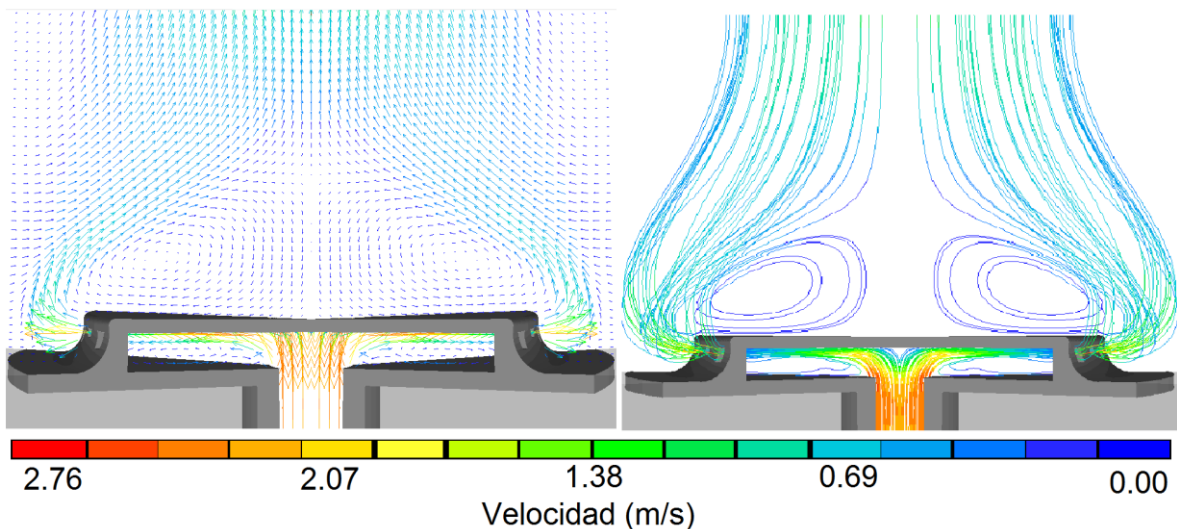


Figura 5.2 Campos vectoriales de velocidad y líneas de corriente para el caso base.

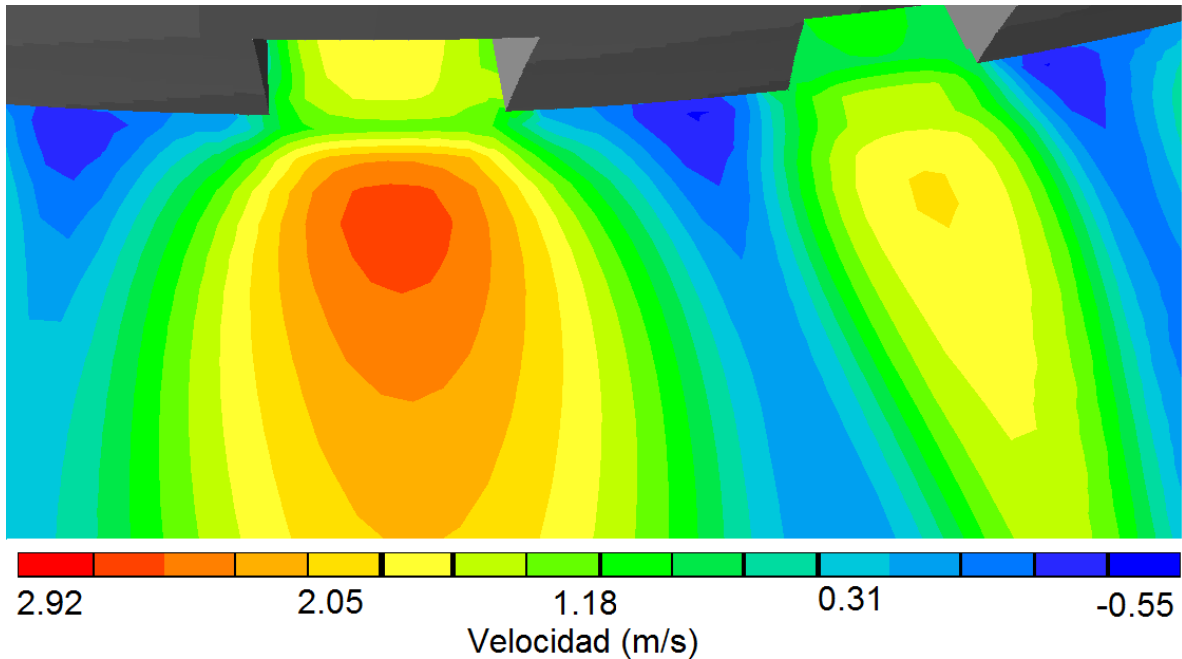


Figura 5.3 Contornos de contornos de perfiles de velocidad entre portas para el caso base.

Los contornos de temperatura son mostrados en la Figura 5.4 la mezcla aire combustible entra a 300 K, rápidamente en la salida de las portas inicia la combustión, formando gases calientes; una parte de ellos se quedan recirculando entre las portas, ésto servirá para que la mezcla aire-combustible que este saliendo por las portas se esté quemando continuamente. Justo a la salida de las portas se encuentra la máxima temperatura de 1576.9 K, que está próximo a la zona de reacción. Esta temperatura es muy semejante a la calculada para una llama adiabática con 70 % de exceso de aire. Después, se observa como la temperatura comienza a descender; ésto es debido a que el aire circundante (a 300 K) comienza a mezclarse con los gases calientes (el arrastre medio de aire circundante es 3.5 veces el flujo másico de entrada). En la Figura 5.5 se observa como el oxidante entra al quemador con una fracción másica de aproximadamente 0.964 (mezcla pobre en combustible), una vez que este empieza a reaccionar se consume hasta una fracción de oxidante de 0.419, ya que una parte de este oxidante es transformado en productos, también, se observa como después de la zona de gases calientes el oxidante presenta un valor de 1.0 (aire puro), ya en la frontera el

oxidante es arrastrado hacia los gases de combustión, los cuales llevan una velocidad en dirección axial (debido a la fuerza de flotación) lo que hace que el oxidante que esta alrededor sea arrastrado. Por otro lado, el combustible (propano) es presentado en la Figura 5.6 de donde se observa que en todo el interior del quemador la fracción másica de combustible presenta un valor de 0.036 ya que aún no se ha iniciado la combustión; una vez que este comienza a salir por las portas empieza a consumirse debido a la energía de gases los calientes que están recirculando entre portas producen la reacción entre éste y el oxidante.

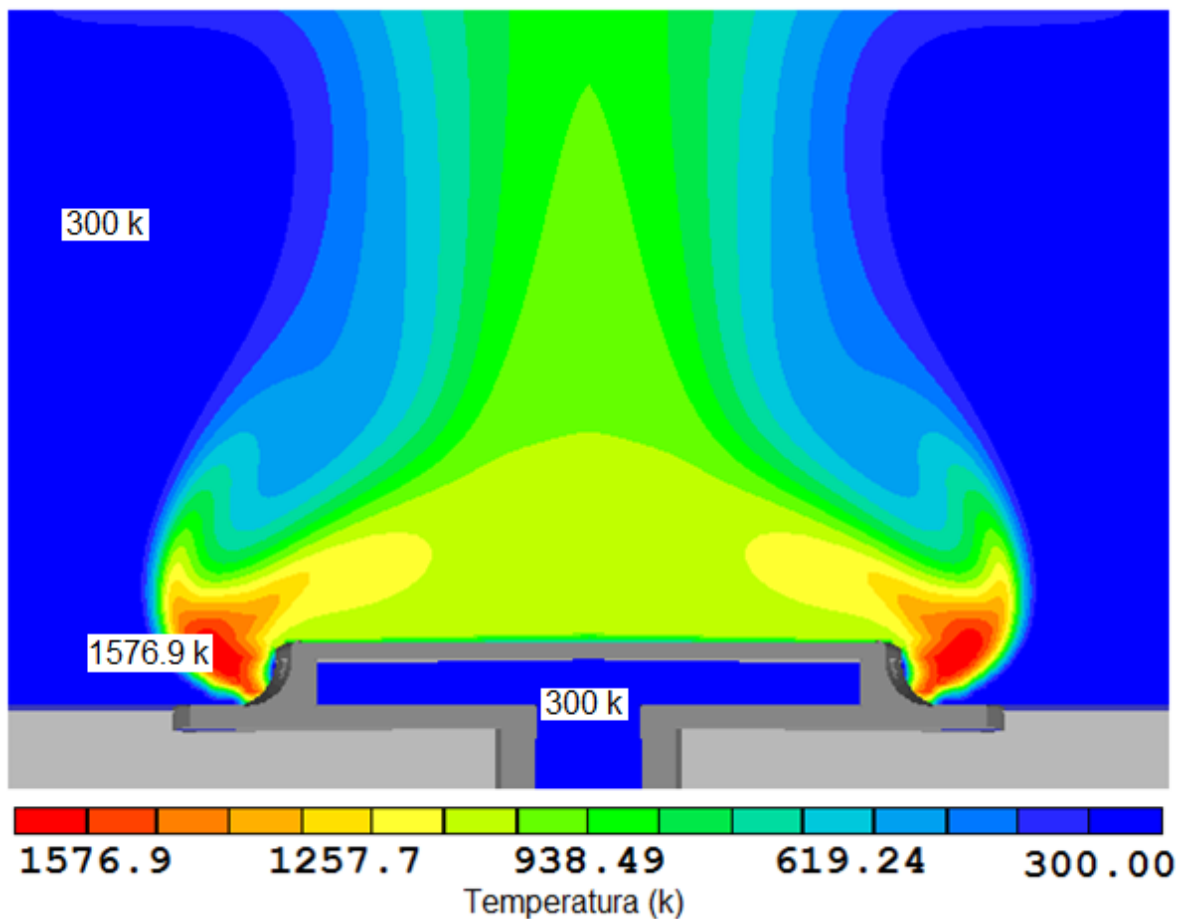


Figura 5.4 Contornos de temperatura para el caso base.

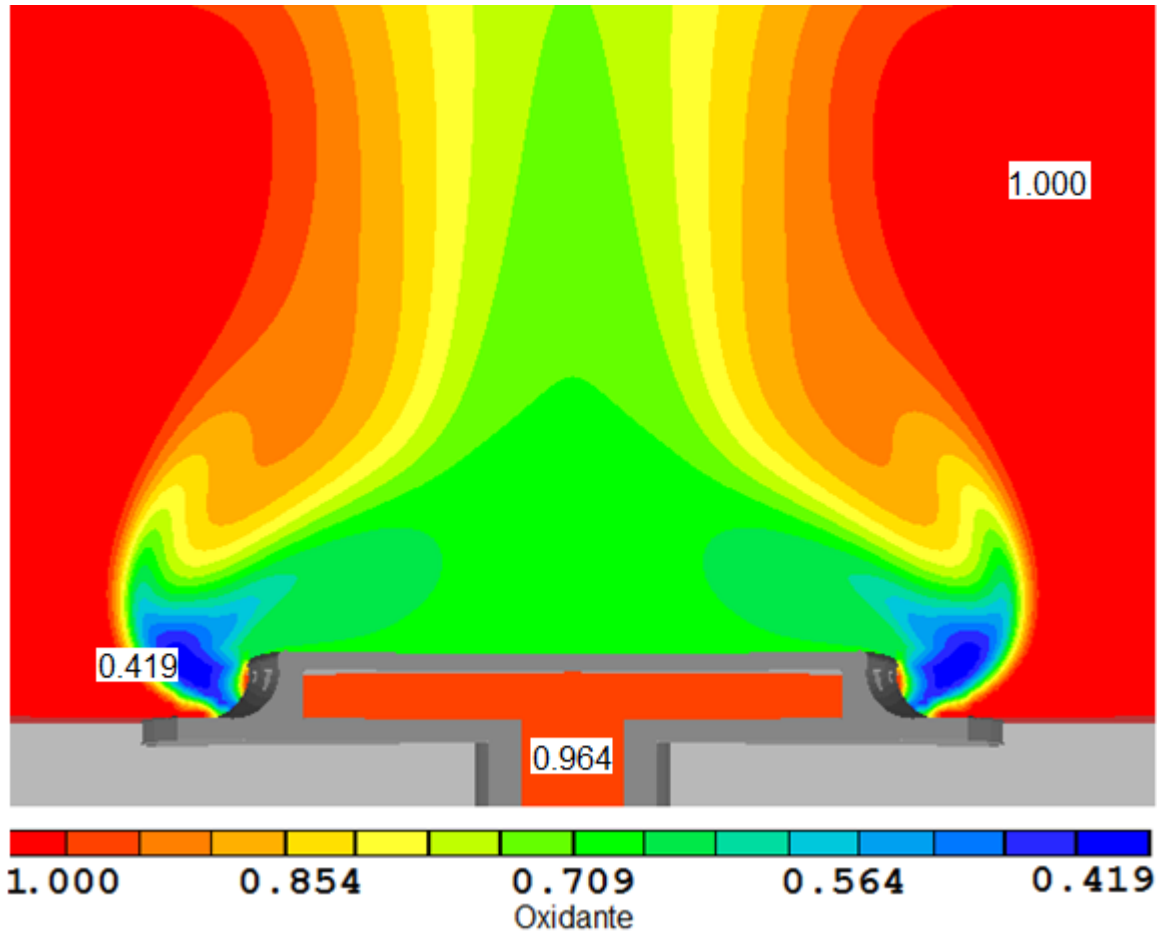


Figura 5.5 Contornos de fracción másica de oxidante para el caso base.

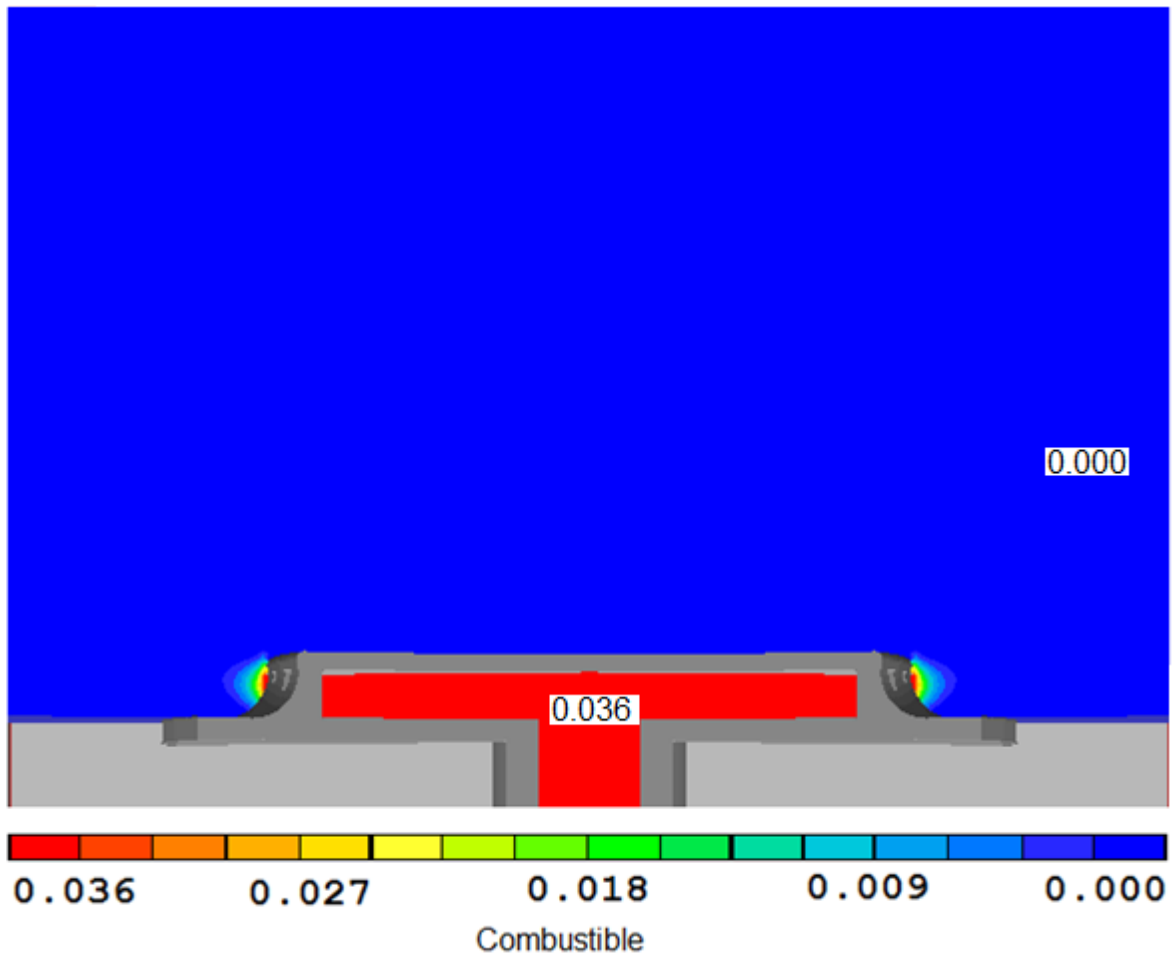


Figura 5.6 Contornos de fracción másica de combustible para el caso base.

En la Figura 5.7, son mostrados los contornos de fracción másica de productos (H_2O , CO_2 y N_2), se observa como inicialmente hay un valor nulo de productos debido a que la combustión no ha iniciado. Una vez que la mezcla esta fuera de las portas y se pone en contacto con los productos calientes que se quedaron recirculando entre las portas, hacen que la mezcla aun sin reaccionar inicie su proceso de combustión y se transforme en productos. El valor máximo de productos es de 0.579 y se tiene justo a la salida de las portas ya que ahí los productos aún no se mezclan con el aire circundante. El valor de la fracción másica de los productos empieza a disminuir al irse mezclando con el aire circundante. Los productos con mayor temperatura son impulsados verticalmente debido a que presentan una densidad más baja y ocasionan el efecto de flotación. Se observa

también como una parte de los productos quedan recirculando en el centro de la tapa del quemador, que es lo que permiten estabilizar la llama.

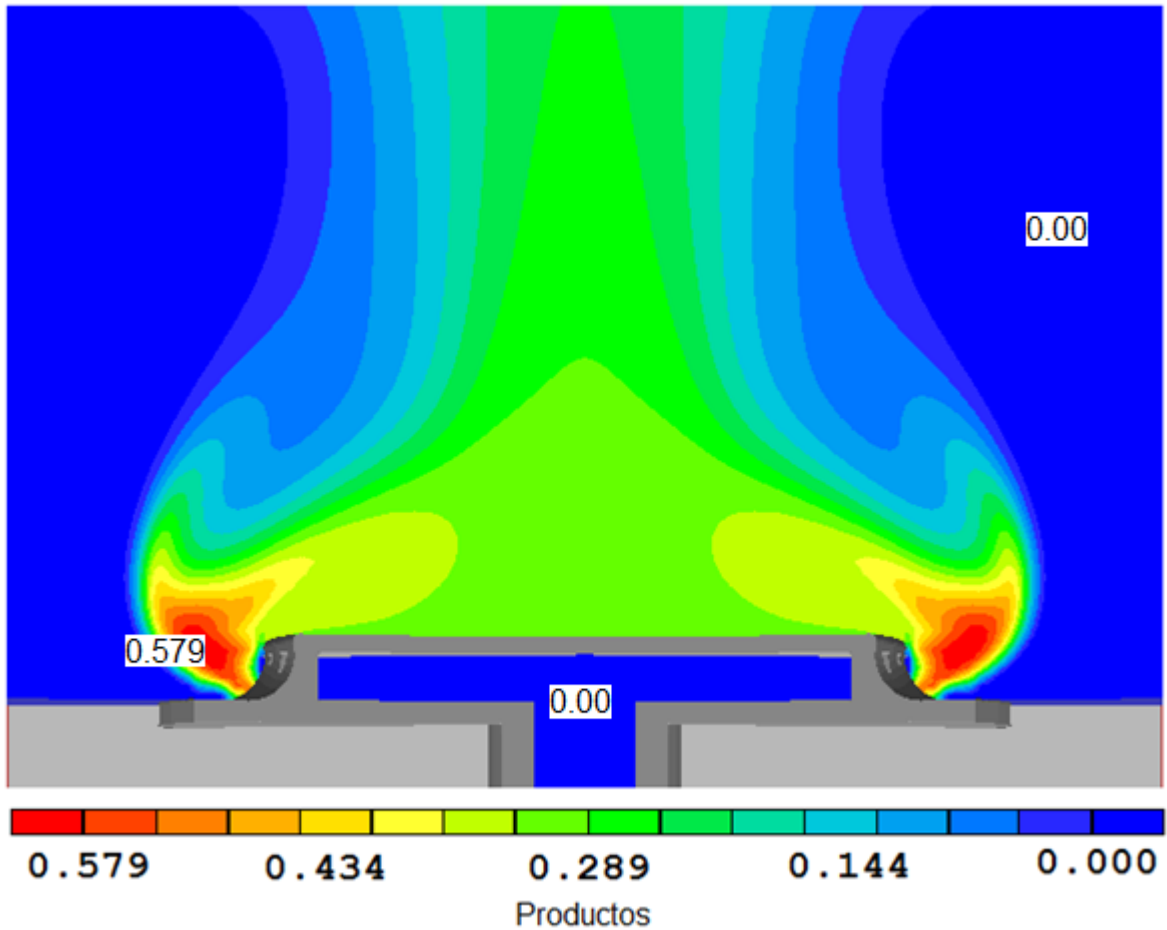


Figura 5.7 Contornos de fracción másica de productos para el caso base.

Los resultados anteriores mostraron los resultados obtenidos para perfiles de velocidad, temperatura y fracciones másicas de reactantes y productos, del flujo reactivo del quemador de la estufa; todos predicen un comportamiento cualitativamente bien.

5.2 Estudio de la fuerza de flotación

En esta sección se analiza la acción de las fuerzas de flotación e inerciales que actúan en el fluido. El estudio se realizó en la dirección axial a partir de la tapa del quemador. Se graficó Gr/Re^2 , donde Gr es el número de Grashof y Re es el número de Reynolds. Para el centro del quemador se presenta Figura 5.8, donde se observa como a partir de la tapa del quemador comienza a hacerse presente la fuerza de flotación y teniendo un máximo aproximadamente a los 3.5 cm de después de la tapa (lugar donde termina la zona de recirculación), después ésta empieza a disminuir hasta llegar a un valor nulo aproximadamente 6 cm después de la tapa.

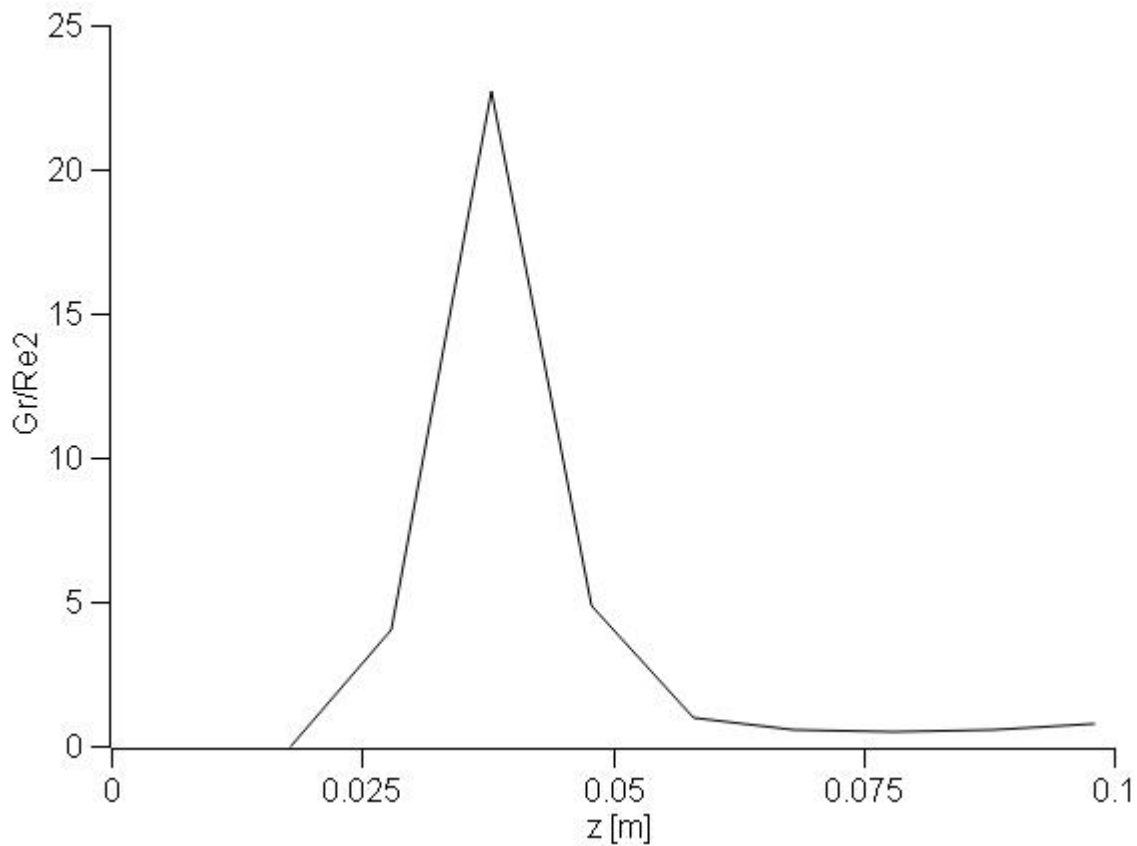


Figura 5.8 Evolución del cociente Gr/Re^2 en el centro del quemador.

En la Figura 5.9 se observa que el cociente Gr/Re^2 tiene valor mínimo aproximadamente a los 3 cm de la tapa zona donde termina la llama y las fuerzas inerciales superan a las de flotación, posteriormente el valor empieza a aumentar conforme nos alejamos de la tapa del quemador y aproximadamente a los 6 cm después de la tapa la fuerza de flotación comienza a superar a las inerciales.

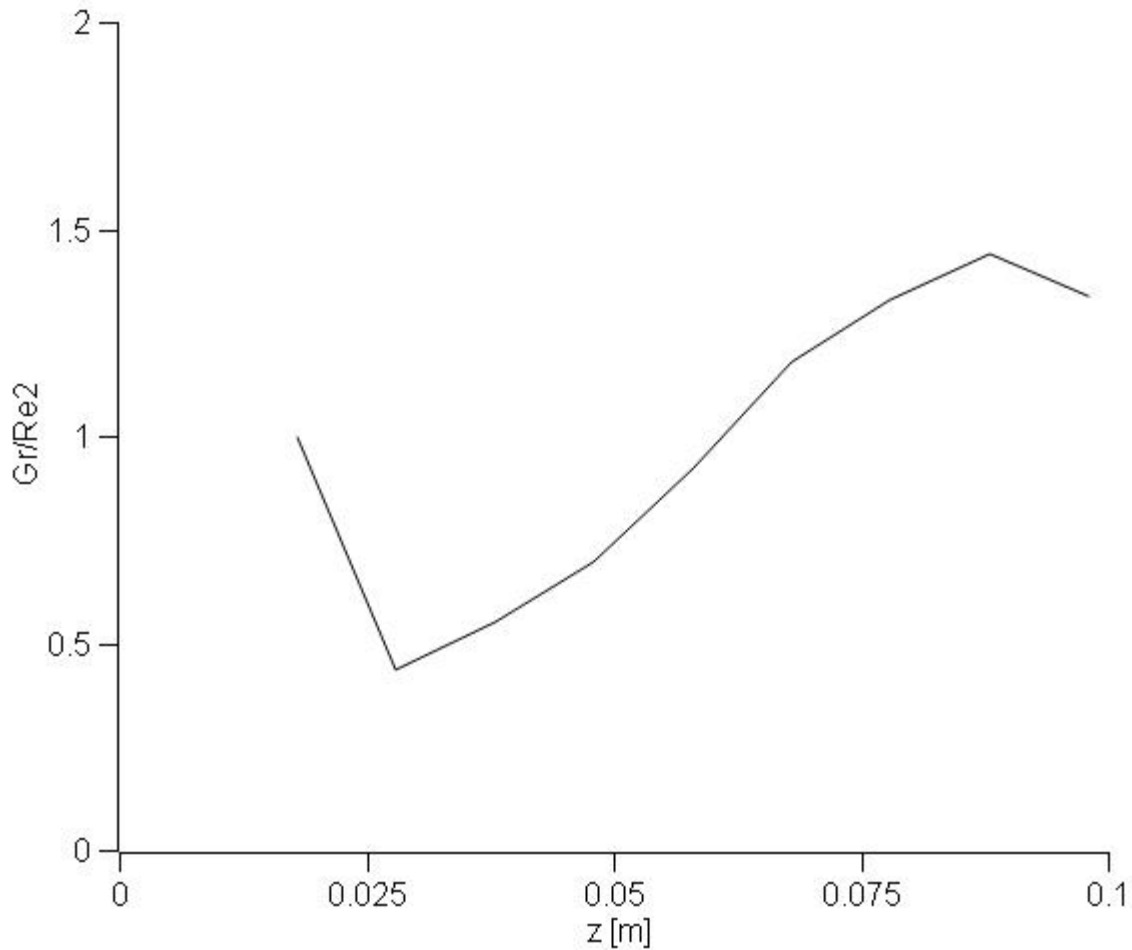


Figura 5.9 Evolución del cociente Gr/Re^2 en la orilla del quemador.

Para estudiar el comportamiento en la llama que generan los aspectos geométricos, características del flujo y parámetros del modelo, se cambian algunos de éstos. Estas variaciones fueron presentadas anteriormente en la Tabla 4.2.

5.3 Variaciones en la geometría

5.3.1 Tamaño de portas

Para estudiar el efecto que presenta la llama en el proceso de combustión se realiza una variación en la longitud de la porta chica, mientras que la separación entre portas, características del modelo y parámetros del flujo se mantienen sin modificación (respecto al caso base).

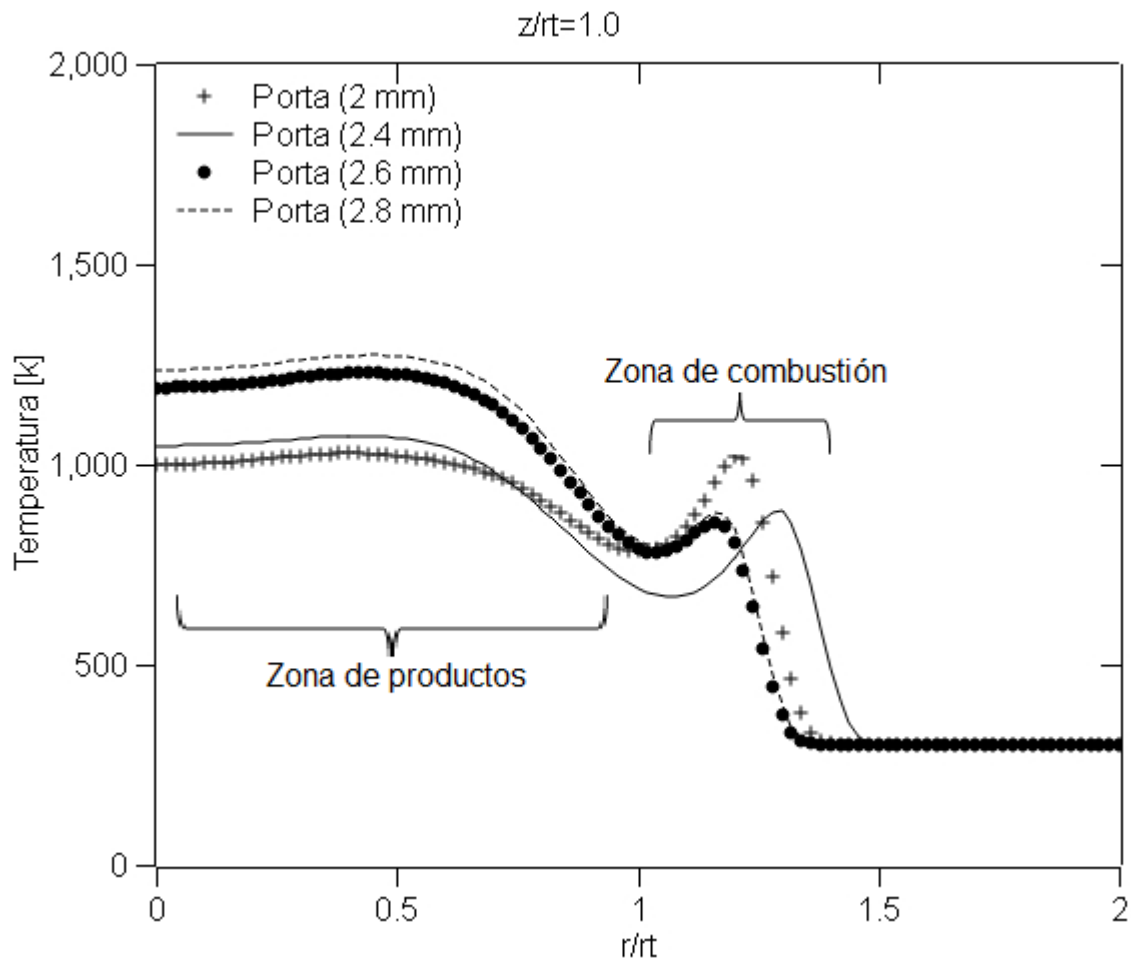


Figura 5.10 Perfil radial de temperatura para distintos tamaños de portas.

En la Figura 5.10 la temperatura promedio para una altura $z/r_i=1.0$, se observa que mientras más pequeña es la porta la temperatura en el centro del quemador ($r/r_i=0.0$) es más baja, pero aumenta justo en el límite de la zona de combustión ($r/r_i=1.25$), ésto debido a que mientras aumenta el tamaño de porta la velocidad en cada una de ellas disminuye (Figura 5.11); por lo que la llama para la porta de 2.2 mm presenta mayor longitud y tiene la mayor temperatura. En ambas gráficas, se observa que la zona de combustión es desplazada, debido a una disminución en el arrastre de aire de cada caso; para la porta de 2.2 mm el arrastre de aire aumenta un 5%, para la de 2.6 mm disminuye un 2% y finalmente para la de 2.8 mm disminuye 7%.

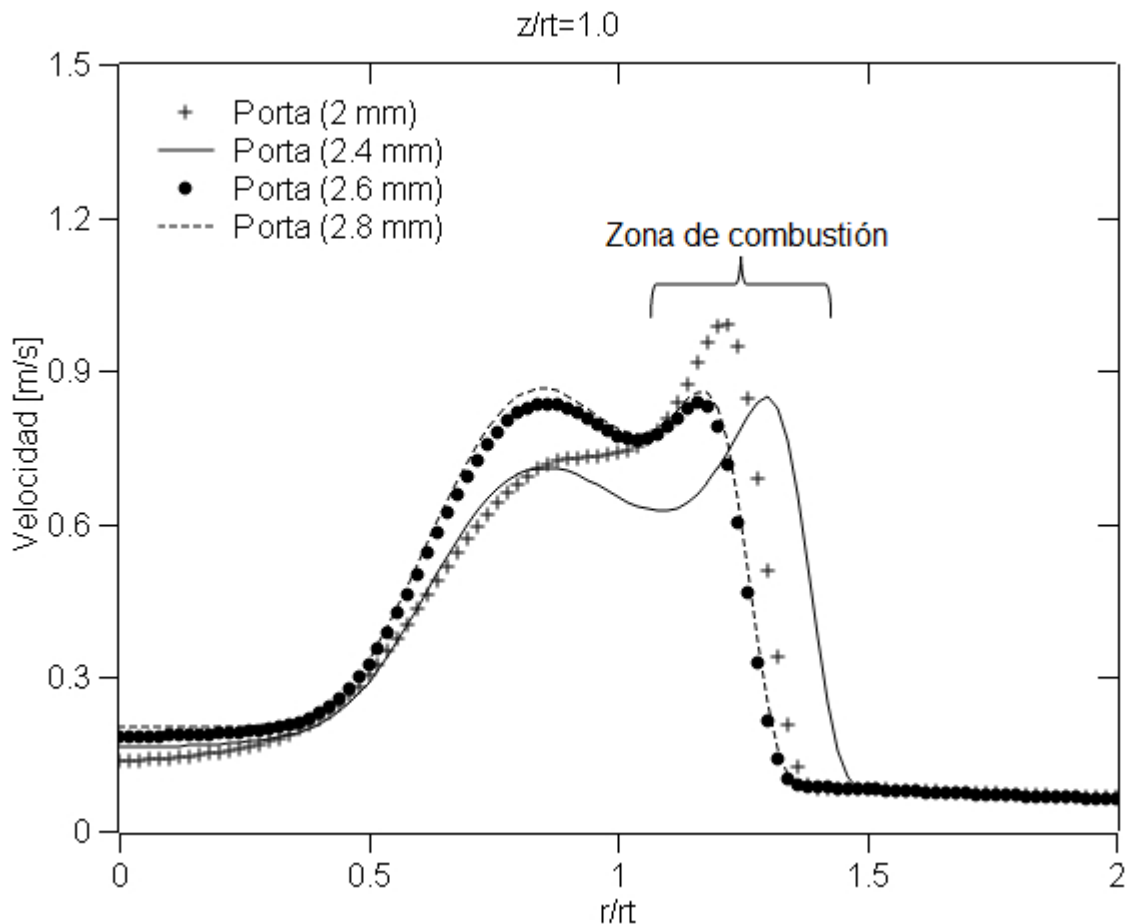


Figura 5.11 Perfil radial de velocidad para distintos tamaños de portas.

5.3.2 Separación entre portas

El cambio radial de temperatura promedio que ocasiona el efecto de la separación entre portas para una posición $z/r_t = 1.0$ se muestra en la Figura 5.12. En esta figura se observa que conforme se va aumentando la separación entre portas la temperatura en el centro del quemador (zona de productos) va disminuyendo porque hay más ingreso del aire circundante que entra por la zona entre portas. Adicionalmente, al aumentar la separación entre portas, se incrementa el flujo en la salida de estas (Figura 5.13), lo que hace que alcance más longitud la zona de combustión.

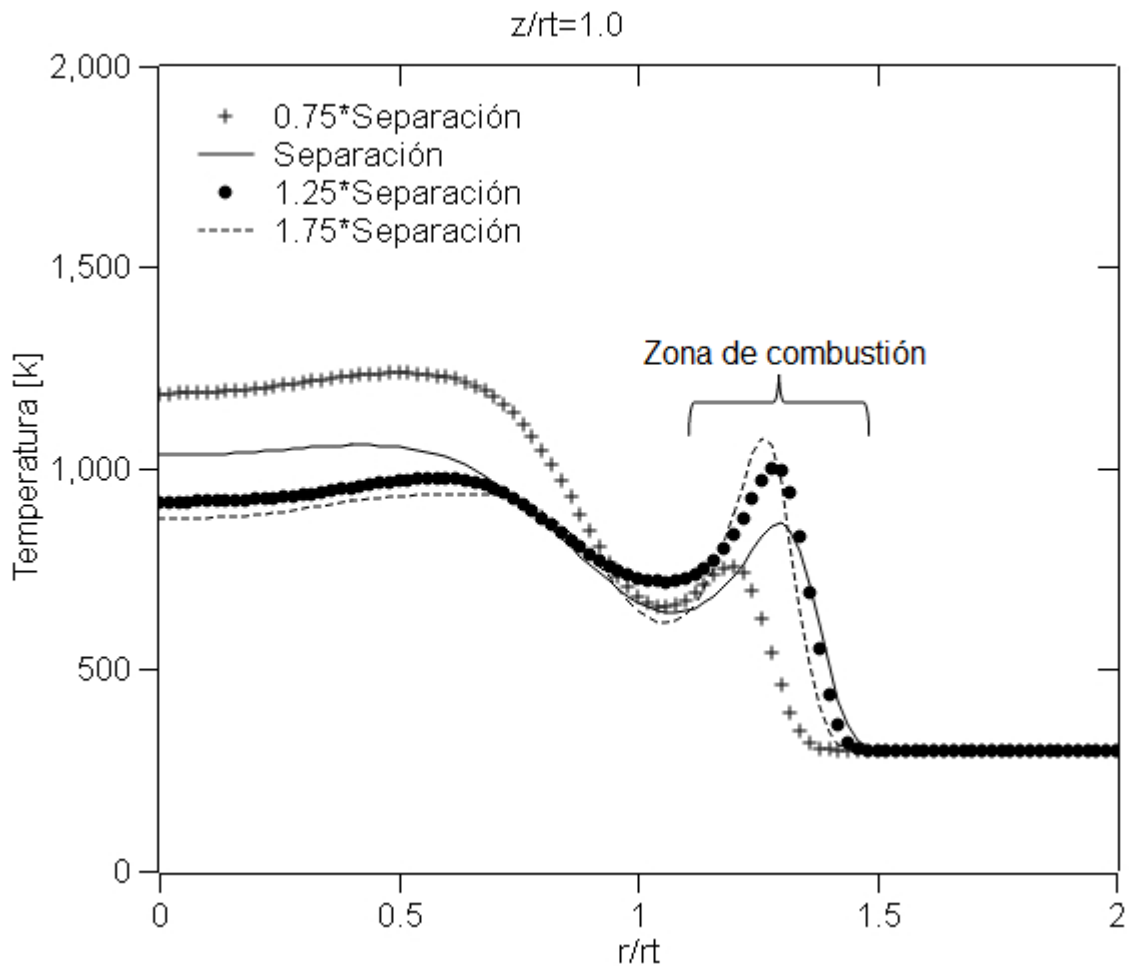


Figura 5.12 Perfil radial de temperatura para distintas separaciones entre portas.

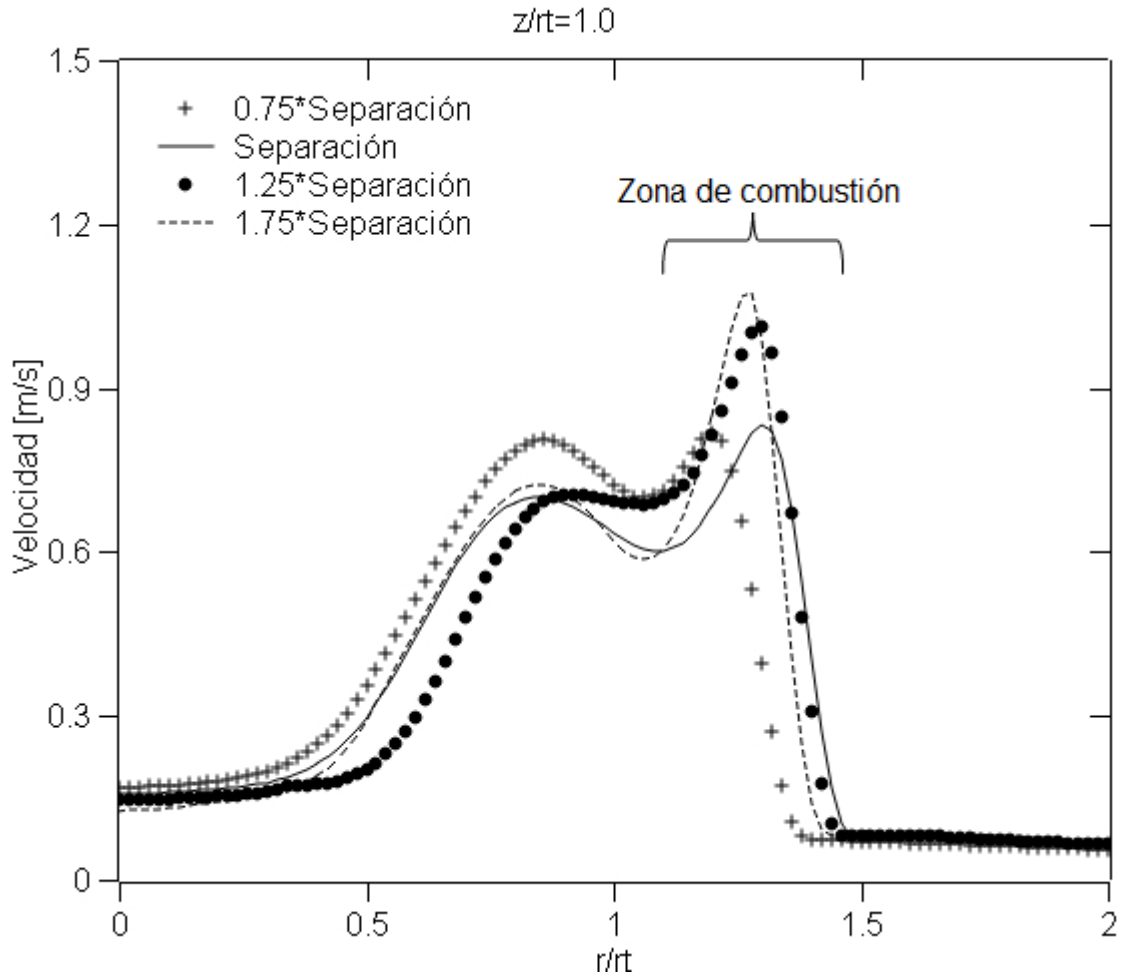


Figura 5.13 Perfil radial de velocidad para distintas separaciones entre portas.

En ambas graficas se observa como en la zona de combustión ocurre un movimiento radial, debido al aumento de arrastre de aire; para la separación de 0.75 se tiene una disminución del 42%, para la separación de 1.75 aumenta 60%, todas con respecto al caso base.

5.4 Características del fluido/flujo

5.4.1 Velocidad

A continuación, se estudia el efecto que causa en la temperatura un aumento de la velocidad de la mezcla aire-combustible en la entrada del quemador (Figura 5.14).

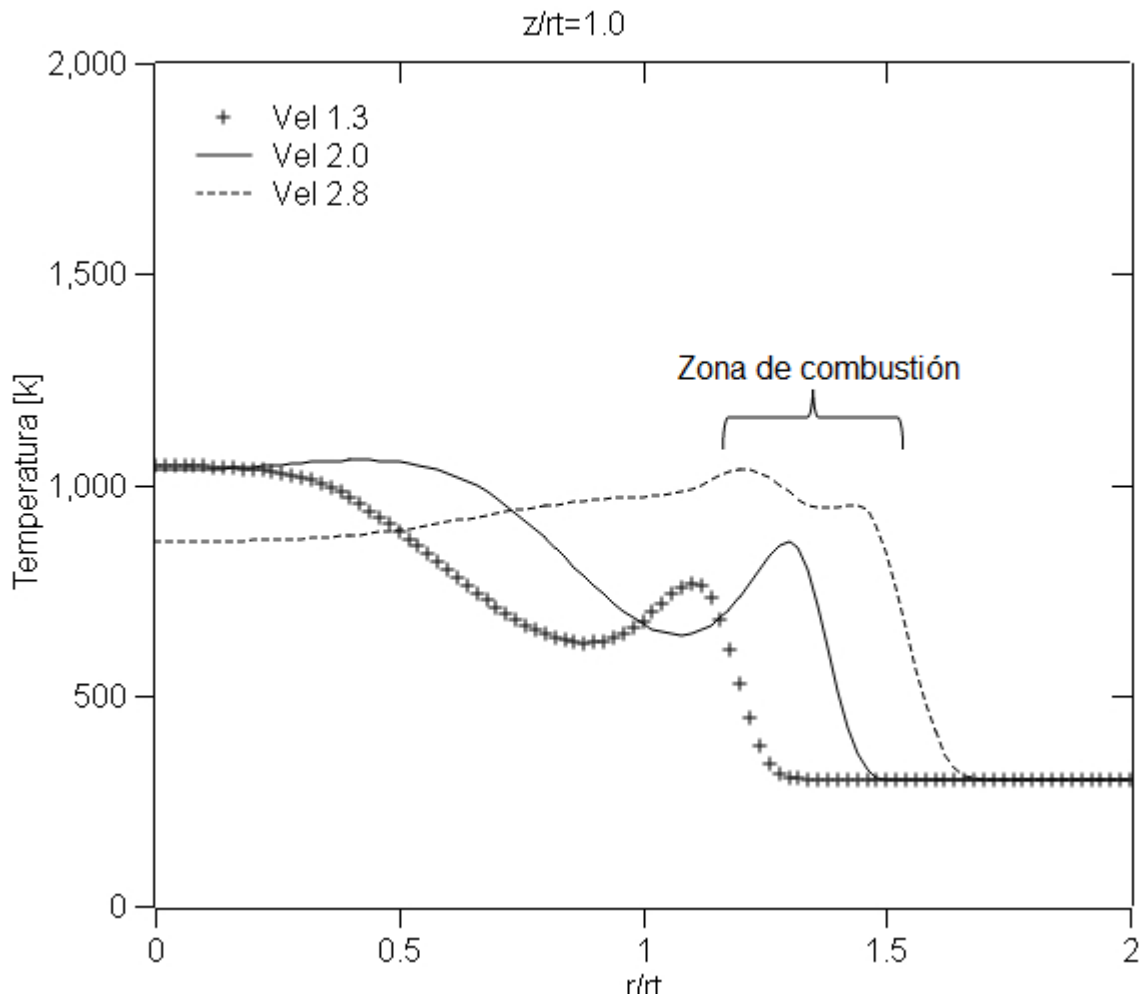


Figura 5.14 Perfil radial de temperatura para distintas velocidades de entrada de la mezcla.

En la Figura 5.14 se observa como la variación de la velocidad de entrada hace que la zona de combustión varíe radialmente desde $r/r_i = 1.2$ hasta $r/r_i = 1.7$; ya que cuando el flujo lleva una mayor velocidad, la zona de combustión alcanza una mayor altura, generando más arrastre de aire circundante (Figura 5.15); para la

velocidad de 1.8 m/s disminuye 19 % y para la velocidad de 2.8 m/s lo aumenta en 60%. Por otro lado, en el centro de la tapa ($r/r_i=0.0$), el tamaño de la zona de recirculación disminuye con la velocidad; cuando se disminuye la velocidad de 2.8 a 1.3 m/s la zona de productos se reduce en 38.5%. Adicionalmente, para una velocidad de 2.8 m/s se alcanza solamente una temperatura de 900 K mientras que para la de 1.3 m/s la temperatura aumenta hasta 1070 K; ésto debido a que con una mayor velocidad en la mezcla aire-combustible, la velocidad de los gases calientes también aumenta y genera un mayor arrastre de aire circundante.

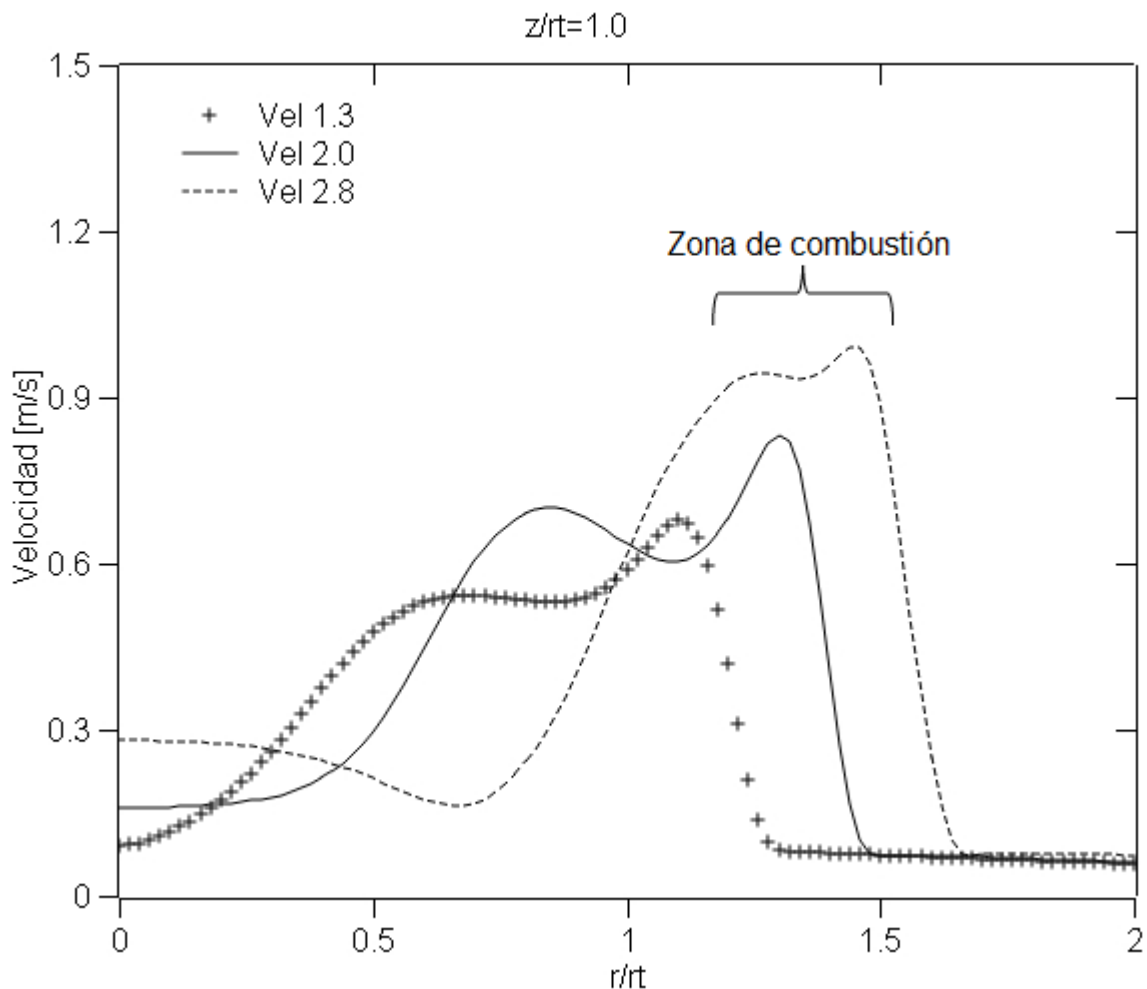


Figura 5.15 Perfil radial de velocidad para distintas velocidades de entrada de la mezcla.

5.4.2 Combustible

En esta parte se compara la temperatura y velocidad para los combustibles metano y propano (caso base), ya que son los más utilizados para este tipo de estufas domésticas. La Figura 5.16 muestra el perfil radial de temperatura para una altura $z/r_i = 1.0$, en donde se observa como la temperatura del propano supera levemente a la del metano esto debido a sus propiedades físicas, ya que el metano tiene una menor densidad (0.66 kg/m^3), por lo que entra un mayor flujo másico de propano. Lo mismo sucede para la velocidad radial (Figura 5.17) en donde el propano supera ligeramente a la velocidad del metano, siguiendo el mismo patrón radialmente.

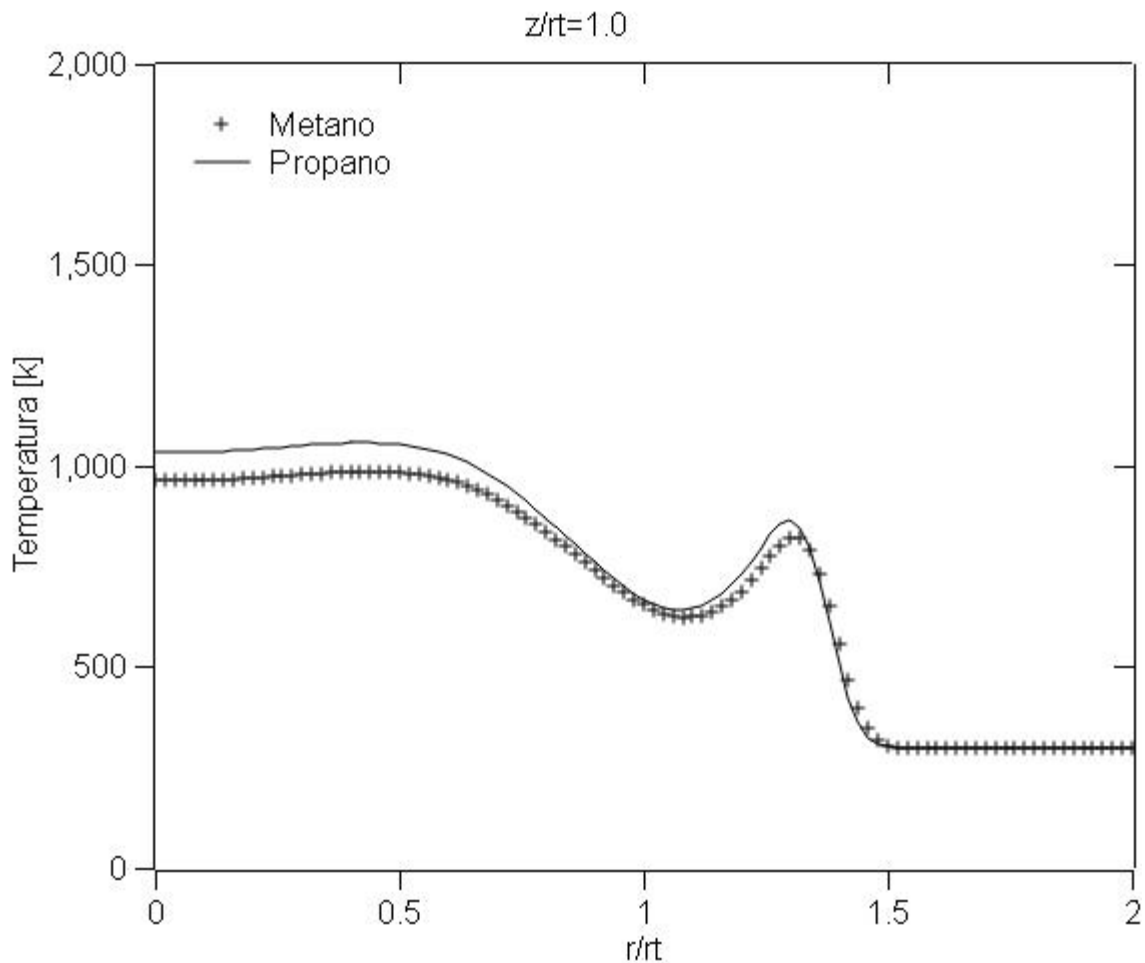


Figura 5.16 Perfil radial de temperatura con diferentes combustibles.

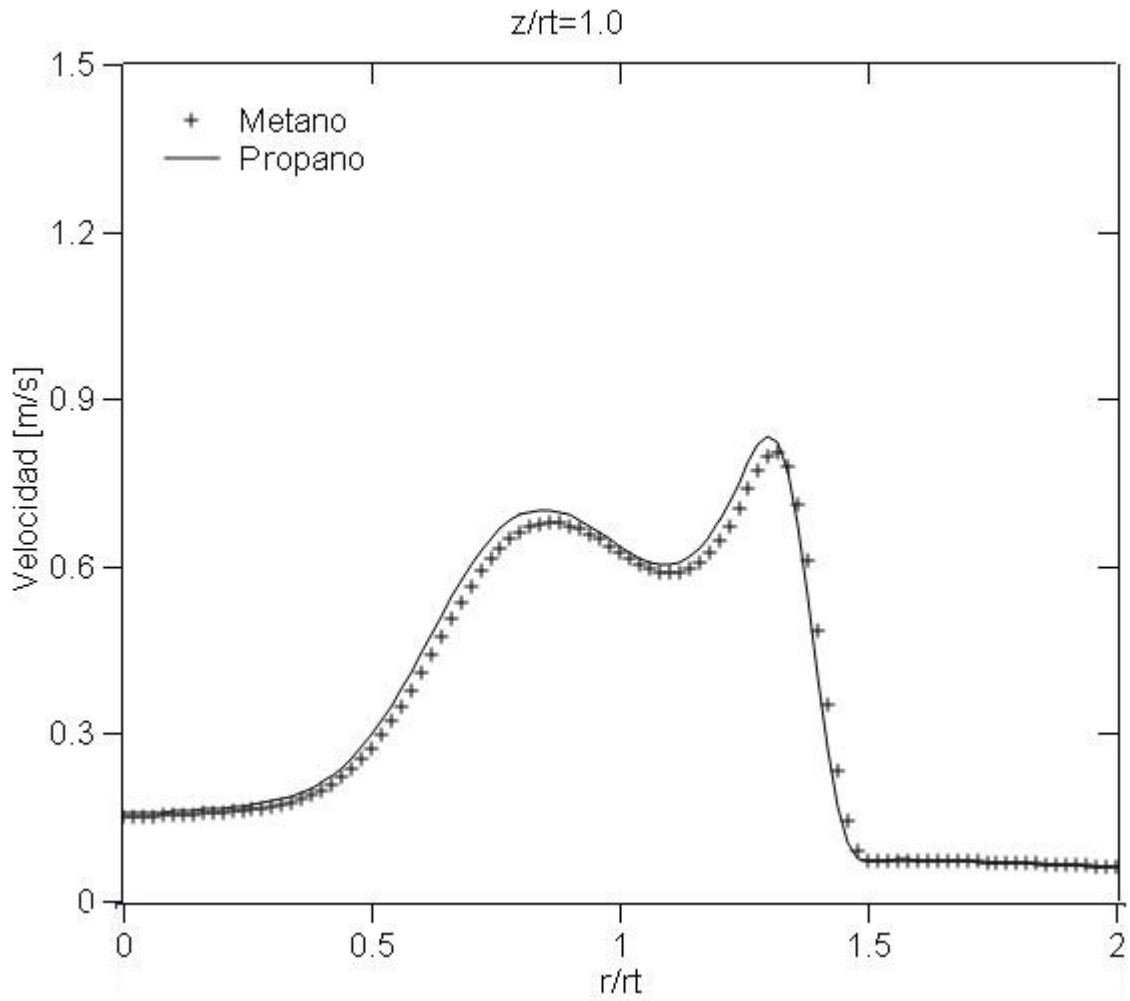


Figura 5.17 Perfil radial de velocidad con diferentes combustibles.

5.4.3 Exceso de aire

El efecto en la temperatura para distintos excesos de aire en el flujo de entrada al quemador es mostrado en la Figura 5.18. Para una mezcla estequiométrica (0% exceso de aire) se alcanza hasta una temperatura de 1900 K en la posición $r/r_i = 1.8$; en la zona de combustión se produce una alteración por el efecto de flotación, ya que este incremento en la temperatura produce una menor densidad.

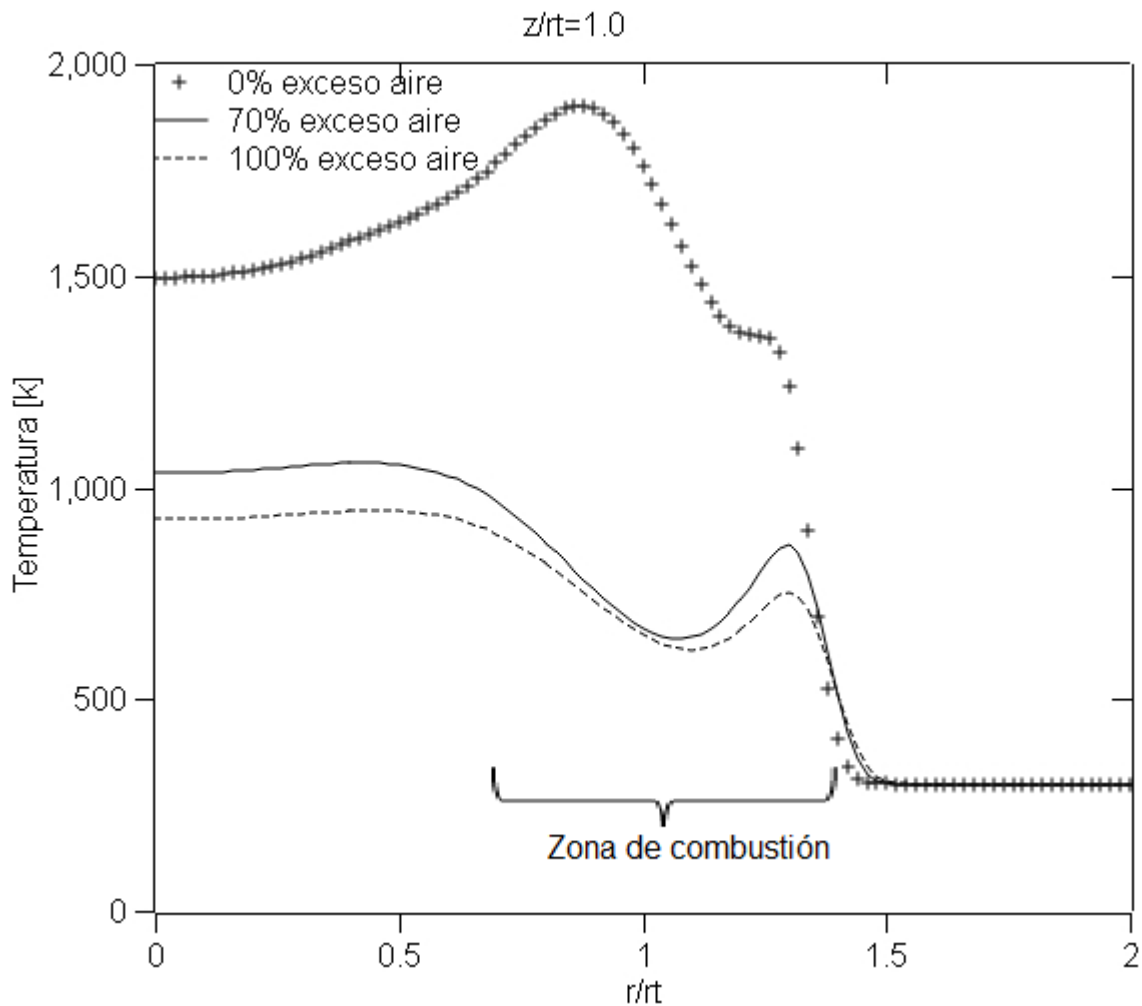


Figura 5.18 Perfil radial de temperatura para diferentes excesos de aire.

La variación de la velocidad para distintos excesos de aire es ilustrada en la Figura 5.19; se observa como la velocidad disminuye con el aumento de exceso de aire a

lo largo del quemador. Esto ocurre porque los productos al presentar una mayor temperatura generan un mayor efecto en la flotación y de arrastre de aire circundante; para un exceso de 100% lo disminuye 3% y para el caso estequiométrico lo aumenta 13%.

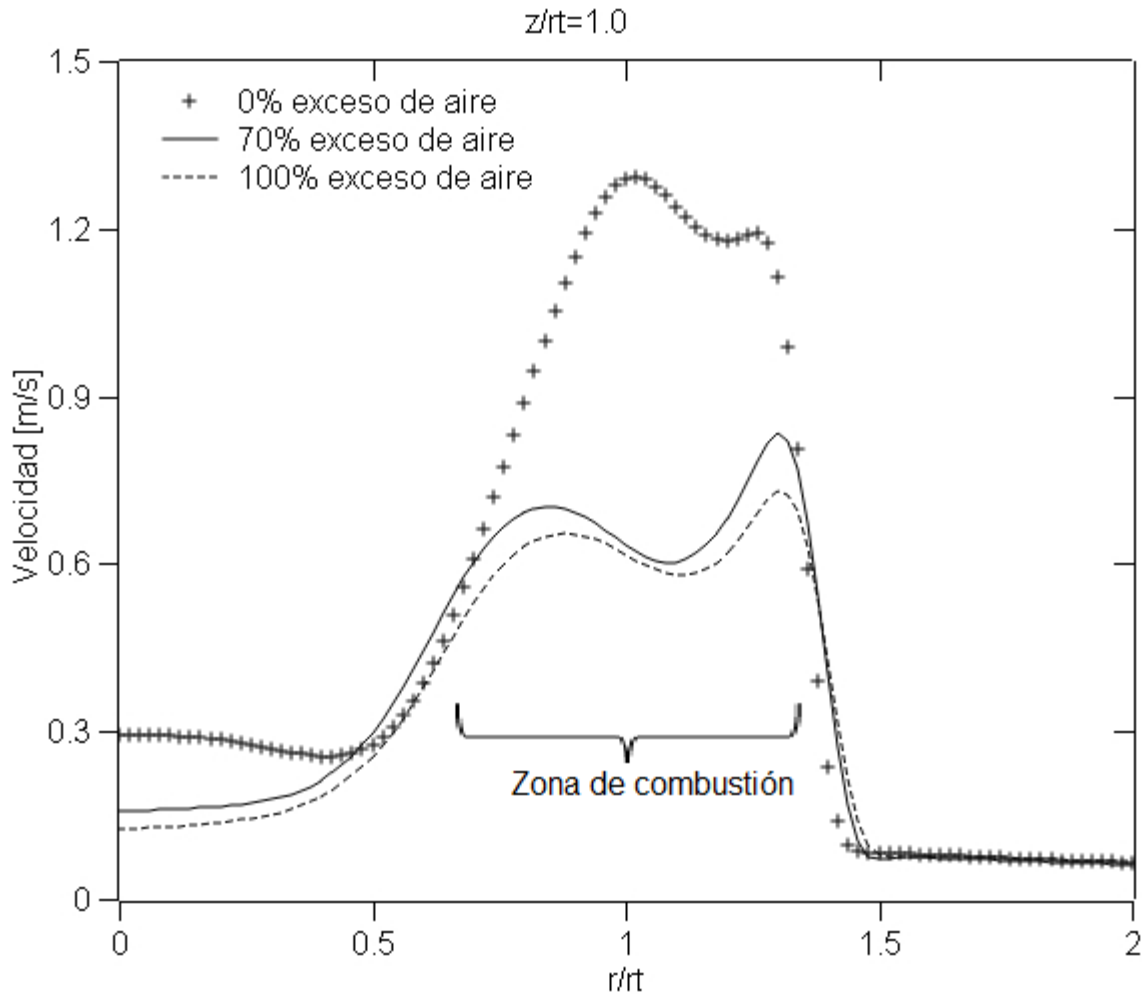


Figura 5.19 Perfil radial de velocidad para distintos excesos de aire.

5.5 Parámetros del modelo

5.5.1 Radiación

En el capítulo 3 se introdujo un modelo de radiación por pérdidas de calor. El efecto que se presenta cuando se añade en el modelo numérico es que la temperatura disminuye debido a que una parte del calor generado por la combustión se ha perdido, siendo más notorio en el centro del quemador, ya que es donde se tiene la más alta temperatura. Lo anterior se muestra en la Figura 5.20. Cabe aclarar, que la disminución en el valor de la temperatura es de solamente el 4.76%, ya que el transferencia de calor es de manera importante para temperaturas superiores a 1550K [20].

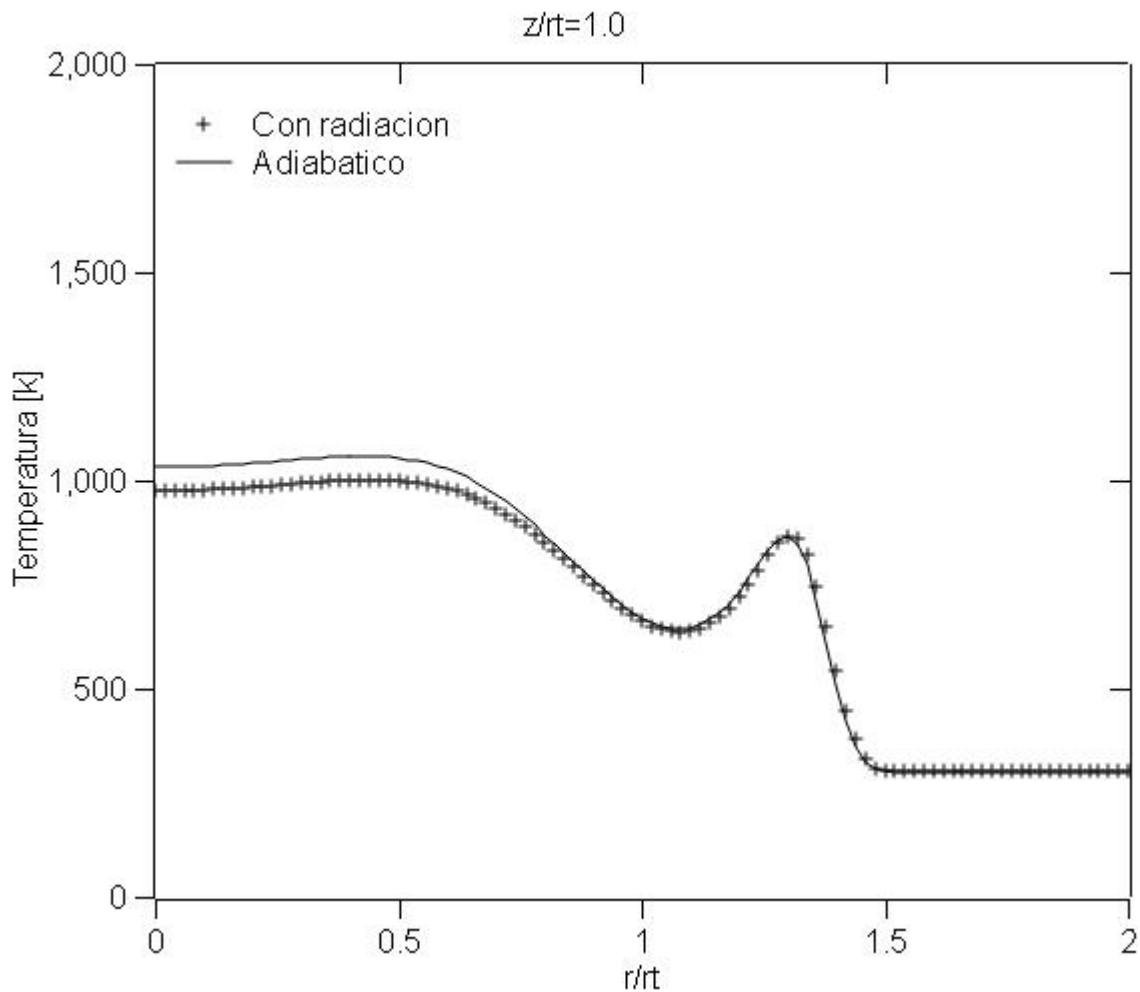


Figura 5.20 Perfil radial de temperatura con modelo de radiación.

En la Figura 5.21 se muestra el efecto que causa un modelo de radiación al ser incluido en la simulación sobre la velocidad radial. De la Figura 5.21 se observa muy poco efecto en la velocidad, ya que la temperatura se modifica muy poco, cuando es incluido el modelo de radiación, y por la tanto, también la densidad.

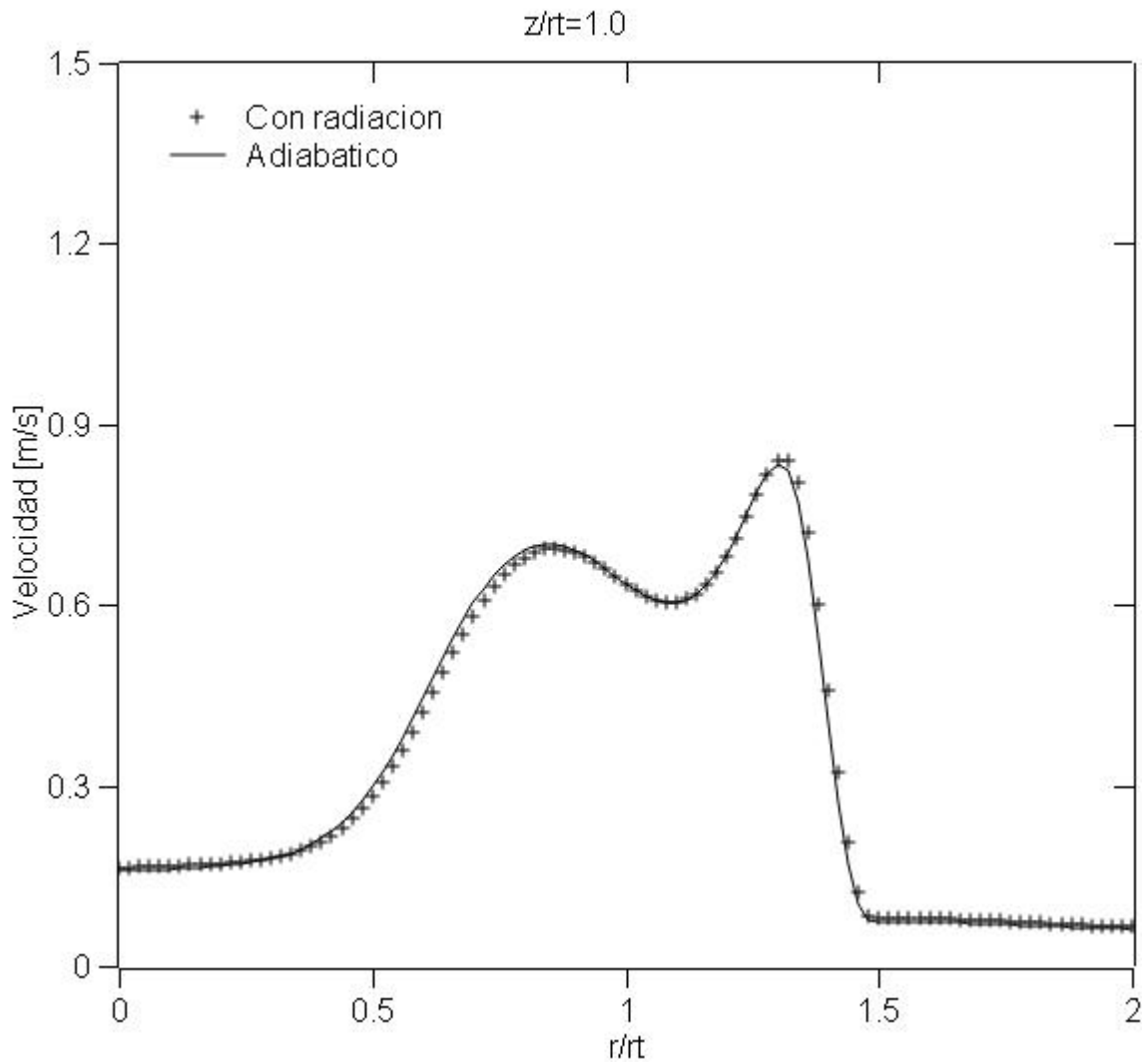


Figura 5.21 Perfil radial de velocidad con modelo de radiación.

5.5.2 Modelos químicos

Para estudiar el efecto del modelo de combustión en las predicciones, se compara el modelo EBU (caso base) con un modelo de Arrhenius, también de 1 paso de reacción propuesto por Westbrook y Dryer [14] (presentado en el capítulo 2.11.1). En la Figura 5.22 se comparan los perfiles de temperatura del caso base (EBU) con el modelo de reacción tipo Arrhenius, donde se observa un aumento de la temperatura para un radio de $r/r_i = 1.1$ para el caso de Arrhenius debido a que este modelo presenta una mayor velocidad de reacción, por lo que consume muy rápido el combustible.

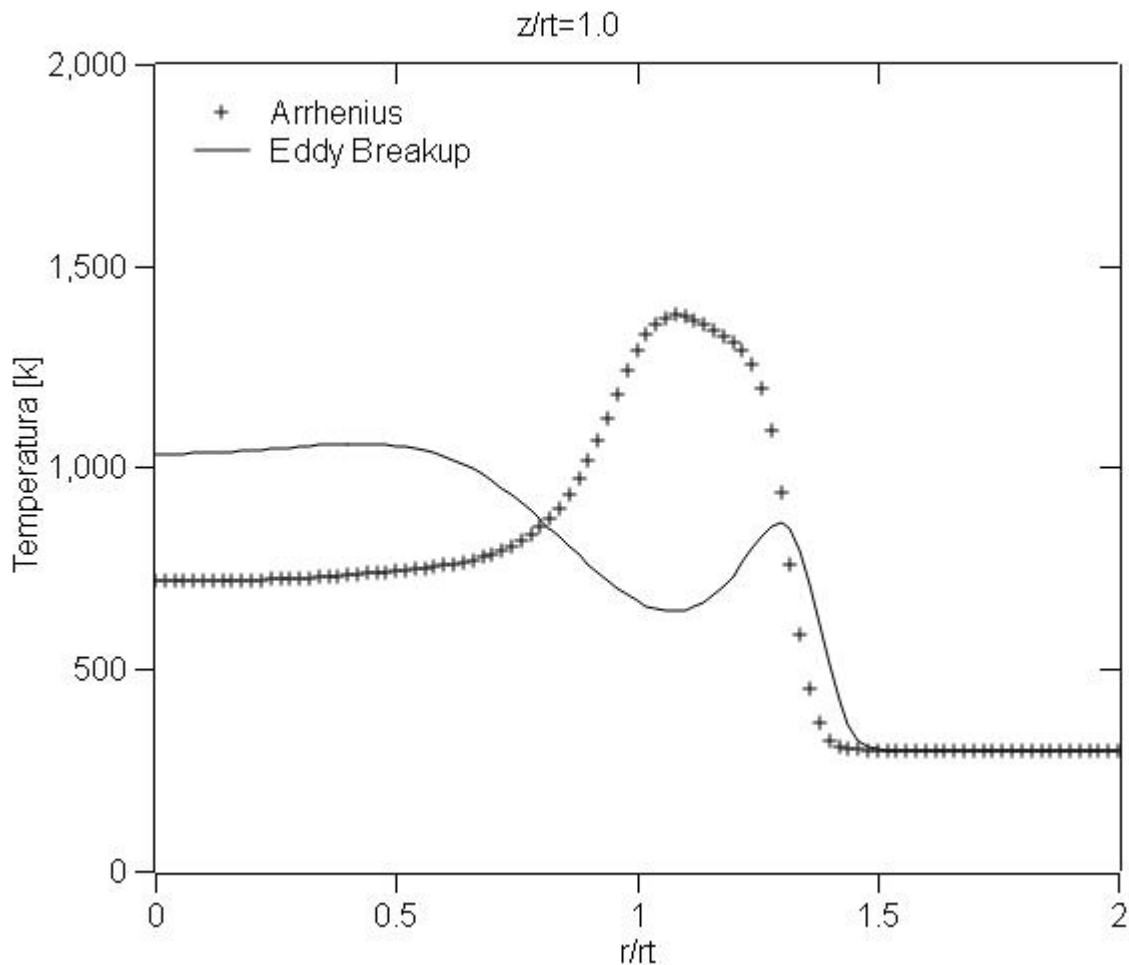


Figura 5.22 Perfiles radiales de temperatura con 2 modelos de combustión: modelo EBU y tipo Arrhenius.

En la Figura 5.23 para el caso de Arrhenius se observa que la velocidad aumenta en el radio $r/r_i=1.3$, debido a que en esa zona hay un mayor nivel de reacción por lo tanto un aumento de velocidad por el efecto de flotación. No se puede establecer qué modelo representa adecuadamente el fenómeno, ya que se requieren datos experimentales más detallados con métodos no intrusivos.

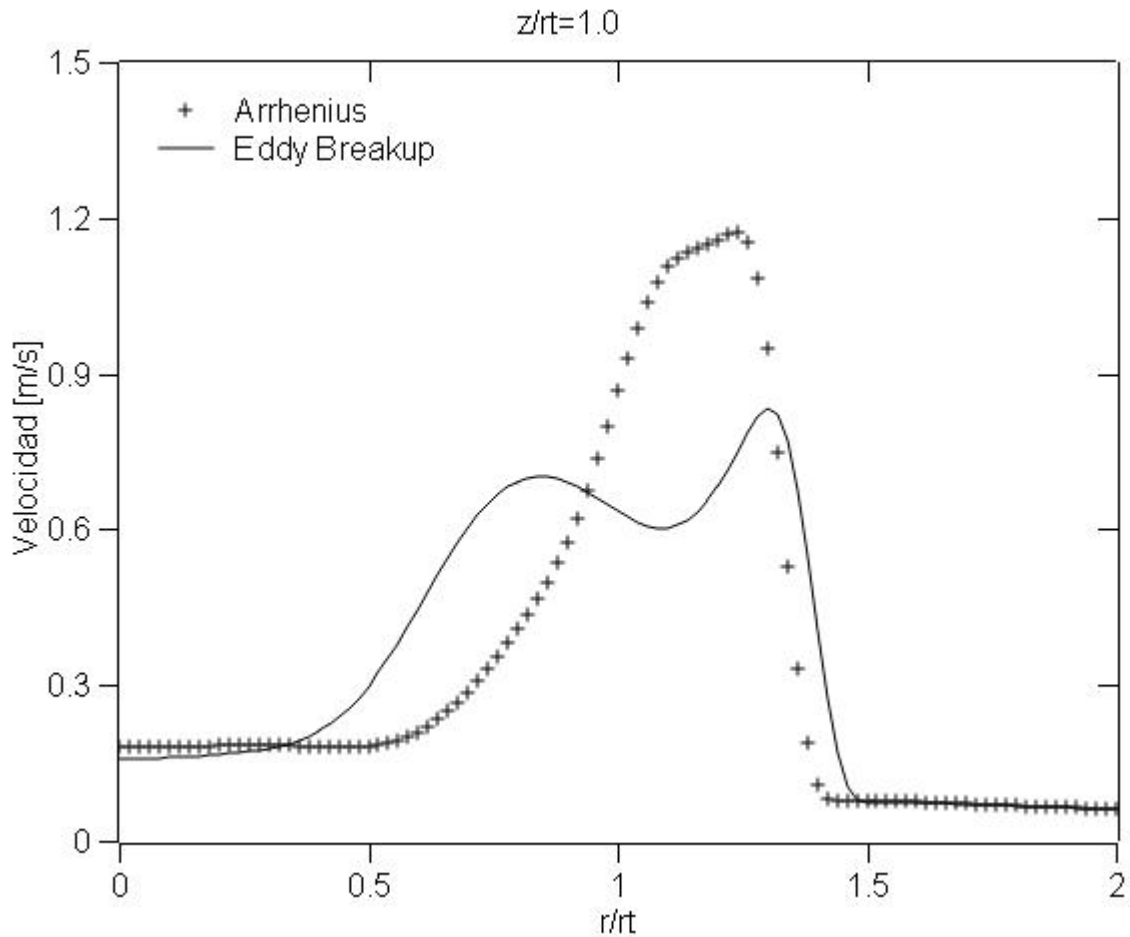


Figura 5.23 Perfiles radiales de velocidad con 2 modelos de combustión: modelo EBU y tipo Arrhenius.

5.5.3 Número de pasos

A continuación se comparan los resultados del caso base (1 paso de reacción) con el uso en la simulación de un modelo de 2 pasos de reacción. La Figura 5.24 muestra la temperatura promedio para estos dos modelos; se observa como la zona de combustión para el caso de 2 pasos se mueve aproximadamente desde 1.4 a 1.6 radialmente, debido a que en este sus 2 reacciones son más lentas que la de 1 paso de reacción, por lo que el combustible en el 2 pasos se quema un poco después originando que la zona de combustión se extienda radial y axialmente, como consecuencia de esto la temperatura es mayor para esa altura.

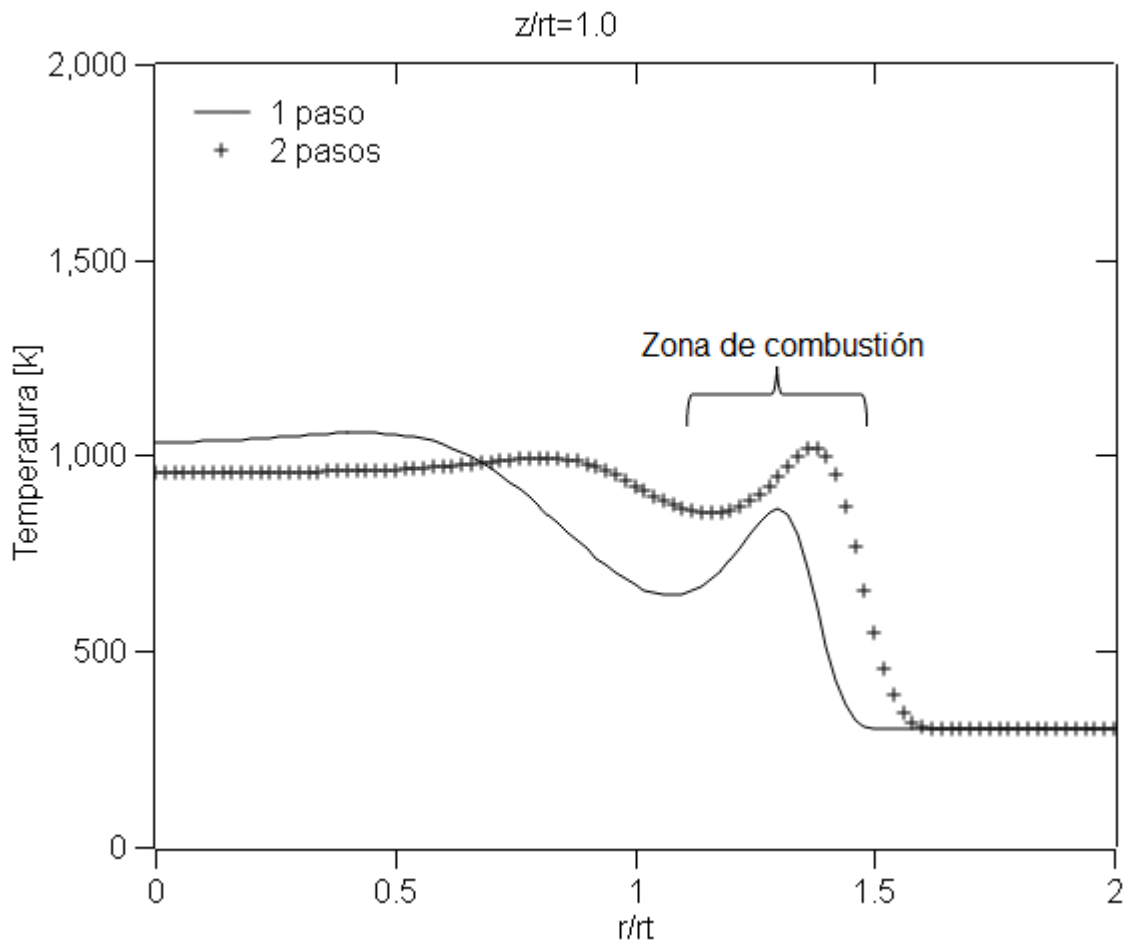


Figura 5.24 Perfil radial de temperatura para distintos pasos de reacción.

Los perfiles radiales de velocidad son mostrados en la Figura 5.25 para el estudio de este efecto, donde se observa de igual manera como la zona de gases calientes se amplia para el caso de 2 pasos de reacción. También, en la zona superior de la tapa, la velocidad es aproximadamente 0.1 m/s menor a la del caso base, debido a que en esta zona la temperatura es menor, generando mayor recirculación.

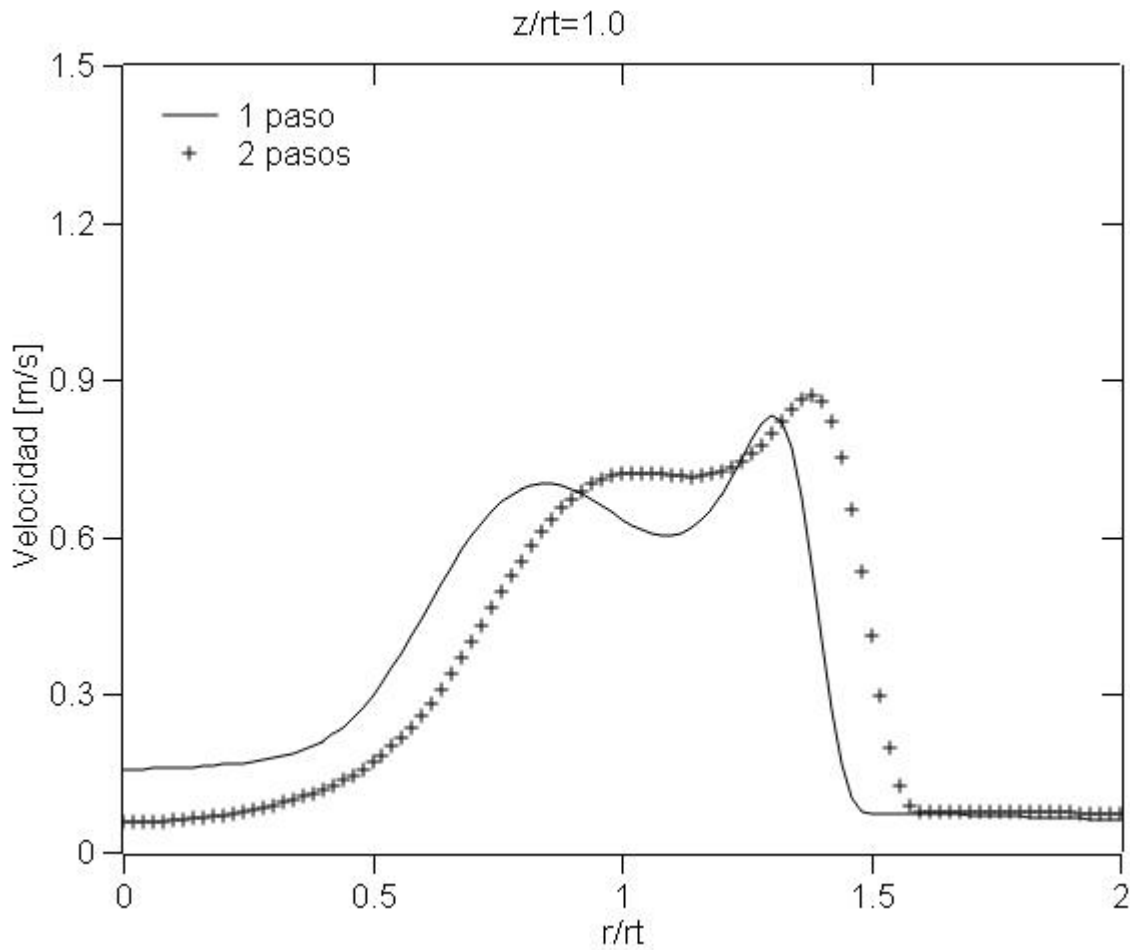


Figura 5.25 Perfil radial de velocidad para distintos pasos de reacción.

En ambas graficas se observa como en la zona de combustión ocurre un desplazamiento radial, debido al aumento de arrastre de aire para el de 2 pasos de reacción, éste aumento un 23% con respecto al de 1 paso de reacción.

5.5.4 Constantes EBU

A continuación se realizan modificaciones a los parámetros del modelo Eddy Break Up (EBU), en la Figura 5.26 se muestran los perfiles radiales para diferentes constantes del modelo EBU. El efecto de ésta en el modelo es hacer que aumente la velocidad de reacción del combustible. Conforme disminuye la constante se observa como el radio de la zona de gases calientes aumenta debido a que el combustible tarda más tiempo en consumirse y tendiendo a expandirse más radialmente.

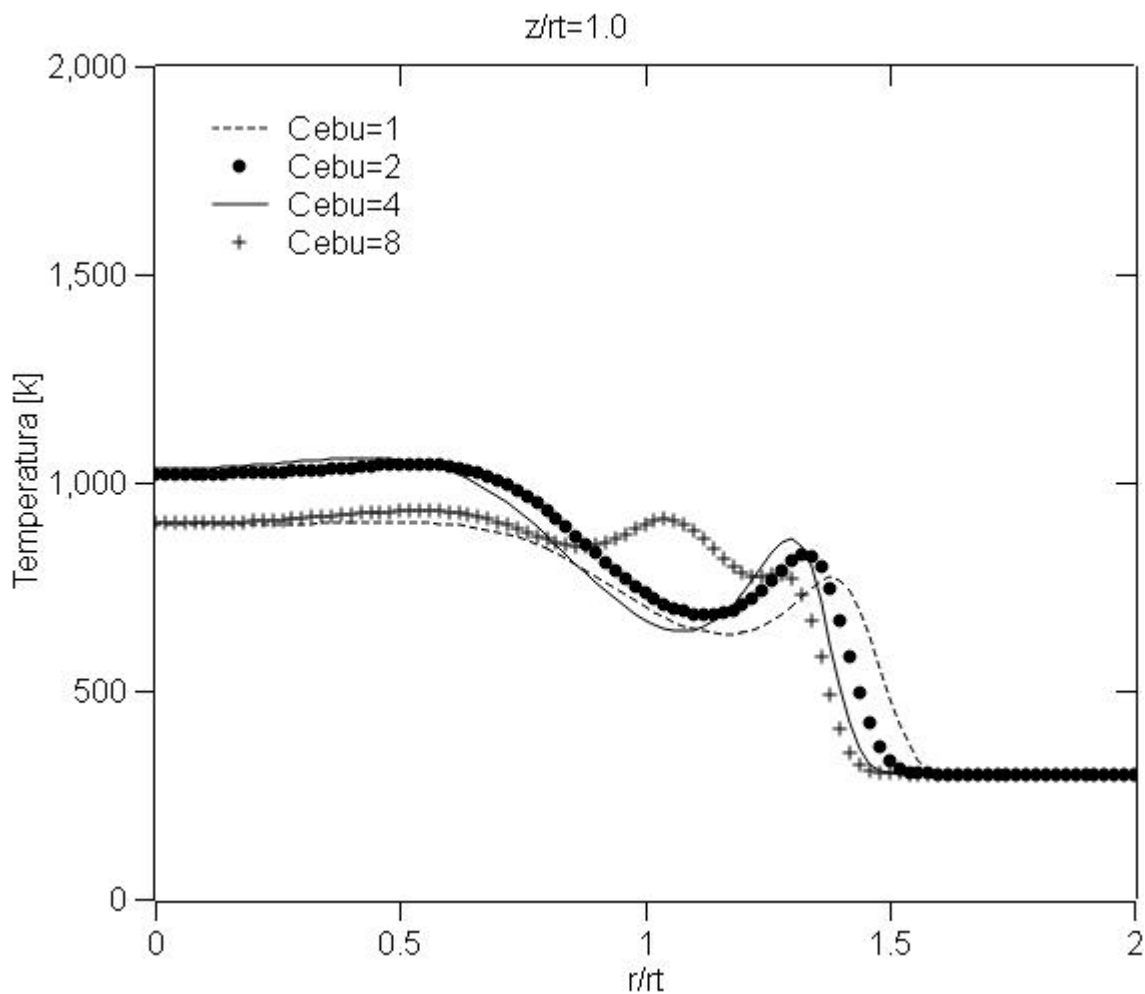


Figura 5.26 Perfil radial de temperatura para distintas constantes EBU.

En la Figura 5.27 se observa como la velocidad se eleva con el aumento en el valor de la constante EBU en el límite de la zona de los gases calientes para cada caso (entre $r/r_i=1.4 - 1.6$), debido a que presentan también un aumento en su temperatura y arrastran más aire circúndate por lo que aumenta su velocidad.

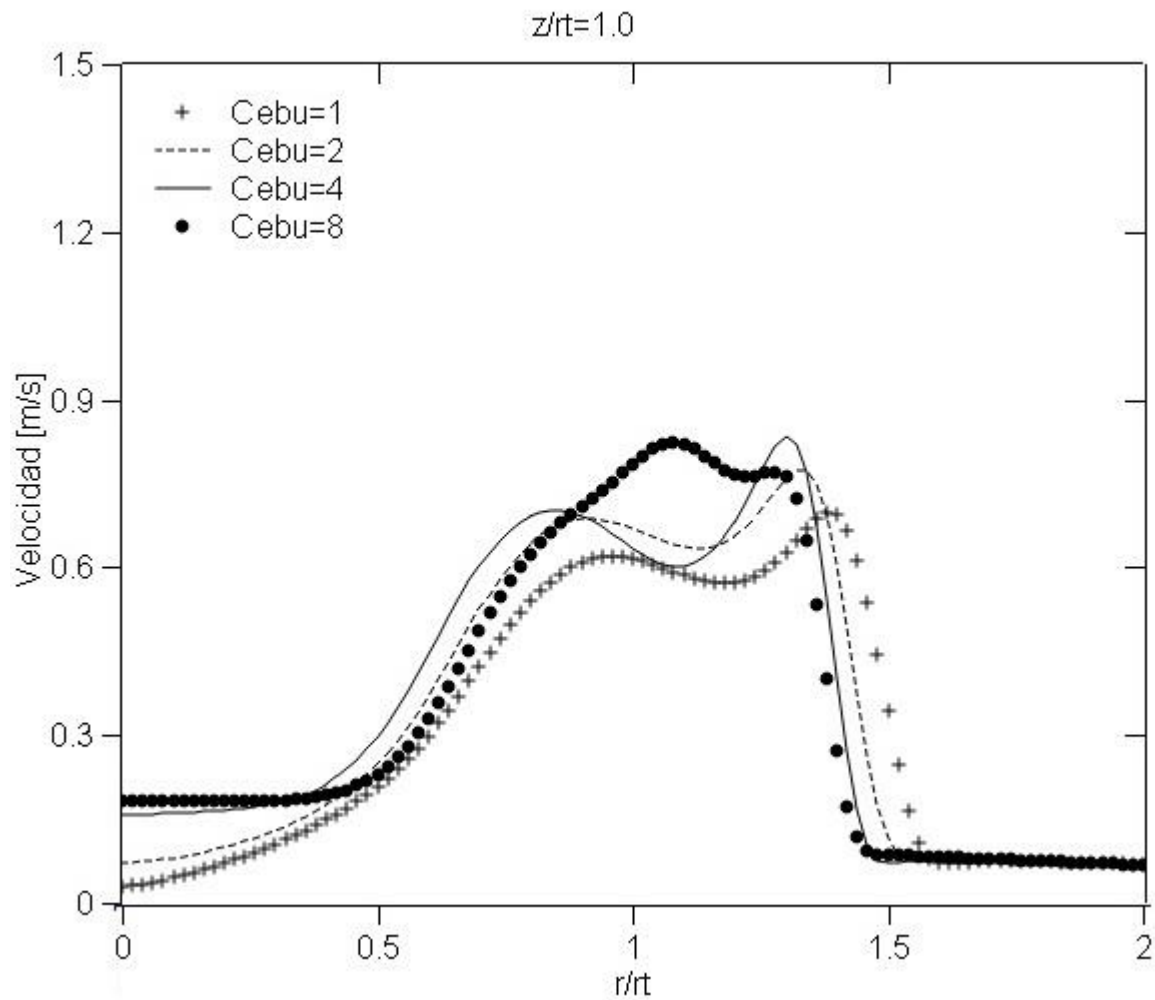


Figura 5.27 Perfil radial de velocidad para distintas constantes EBU.

Enseguida la Figura 5.28 y Figura 5.29 comparan el efecto de la temperatura y velocidad para el uso del parámetro $\left(\frac{\tilde{Y}_P}{1+S}\right)$, en ambas gráficas se observa que la variación es mínima y siguen exactamente el mismo patrón.

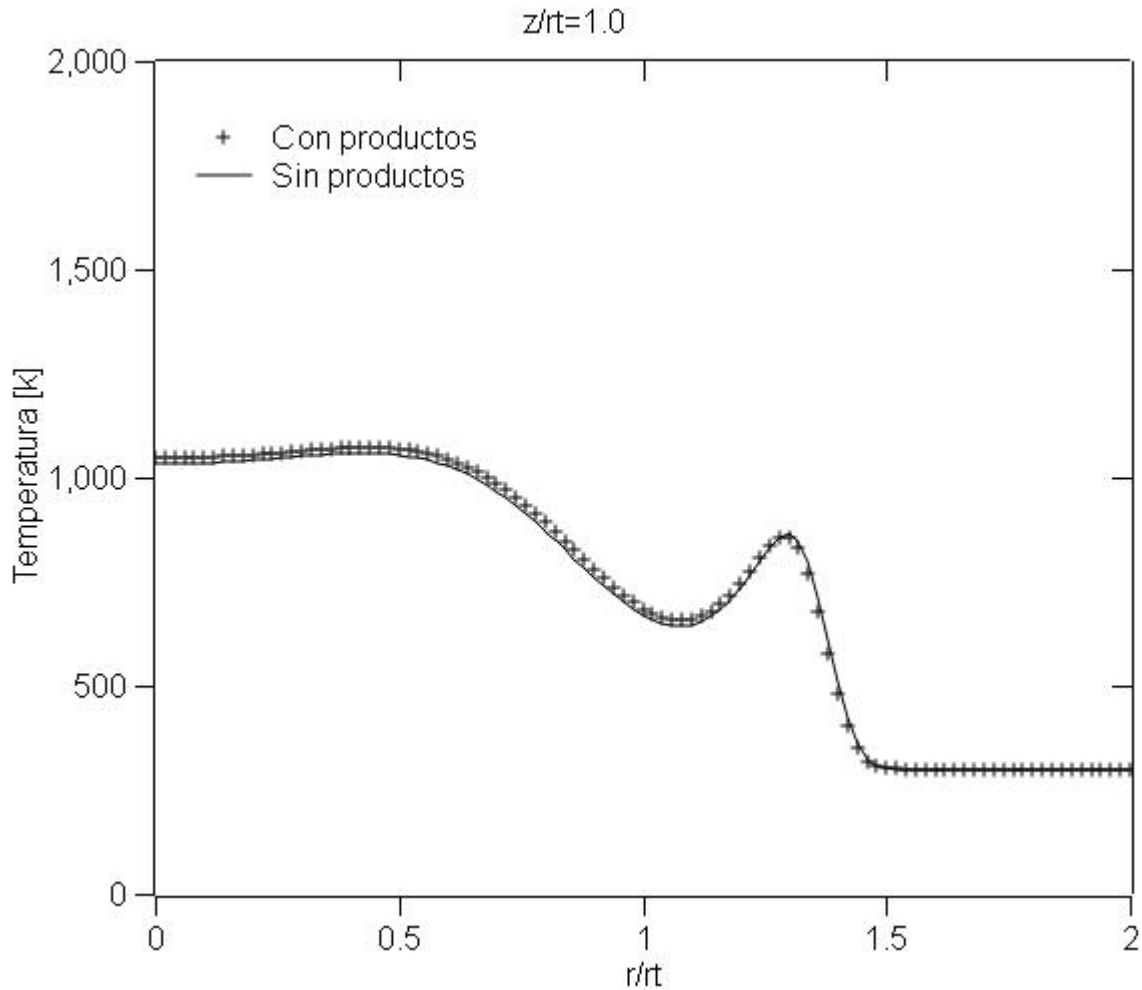


Figura 5.28 Perfil radial de temperatura para el uso del parámetro de los productos EBU.

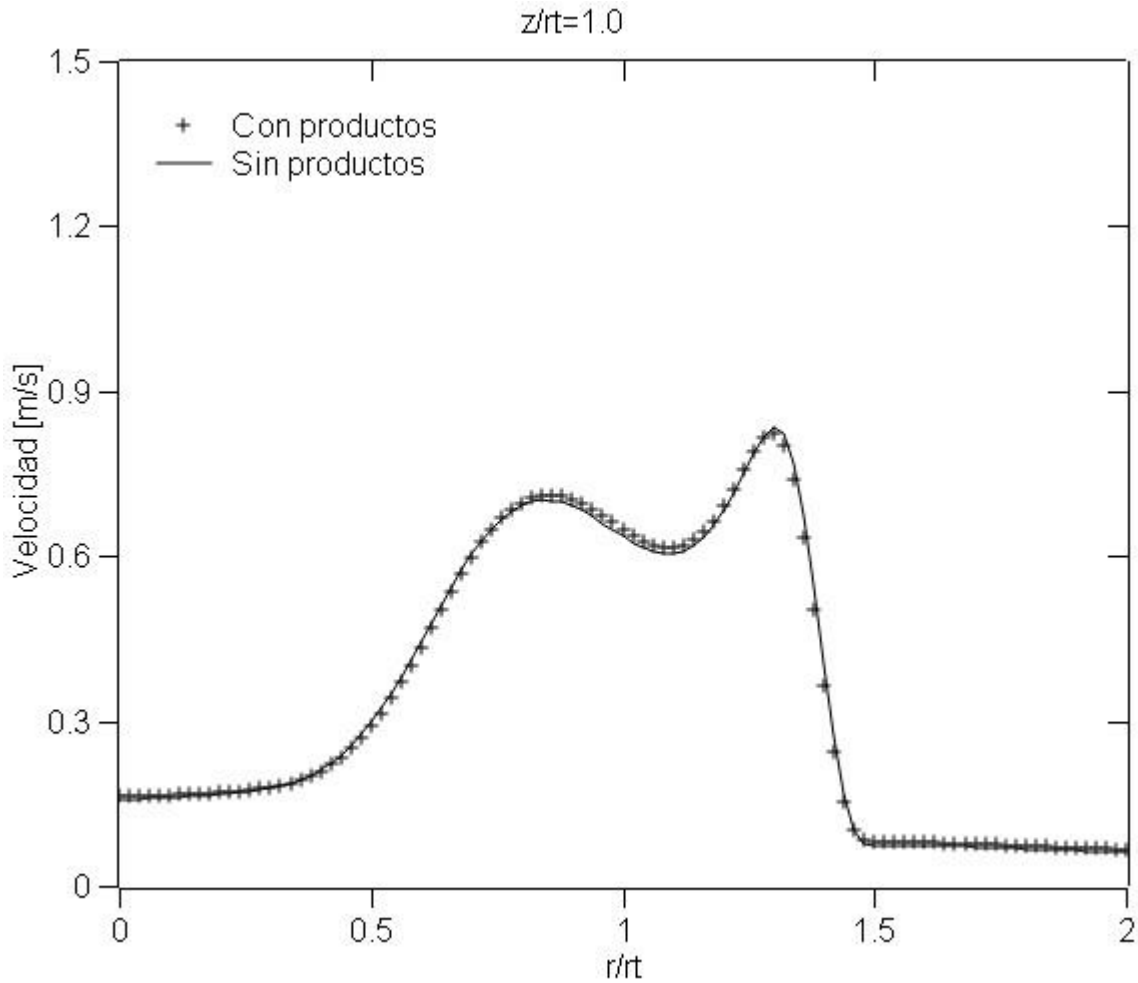


Figura 5.29 Perfil radial de velocidad para el uso del parámetro de los productos EBU.

5.6 Transferencia de calor

A continuación se presentan los resultados de la transferencia de calor obtenida para los diferentes casos estudiados.

En las Tabla 5.1 y Tabla 5.2 se presentan los valores de la transferencia de calor y diferencia porcentual respecto al caso base (el cual presentó una transferencia de calor de 2900.25 W) para cada una de las configuraciones estudiadas. Para la variación de la longitud de la porta, se observa que la transferencia de calor disminuye hasta 2.8% para la de 2.2 mm y hasta 1.8% para la de 2.8 mm, debido a

que al agrandar la porta chica, su área comienza a igualarse a la de la porta grande y se pierde el efecto de una buena recirculación entre portas por lo que produce una mala combustión. Para la separación entre portas la transferencia de calor aumenta directamente hasta 23.72% y disminuye hasta 12.04%, ya que este efecto aumenta el flujo a la salida de las portas y también la transferencia de calor. Un aumento en la velocidad de la mezcla aumenta la transferencia de calor hasta 42.84% para la velocidad de 2.8 y la disminuye 37.17% para la velocidad de 1.3 m/s, ya que se tiene mayor flujo de combustible en el quemador. Para el efecto del uso del metano la transferencia de calor disminuye hasta 4.7%, debido a que presenta una menor densidad y esta repercute en el flujo másico de combustible. Con el aumento de exceso de aire la transferencia de calor disminuye hasta 14.07% con un 100% de exceso de aire y aumenta hasta 66.93% para el caso estequiométrico, debido que el aire en exceso absorbe una parte del calor generado por la combustión. La aplicación del modelo de radiación disminuye la transferencia de calor hasta 20.73%, debido a la absorción de calor por parte de los productos. Al cambiar el modelo de combustión con el de Arrhenius la transferencia de calor varía insignificantlymente con 0.07%. Para el uso de 2 pasos de reacción la transferencia de calor disminuye 15.2%, esto debido a que la energía liberada para una reacción de 2 pasos es poco menor a la de 1 paso de reacción. Al realizar modificaciones al modelo EBU se calculó que por el lado de las constantes EBU al ir subiendo su valor estas aumentan la transferencia de calor, ya que la velocidad de consumo de combustible es más rápida y presentan una menor zona de combustión, es importante ver que entre la constante de 4 (caso base) y la de 8 la diferencia es casi

nula de 0.26%. El uso del parámetro $\left(\frac{\tilde{Y}_P}{1+S}\right)$ aumenta insignificantlymente 0.26% la transferencia de calor.

Tabla 5.1 Calor transferido para las distintas configuraciones.

Variaciones geométricas			
Portas	2.0 mm	2.6 mm	2.8 mm
Calor (W)	2818.97	2838.67	2848.16
Separación	0.75*Separación	1.25* Separación	1.75* Separación
Calor (W)	2550.98	3210.35	3588.24
Características del fluido/flujo			
Velocidades	1.3 m/s	2.8 m/s	-----
Calor (W)	1822.09	4142.97	-----
Combustibles	Metano	-----	-----
Calor (W)	2763.84	-----	-----
Exceso Aire	0%	100%	-----
Calor (W)	4841.61	2492.03	-----
Parámetros del modelo de combustión			
Radiación	Con Rad	-----	-----
Calor (W)	2298.79	-----	-----
Modelos	Arrhenius	-----	-----
Calor (W)	2898.14	-----	-----
Pasos	2 pasos	-----	-----
Calor (W)	2461.59	-----	-----
CEBU	CEBU=1	CEBU=2	CEBU=8
Calor (W)	2626.80	2797.43	2907.99
Parámetro EBU	Con C _{PROD}	-----	-----
Calor (W)	2905.16	-----	-----

Tabla 5.2 Diferencia porcentual de la transferencia de calor de las configuraciones estudiadas respecto al caso base.

Variaciones geométricas			
Portas	2.0 mm	2.6 mm	2.8 mm
Diferencia %	-2.80	-2.12	-1.80
Separación	0.75* Separación	1.25*Separación	1.75 Separación
Diferencia %	-12.04	10.69	23.72
Características del fluido/flujo			
Velocidades	1.3 m/s	2.8 m/s	-----
Diferencia %	-37.17	42.84	-----
Combustibles	Metano	-----	-----
Calor (W)	-4.70	-----	-----
Exceso Aire	0%	100%	-----
Calor (W)	66.93	-14.07	-----
Parámetros del modelo de combustión			
Radiación	Con Rad	-----	-----
Diferencia %	-20.73	-----	-----
Modelos	Arrhenius	-----	-----
Calor (W)	-0.07	-----	-----
Pasos	2 pasos	-----	-----
Calor (W)	-15.12	-----	-----
C _{EBU}	C _{EBU} =1	C _{EBU} =4	C _{EBU} =8
Calor (W)	-9.42	-3.54	0.26
C _{PROD}	Con C _{PROD}	-----	-----
Calor (W)	0.16	-----	-----

6. VALIDACIÓN EXPERIMENTAL

Con el objetivo de validar el estudio numérico con datos experimentales se medirá la velocidad de la mezcla aire-combustible a la entrada del quemador y la temperatura desde la tapa hasta diferentes posiciones en z.

6.1 Instrumentos de medición utilizados

A continuación se describen los equipos utilizados para este análisis:

6.1.1 Termo-Anemómetro de hilo caliente

Medidor de la velocidad de gases con sonda telescópica diseñada para conectarse a conductos y otras aberturas pequeñas (Figura 6.1). Funciona según el siguiente principio: Cuando un alambre calentado eléctricamente se coloca en una corriente gaseosa, se transfiere calor desde el alambre al fluido principalmente por convección, por tanto midiendo la temperatura del alambre se tendrá entonces un medida del flujo másico del fluido.

El instrumento utilizado en este experimento es un termo-anemómetro de hilo caliente con registrador de datos de la marca *EXTECH INSTRUMENTS* modelo SDL350.

6.1.2 Termopares

Para validar los resultados de la temperatura en el exterior del quemador de la estufa doméstica, se utilizaron termopares tipo “k” (cromel/alumel) con un rango de temperaturas hasta 1300°C (Figura 6.2).



Figura 6.1 Termo-anemómetro de hilo caliente.

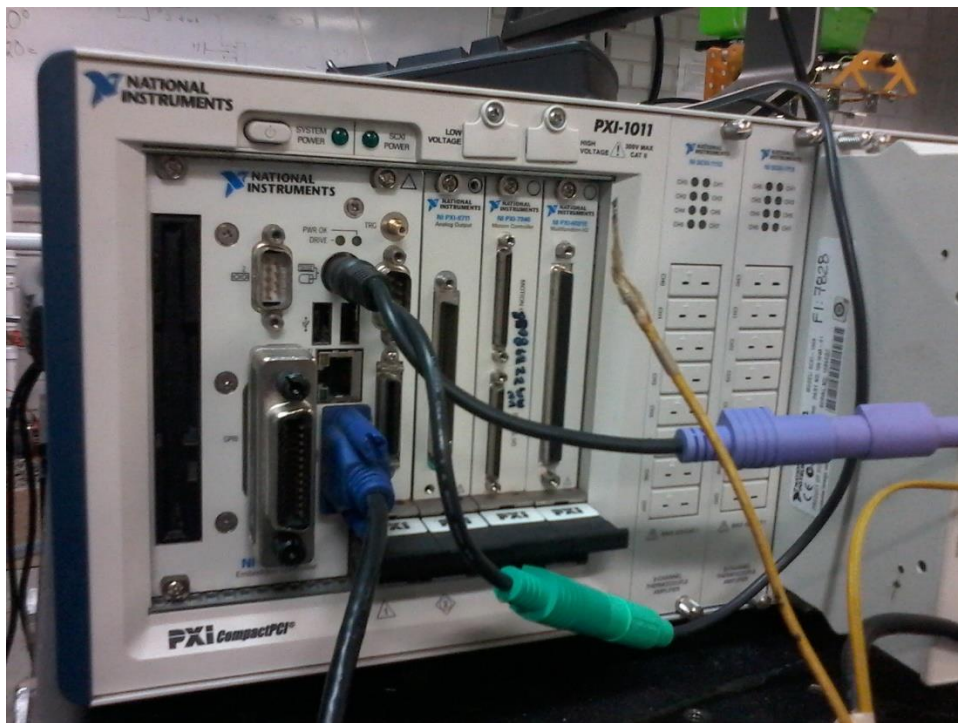


Figura 6.2 Termopar-Adquisidor de datos.

6.2 Mediciones y resultados

Velocidad: la velocidad de la mezcla de aire-combustible (sin combustión) se midió a la entrada del quemador con el termo-anemómetro de hilo caliente (Figura 6.3), se obtuvieron datos de la mínima y máxima velocidad que dio la válvula de dos pasos que alimenta al quemador. Para cada experimento se realizaron 6 pruebas. En la Tabla 6.1 se muestran las velocidades medias del experimento.



Figura 6.3 Medición de velocidad.

Temperatura: la temperatura se midió desde el centro de la superficie de la tapa a diferentes posiciones en z (hasta 8 cm arriba de la tapa), para esto se utilizó un termopar tipo k (Figura 6.4) el cual estuvo mandando señales a un adquisidor de

datos de las temperaturas, la posición del termopar se fue moviendo cada 1 cm en la dirección axial con una duración de 5 minutos en cada punto. Para este experimento se realizaron 6 pruebas, a continuación en la Tabla 6.2 se muestran las temperaturas medias en cada punto de monitoreo. Estos resultados se comparan con el caso base (numérico), encontrando una diferencia porcentual de temperatura promedio de 4.7%. En la Figura 6.5 se observa que en la parte experimental aproximadamente 2 cm después de la tapa se presenta una temperatura más baja, debido a que en esta la combustión no es perfecta ya que no se quema totalmente el combustible, ya después de los 2 centímetros las temperaturas de ambos resultados se asemejan, por lo que se puede decir que la validación de nuestro calculo numérico esta validado con una buena aproximación.

Tabla 6.1 Resultados de mínima y máxima velocidad

Mínima velocidad		Máxima velocidad	
# Experimento	Velocidad (m/s)	# Experimento	Velocidad (m/s)
1	1.36	2	2.92



Figura 6.4 Medición de temperatura.

Tabla 6.2 Resultados de temperaturas.

# Distancia Z (m)	T Experimental (K)	T Simulación (K)	Diferencia %
0.0180	804	641	20.24
0.0280	917	1045	13.99
0.0380	970	1030	6.17
0.0480	996	1010	1.38
0.0580	986	989	0.26
0.0680	972	968	0.38
0.0780	952	950	0.24
0.0880	933	935	0.21
0.0980	923	922	0.13

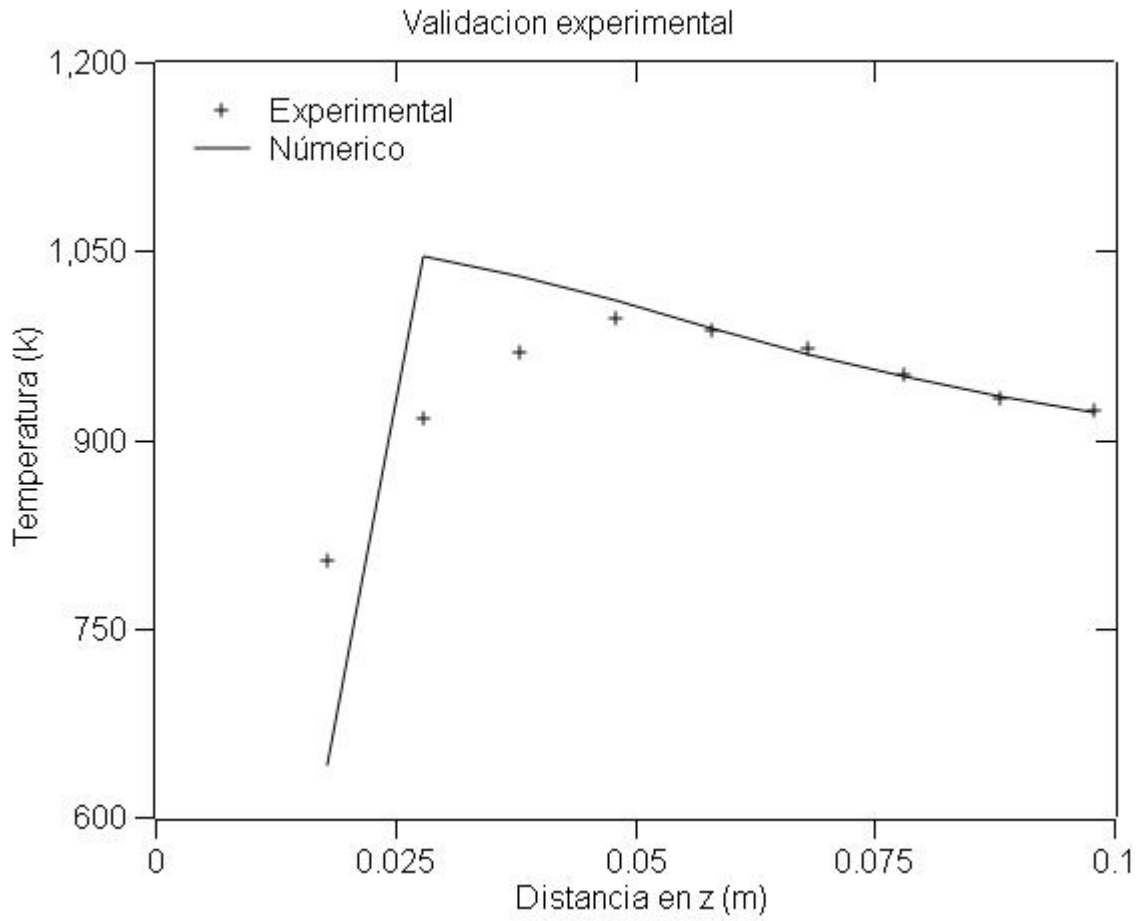


Figura 6.5 Perfil axial de temperatura para la validación experimental.

7. CONCLUSIONES

En este trabajo se realizó un estudio numérico y experimental de la combustión del flujo reactivo del quemador de una estufa doméstica. El caso base consistió en una alimentación premezclada de propano-aire con un 70% de exceso de aire a una velocidad de 2 m/s. En este estudio se simuló la combustión de una llama difusiva utilizando el método de volúmenes finitos, la alternativa de ecuaciones promediadas RANS y el modelo de turbulencia $\kappa - \varepsilon$ estandar para el cierre de ecuaciones. Para representar a la cinética química se utilizó el modelo Eddy Break Up.

Se realizaron 3 estudios para el caso base:

1. Variaciones debido a cambios en la geometría del quemador.
2. Los cambios al modificar las condiciones del flujo y características del fluido.
3. El efecto debido a modificaciones de los parámetros del modelo.

A partir del caso base, se encontró que desde la tapa del quemador hasta aproximadamente 3.5 cm de altura se crea una zona de recirculación debido a que los gases de la combustión con baja velocidad fueron arrastrados por gases con mayor velocidad hacia la parte superior de la tapa. También la formación de recirculaciones entre las portas, debido a las diferencias de velocidades a la salida de cada una, lo cual hace que la mezcla de aire-combustible este reaccionando constantemente. La temperatura de la llama de propano alcanzo hasta 1577 K en la zona cercana a la reacción y enseguida empieza a disminuir debido a que se empieza a mezclar con el aire circundante. Los productos generados por la combustión (H_2O , CO_2 y N_2) dan una fracción másica de 0.579 en la zona de combustión, debido al 70% de exceso de aire añadido a la entrada del quemador.

Al disminuir la longitud de la porta chica se ocasiona que la velocidad en la porta grande aumente y lo contrario al agrandarla, debido a que esta modificación en el área de la porta chica hace que el flujo aire-combustible aumente o disminuya. Para la temperatura se tiene que al disminuir la longitud de la porta chica esta aumenta para la posiciones del estudio (axial $z/r_i=1.0$) y disminuya cuando la longitud aumente. También, se observa que la zona de combustión es desplazada, debido

a una disminución en el arrastre de aire de cada caso, para la porta de 2.2 mm el arrastre de aire aumenta un 5%, para la de 2.6 mm disminuye un 2% y finalmente para la de 2.8 mm disminuye 7%. La transferencia de calor disminuye para todas las modificaciones debido a que las áreas entre portas comienzan a igualarse, por lo que las velocidades entre portas son semejante y se generan menos recirculaciones entre ellas.

Al aumentar la separación entre las portas la temperatura aumenta, debido que para un mismo radio de quemador se tendría menos portas y hace que la velocidad de la mezcla aumente y por lo tanto la temperatura también. También se observa como la zona de combustión ocurre un movimiento radial, debido al aumento de arrastre de aire para estos casos; para la separación de 0.75 se tiene una disminución de 42%, la de 1.25 se tiene un aumento de 25% y por último la de 1.75 aumenta 60%, todas con respecto al caso base. La transferencia de calor disminuye 12.04% para una disminución de 25% de la separación total (caso base) y aumenta hasta 23.77% para un aumento de 75%.

Para el efecto de la velocidad de la mezcla, al reducirla disminuye tanto la temperatura como la velocidad, debido a que el flujo de aire-combustible es menor a la salida de las portas y lo contrario al aumentarla, la zona de combustión es desplazada por el aumento de arrastre de aire, para la velocidad de 1.8 m/s disminuye 19 % y para la velocidad de 2.8 m/s lo aumenta 60%. La transferencia de calor aumenta hasta 42.84% para una velocidad de 2.8 m/s y disminuye a 37.17% para una velocidad de 1.3 m/s.

Al cambiar de combustible por metano se genera una disminución en la temperatura alrededor de todo el quemador hasta 100 K, debido a que el metano presenta una menor densidad por lo que el flujo de aire-combustible disminuye, también la transferencia de calor disminuye 4.7%.

El efecto de un exceso de aire en la mezcla ocasiona que al aumentarlo tanto la velocidad como la temperatura disminuye debido a que el combustible presenta una menor fracción másica, y el aire en exceso absorbe una parte de la energía generada por la combustión y ocurre todo lo contrario al disminuir el exceso de aire

en la mezcla. También la zona de combustión sufre desplazamiento para un exceso de 100% lo disminuye 3% y para el caso estequiométrico lo aumenta 13%. La transferencia de calor aumenta hasta 66.93% para un exceso de aire de 0% (estequiométrico) y disminuye hasta 14.07% para un exceso e aire de 100%.

El efecto que ocasiona el uso de un modelo de radiación sobre la temperatura es disminuirla en un 4.76%, ya que una parte del calor generado por la combustión es absorbido por los productos. Por lo que la transferencia de calor disminuye 20.73%.

Al hacer uso de la Ley de Arrhenius para la cinética química tanto la velocidad como la temperatura a lo largo del quemador varían irregularmente, debido a que este modelo presenta una mayor velocidad de reacción por lo que consume muy rápido el combustible. Sin embargo la transferencia de calor solo disminuye 0.07%.

Al extender la reacción hasta dos pasos, se observa como la zona de combustión del de 2 pasos se mueve aproximadamente desde 1.4 a 1.6 radialmente, esto es debido a que en el modelo de 2 pasos la primera y segunda reacción se consumen a distinta velocidad de reacción, con respecto al de 1 paso de reacción. También se observa como en la zona de combustión ocurre un desplazamiento radial, debido al aumento de arrastre de aire para el de 2 pasos de reacción, este aumento un 23%. La transferencia de calor disminuye 15.12%.

Para la contante C_{EBU} , conforme esta disminuye el radio de la zona de combustión aumenta debido a que el combustible tarda más tiempo en consumirse y este tiene más libertad de expandirse radialmente. Tanto la temperatura como la velocidad aumentan directamente con la variación de la constante. La transferencia de calor para una $C_{EBU}=1$ la transferencia de calor disminuye a 9.42% y aumenta solo 0.26% para una $C_{EBU}=8$. La aplicación de la C_{PROD} solo aumenta insignificamente 0.16%.

Para la parte experimental los resultados numéricos del flujo reactivo de la combustión presentaron buena aproximación para la temperatura en parte central de éste, con un error porcentual promedio de 4.70%.

BIBLIOGRAFIA

- [1] «<http://www.jpl.nasa.gov/>.
- [2] «<http://www.un.org/climatechange/>.
- [3] V. Kármán y Taylor, «The fundamentals of the statical theory or turbulence,» vol. 4, pp. 131-130, 1937.
- [4] R. K. D. J. W. C. G. V. L. G. P. S. D. M. G. M. F. H. W. a. M. V. L. C. T. Bowman, «GRI-Mech 2.11,» 1995.
- [5] B. E. Launder y D. B. Spalding, «Mathematical Models of Turbulence,» *Academic Press*, 1972.
- [6] N. Peters, *Laminar Flamelets Concepts in Turbulent Combustion*, Pittsburg: In the Combustion Institute, 21th symposium on Combustion, 1986.
- [7] F. A. Williams, «Combustion Theory,» *The Benjamin Cummings Publishing Company*, 1985.
- [8] J. M. U. D. R. W. Warnatz, «Combustion Springer,» 1986.
- [9] C. Dopazo, Probability density function approach for a turbulent axisymmetric heated jet, Department of Mechanic, State University of New York: Centerline evolution, 1975.
- [10] J. M. F. Oro, Técnicas numéricas en ingeniería de fluidos: introducción a la dinámica de fluidos computacionales (CFD) por el método de volúmenes finitos, primera ed., España: Reverté, 2012.
- [11] D. B. Spalding, «Mixing and Chemical Reaction in Steady, Confined Turbulent Flames,» *In The Institute of Combustion, editor, 13th Symposium on Combustion*, pp. 649-657, 1971.
- [12] D. B. Spalding, «Development of the Eddy-Breakup Model of Turbulent Combustion,» *In The Combustion Institute, editor, 16th Symposium on Combustion*, p. 1657, 1976.
- [13] S. Magnussen y Hjertager, «On Mathematical Models of Turbulent Combustion with Special Emphasis on Soot Formation and Combustion,» *In The Combustion Institute, editor, 16th Symposium on Combustion*, pp. 719-729, 1977.

- [14] C. K. Westbrook y F. L. Dryer., «Chemical Kinetics Modeling of Hydrocarbon Combustion,» *Progress Energy Combustion Science*, 1984.
- [15] J. Y. L. Y. R. B. Chen, «CO-H₂-N₂/Air Diffusion Flames,» *Thermal Radiation and Transfer Effects. Lecture Notes in Physics, m15. Springer-Verlag*, 1993.
- [16] S. V. S. D. B. Patankar, «A Calculation Procedure for Heat, Mass and Momentum Transfer in Three Dimensional Parabolic Flows,» *Int. J. Heat and Mass Transfer*, vol. 15, pp. 1787-1806, 1972.
- [17] S. V. Patankar, «Numerical Heat Transfer and Fluid Flow. Series in Computational Methods in Mechanics and Thermal Science,» *Hemisphere Publishing Corporation*, 1980.
- [18] D. B. Spalding, «Mathematical Modeling of Fluid Dynamics, Heat Transfer and Math Transfer Process. Technical Report HTS/8011,» *Imperial College of Science Technology and Medicine*, 1980.
- [19] J. C. Q. H. Q. S. D. B. Ludwing, «The PHOENICS Reference Manual,» *Technical Repot CHAM TR/200, CHAM Ltd*, 1989.
- [20] M. F. M. R. J. R. S. P. Bharadwaj, «Medium resolution transmission measurements of water vapor at high temperature,» *J. Heat Transfer*, vol. 4, n^o 128, pp. 374-381, 2006.
- [21] S. Pope, «A Monte Carlo Method for the PDF Equations of Turbulent reactive Flows,» *Combustion an Science Thecnology*, vol. 25, pp. 159-174, 1981.
- [22] S. B. Pope, «The Statistical Theory of Turbulent Flames. Phil. Trans. R. Soc.,» 1979.