



UNIVERSIDAD NACIONAL ATÓNOMA DE
MEXICO

FACULTAD DE INGENIERÍA

DIVISIÓN DE INGENIERÍA MECÁNICA E INDUSTRIAL

**Estudio paramétrico del flujo de aire inducido en el
mezclador de un quemador atmosférico**

TESIS

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE
INGENIERO MECÁNICO

P R E S E N T A:

CARLOS ALFONSO RUIZ GOMEZ

DIRECTOR DE TESIS: DR. WILLIAM VICENTE Y RODRÍGUEZ

MÉXICO, D.F. CD. UNIVERSITARIA

JUNIO 2010



AGRADECIMIENTOS

Quiero agradecer en primer lugar a mi familia: Alfonso, Martha, Oscar y Ángel que siempre me apoyo porque este último paso que doy en esta etapa, no lo hubiera podido lograr sin su apoyo.

Quiero mencionar y agradecer el apoyo de mis sinodales para la realización de esta meta. Primero a mi director de tesis el Dr. William Vicente y Rodríguez por su paciencia y comprensión; al Dr. Martin salinas; al M.I. José Esteban Barrios Bonilla; al M.I. Eliseo Martínez Espinosa y al Ing. Jesús Javier Cortes Rosas.

Deseo agradecer a todos los que estuvieron a mi lado por todas las vivencias, apoyo, ayuda y su conocimiento que me concedieron, desde el comienzo hasta el final de esta etapa a : Gilma, Roció, Paulina, Olinca, Kika, Scherezada, Bruno, Pablo, Carlos, Oscar, Lule, Moy, lic, Nicolás, Vladimir, Peter, Adrian, Fermín, José, Salomón, Aris, Milton y Cristian .

A todos mis profesores, especialmente a los de la Facultad de Ingeniería, que con sus conocimientos y ejemplo me formaron. Les agradezco tantas atenciones y todo el apoyo que a lo largo de los años me han brindado, junto con los buenos y malos momentos.

Doy gracias a la Universidad Nacional Autónoma de México y sobre todo a la Facultad de Ingeniería, por haberme permitido ser parte de esta gran comunidad universitaria y haberme ofrecido tantas herramientas para poder hacer realidad este sueño, y anécdotas que contar y recordar.

Les deseo un vida dichosa y prospera a todas las personas que han velado y creído en mí.

MUCHAS GRACIAS!!

***“Nunca consideres el estudio
como una obligación, sino como
una oportunidad para penetrar
en el bello y maravilloso mundo
del saber”***

Albert Einstein

INDICE

1. Introducción.....	1
1.1 Objetivos.....	2
1.2 Motivación social y ambiental.....	3
1.3 Trabajos previos.....	3
1.4 Estructura de la Tesis.....	4
2. Ecuaciones de transporte.....	6
2.1 Continuidad.....	7
2.2 Conservación de cantidad de movimiento.....	7
2.3 Conservación de las especies químicas.....	8
2.4 Ecuación de estado y flujo difusivo	9
2.5 Ecuación diferencial homogénea y fracción de mezcla	12
2.6 Promediado de ecuaciones.....	14
3. Método de solución.....	19
3.1 Método de Volúmenes Finitos.....	19
3.2 Método BFC.....	23
3.3 Término transitorio.....	24
3.4 Término Convectivo	24
3.5 Término Difusivo.....	25
3.6 Término Fuente.....	25
4. Configuración simulada.....	26
4.1 Consideraciones.....	26
4.2 Parámetros del quemador.....	27
4.3 Detalles Numéricos.....	32
4.4 Mallado en coordenadas cilíndricas.....	32
5. Resultados.....	37
5.1 Resultados de la simulación numérica.....	37
5.2 Campo de presiones.....	38
5.3 Campo de velocidades.....	38

5.4	Energía Cinética Turbulenta.....	40
5.5	Tasa de disipación.....	41
5.6	Fracción másica de combustible.....	42
5.7	Efecto de la variación de la velocidad en el combustible.....	43
5.8	Efecto de la variación del diámetro del mezclador.....	44
5.9	Efecto de la distancia entre el mezclador y el inyector del combustible.....	45
5.10	Efecto de longitud del mezclador.....	46
6.	Conclusiones y trabajos futuros.....	48
6.1	Conclusiones.....	48
6.2	Trabajos futuros.....	49
7.	Apéndices.....	50
	Apéndice A.....	50
A.1	Introducción.....	50
A.2	Cierres de Segundo Orden.....	50
A.3	Modelos de Viscosidad Turbulenta.....	53
	Apéndice B.....	56
B.1	Introducción.....	56
B.2	Esquemas Lineales.....	56
	Apéndice C.....	58
C.1	Archivo de datos de entrada Q1.....	58
C.2	Q1.....	58
	Bibliografía.....	61

Capítulo I

INTRODUCCIÓN

Los quemadores son los equipos donde se realiza la combustión, por tanto deben contener los tres vértices del triángulo de combustión, es decir que deben lograr la mezcla íntima del combustible con el aire y además proporcionar la energía de activación.

Por la forma en que obtienen el aire de combustión se distinguen, generalmente, dos tipos de quemadores:

- Quemadores atmosféricos
- Quemadores mecánicos

De estos los quemadores atmosféricos como los que se estudian en esta tesis, se emplean para combustibles gaseosos. Una parte del aire que se necesita para la combustión (aire primario) se induce en el propio quemador por el chorro de gas salido de un inyector; el aire restante (aire secundario) se obtiene por difusión del aire ambiente alrededor de la llama como se muestra en la figura 1.

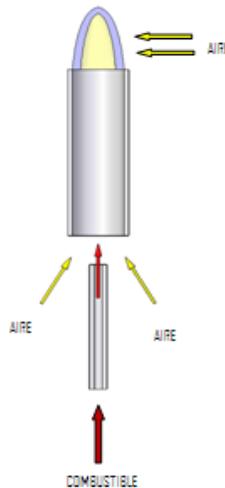


Figura 1. Quemador atmosférico

La regulación del gas se obtiene por variación de la presión en el inyector; esto permite que el quemador pueda ser modulante con relativa facilidad.

La regulación del aire se puede conseguir:

- Variando la sección de entrada de aire

En esta tesis se pretende modelar el flujo en el interior del mezclador y estudiar el efecto de los diferentes parámetros propuestos para el quemador.

Los quemadores mecánicos también denominados como quemadores a sobrepresión; el aire de combustión es introducido mediante un ventilador, existen diversos sistemas para lograr la mezcla del aire con el combustible.

el combustible se introduce mediante los inyectores, aprovechando la propia presión de suministro. En los combustibles líquidos se utilizan diversos sistemas para su pulverización, de modo que se creen microgotas de combustible que facilitan su mezcla con el aire.

Estos quemadores se fabrican desde pequeñas hasta muy altas potencias. La combustión puede ajustarse actuando sobre el gasto de combustible, sobre la cantidad de aire a impulsar y sobre los elementos que producen la mezcla, por lo que es posible obtener rendimientos de combustión muy altos.

1.1 Objetivos

Analizar el comportamiento de la mezcla aire y combustible en el mezclador de un quemador, al variar los parámetros físicos del mezclador, los cuales se muestran de, manera representativa en la figura 1.1 estos parámetros son:

- Velocidad de entrada del combustible
- Diámetro del mezclador
- Distancia entre el inyector y mezclador
- Longitud del mezclador

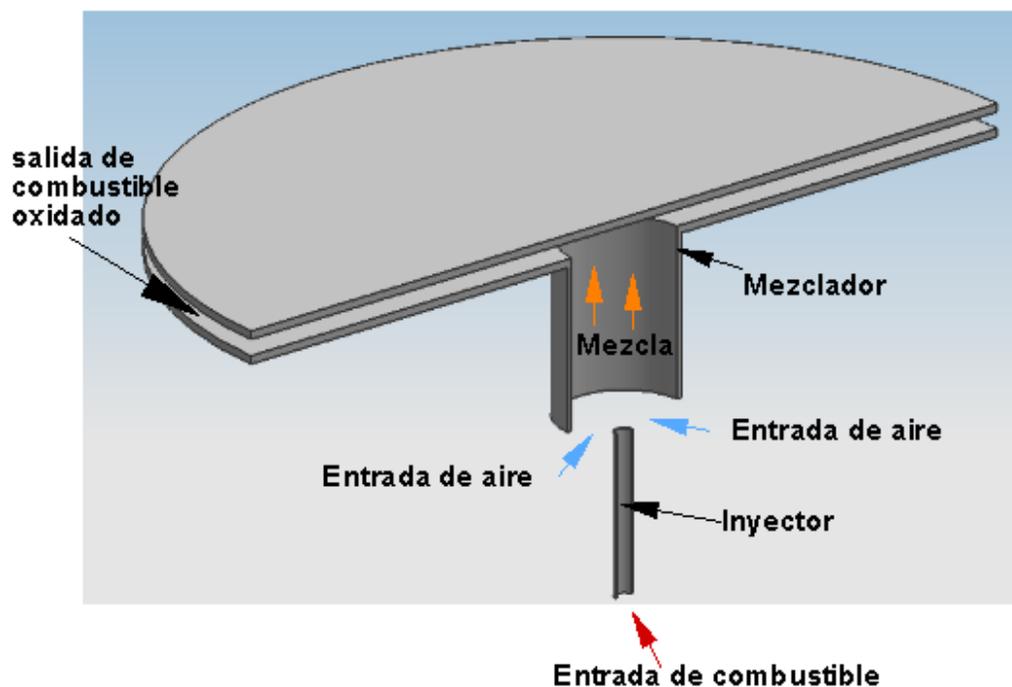


Figura 1.1 Esquema representativo del quemador

El efecto de estos parámetros se cuantifica mediante la cantidad de aire primario que es inducido del medio ambiente.

1.2 Motivación social y ambiental

Se puede encontrar gas n-butano en todos los continentes distribuidos de forma muy irregular, pero es muy difícil estimar cuantos años se contara con este combustible. Es difícil hacer este cálculo porque depende de muchas variables desconocidas. No se sabe cuál va a ser el ritmo de consumo, porque es probable que cuando vaya escaseando y sus precios suban, se busquen con más empeño sistemas para hacerlo más eficiente la mezcla del combustible con el aire.

Uno de los problemas más estudiados en la actualidad es el que surge de la inmensa cantidad de CO₂ que estamos emitiendo a la atmosfera al quemar este combustible. Este gas tiene un importante efecto invernadero y por consecuencia un calentamiento global en todo el planeta con cambios en el clima que podrían ser catastróficos. Estudiando nuevos sistemas podemos hacer que estos sean más eficientes y así quemar los combustibles en menos cantidad.

Este tipo de combustible que se emplea en un 80% de las familias en la realización de sus actividades cotidianas, por ello es prioridad obtener un análisis detallado y obtener un sistema quemador que nos dé la mejor eficiencia posible y así obtener una mejor economía para los consumidores de este combustible.

El trabajo experimental requiere un prototipo o un modelo físico a escala del sistema, donde se puedan hacer los ensayos, cuya construcción y operación es frecuentemente costosa y lenta. Por otro lado las mediciones requieren técnicas de medidas fiables y no intrusivas, que en muchas ocasiones son difíciles de implementar en modelo como el prototipo. Adicionalmente, se tiene el problema de la semejanza entre el modelo ensayado y el prototipo a diseñar.

El costo y las escalas temporales asociadas a la experimentación están promoviendo el uso (frecuentemente de carácter complementario) de la simulación numérica. Ésta es a menudo más económica que la experimentación, y proporciona información completa y detallada de las variables relevantes del flujo.

Como se observa, el uso de herramientas computacionales para el desarrollo de proyectos en cualquier ámbito, representa un camino tecnológico y económico viable.

1.5 Trabajos previos

El adecuado funcionamiento del quemador depende de la cantidad de aire que es arrastrado, de la mezcla y de la forma como se realiza la combustión a la salida de las aperturas por donde sale la premezcla, esto provoca que el diseño del mezclador sea importante para lograr el óptimo desempeño del quemador.

Existen parámetros en el sistema de gas, que influyen en el buen funcionamiento del quemador, y se encuentran estandarizados por normas como el tipo de gas, la presión de alimentación y la capacidad térmica a la cual va a funcionar un quemador.

Estos parámetros definen el diámetro del orificio del inyector que regula la salida de combustible, la distancia que existe entre el inyector y el tubo mezclador y la variación en la sección de entrada del mezclador, que impacta en la relación aire-combustible, ya que puede cambiar la admisión de aire. Lo más habitual es que únicamente se module la válvula de gas, dejando en una posición fija la entrada de aire en la puesta en marcha.

El estudio de diferentes componentes en varias dimensiones ha sido compilado en la Tabla 1:

Referencias	Relación de área (D_C/D_I) ²	Entrada del mezclador	Ángulo de convergencia (°)	Relación de garganta (L_C/D_C)	Ángulo de divergencia (°)	Relación de proyección (L_{CE}/D_C)
Fernandez (2001)	-	-	-	6.00	8.00	1.00
Cramers y Beenackers (2001)	2.1-9.0	Cónico	-	2.0-10.0	3.00	-
Elgozali et al. (2002)	-	Cónico	-	10.00	7.00	2.72
Gamisans et al. (2004)	-	Cónico	-	0.5-13.0	-	-
Rusly et al. (2005)	2.50	Cónico	10.00	5.00	7.00	5.00
Mandal et al. (2005a)	10.00	Redondeado	-	9.70	9.10	-
Mandal et al. (2005b)	5.6-14.4	Redondeado	-	9.70	9.10	-
Majumder et al. (2005)	7.4-22.5	Redondeado	-	9.60	7.00	-
Li y Christofides (2005)	-	Cónico	12.00	1.10	2.00	2.17
Das y Bivas (2006)	15.5-59.5	-	-	7.76	8.60	-
Sirveerakul et al. (2007)	5.6-10	Redondeado	-	1.0-6.0	10.00	1.1-6.8

Tabla 1. Resultados de trabajos previos.

En esta Tesis se propone trabajar únicamente con la sección cilindro del mezclador, es decir, utilizar un perfil recto y variar los diferentes parámetros.

1.6 Estructura de la Tesis

Al terminar este capítulo se expondrán la tesis, como a continuación se muestra

Capítulo 2

Se presentan las ecuaciones instantáneas que gobiernan el movimiento del flujo no reactivo y a continuación la deducción de las ecuaciones promediadas que se resolverán mediante un método de volúmenes finitos. Estas ecuaciones son: de continuidad, de cantidad de movimiento, así como la ecuación para la densidad de la mezcla.

Capítulo 3

En este capítulo se presenta la introducción al método de solución por volúmenes finitos, el cual permite resolver las ecuaciones de transporte que describen el flujo reactivo, que se presentan en el capítulo 2.

Capítulo 4

En este capítulo se muestra la configuración experimental, así como los detalles numéricos que se utilizan en el modelo para simular este sistema.

Capítulo 5

Las conclusiones que se deriva del trabajo realizado se exponen en este capítulo, además de algunas recomendaciones para trabajos futuros.

Capítulo II

ECUACIONES DE TRANSPORTE

Para simular el flujo en el mezclador se tienen básicamente tres alternativas numéricas:

- Simulación Numérica Directa (Direct Numerical Simulation-DNS)
- Simulación de Grandes Escalas (Large Eddy Simulation-LES)
- Ecuaciones Promediadas (Reynolds o Favre, Average Navier-Stokes Equations-RANS)

La DNS consiste en discretizar directamente las ecuaciones instantáneas que gobiernan el movimiento del flujo reactivo, válidas tanto para flujo laminar como turbulento, y resolverlas numéricamente. Las ecuaciones que se resuelven son las de conservación de masa, las de cantidad de movimiento, la de energía y la de las especies químicas. La discretización resuelve todas las escalas, espaciales y temporales, de las variables del flujo, y por tanto no requiere de ninguna aproximación o modelo. En un flujo turbulento sin reacción, para capturar todas las escalas, el número de los puntos de discretización (espacio temporal) es función del número de Reynolds elevado prácticamente al cubo. Como el flujo del sistema de interés es casi siempre turbulento y con número de Reynolds alto, la aplicación de este método está limitada por la potencia de los equipos de cálculo.

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

Otra posibilidad de simulación es el método RANS, que es extensamente utilizado en casos prácticos de interés industrial y que consiste en promediar todas las escalas, espaciales y temporales, de las fluctuaciones turbulentas y resolver las ecuaciones de transporte en términos de variables medias del sistema.

Los parámetros fundamentales para describir el flujo son la presión y la velocidad. Para flujos compresibles e incompresibles y Newtonianos, los parámetros son gobernados por las ecuaciones constitutivas de Navier-Stokes que se basan en los principios físicos básicos de conservación de masa y cantidad de movimiento. Para un flujo incompresible y turbulento se puede utilizar la alternativa RANS, que es el promediado temporal de las ecuaciones mencionadas. El planteamiento para resolver el modelo turbulento del flujo en el mezclador es utilizar las ecuaciones promediadas y la incorporación de un apropiado modelo de turbulencia. Para modelar el transporte turbulento de la cantidad de movimiento se utilizan modelos de turbulencia del tipo k-e. Las ecuaciones se resuelven mediante el método de volúmenes finitos.

Las exigencias computacionales de DNS, así como la demanda de medios avanzados de cómputo y el escaso desarrollo en la simulación en mezcladores para la alternativa LES, dan como resultado que esta Tesis utilice la alternativa RANS para modelar la aerodinámica del flujo.

A veces, resolver modelos de flujo para geometrías tridimensionales con la alternativa RANS es difícil, debido a las limitaciones en la potencia de los ordenadores. Por lo tanto, diversas simplificaciones a las ecuaciones tienen que ser realizadas con el fin de reducir las dimensiones del problema.

Las ecuaciones instantáneas de transporte que gobiernan el flujo que se han estudiado numéricamente en esta tesis son: ecuación de continuidad, de cantidad de movimiento y especie química, que pueden ser escritas en un sistema de coordenadas cartesianas de la siguiente manera.

2.1 Continuidad

La ecuación de continuidad, que expresa la conservación de masa, puede escribirse como:

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

donde \vec{v} y ρ son, respectivamente, la velocidad y la densidad instantáneas de la mezcla reactiva.

2.2 Conservación de cantidad de movimiento

La conservación de cantidad de movimiento del flujo es descrita a través de la ecuación:

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

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

Según la ley de Navier-Poisson el tensor de esfuerzos viscosos es [2.1]:

$$\bar{\bar{\tau}}' = \mu(\nabla \bar{v} + \nabla \bar{v}^T) + (\mu_v - 2/3\mu)(\nabla \cdot \bar{v})\bar{\bar{\delta}} \quad (2.3)$$

donde μ es la viscosidad molecular de la mezcla, μ_v es el coeficiente de viscosidad volumétrico y $\bar{\bar{\delta}}$ es el tensor delta de Kronecker. Generalmente, el coeficiente de viscosidad volumétrico es despreciado.

Si se sustituye la ecuación (2.3) en (2.2), se obtienen las ecuaciones de Navier- Stokes:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \bar{v}) + \nabla \cdot (\rho \bar{v} \bar{v}) = -\nabla p + \nabla \cdot \left[\mu \left(\nabla \bar{v} + (\nabla \bar{v})^T - \frac{2}{3}(\nabla \cdot \bar{v})\bar{\bar{\delta}} \right) \right] + \rho \bar{g} \quad (2.4)$$

2.3 Conservación de las especies químicas

Si se tiene una mezcla de N especies, la fracción másica de una especie química α es:

$$Y_\alpha = \frac{m_\alpha}{m_T} \quad (2.5)$$

donde m_α es la masa de la especie y m_T es la masa total de la mezcla (contenida en el mismo volumen). De acuerdo con la definición (2.5), la suma de todas las fracciones másicas de las especies es uno.

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

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

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_\alpha) + \nabla \cdot (\rho \bar{v} Y_\alpha) = -\nabla \cdot \bar{J}_\alpha + S_\alpha, \alpha = 1, 2, \dots, N \quad (2.6)$$

donde \bar{J}_α es el flujo difusivo y S_α es la tasa de formación neta de la especie α .

Para satisfacer la ecuación de continuidad (2.1), se cumple que $\sum_{\alpha=1}^N S_\alpha = 0$ y $\sum_{\alpha=1}^N \bar{J}_\alpha = 0$. El flujo difusivo de la especie α , \bar{J}_α se trata más adelante. En este trabajo de tesis, α es igual a cero, dado que la especie química no reacciona.

La ecuación (2.6) puede formularse también en términos de la molalidad, n_α (número de moles por unidad de masa de la mezcla), definida como sigue:

$$n_\alpha = Y_\alpha / W_\alpha \quad (2.7)$$

2.4 Ecuación de estado y flujo difusivo

Las ecuaciones anteriores deben ser suplementadas con ecuaciones de estado que relacionen la presión, la densidad y la temperatura y por expresiones para los flujos difusivos.

En términos de la densidad de las especies constitutivas, la densidad de la mezcla se calcula como:

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

Si se supone una mezcla de gases ideales:

$$\rho = \frac{p}{RT \sum_{\alpha=1}^N \frac{Y_{\alpha}}{W_{\alpha}}} \quad (2.9)$$

El flujo difusivo, \bar{J}_{α} , se produce por gradiente de especies, de temperatura (efecto Soret), y de presión [2.12]. Generalmente, estos dos últimos efectos son despreciados en flujos con combustión ([2.11] y [2.12]). El flujo difusivo, \bar{J}_{α} , se expresa según la ley de Fick, que se escribe como :

$$\bar{J}_{\alpha} = \frac{\rho W_{\alpha}}{W_m^2} \sum_{\beta \neq \alpha}^N D_{\alpha\beta} W_{\beta} \nabla X_{\beta} \quad (2.10)$$

donde 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:

$$\bar{J}_{\alpha} = -D_{\alpha}^M \rho \frac{Y_{\alpha}}{X_{\alpha}} \nabla X_{\alpha} \quad (2.11)$$

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

$$D_{\alpha}^M = \frac{1 - Y_{\alpha}}{\sum_{\beta \neq \alpha}^N x_{\beta} / D_{\alpha\beta}} \quad (2.12)$$

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.

El número adimensional de Schmidt de la especie α , Sc_α , se define como:

$$Sc_\alpha = \frac{\mu}{D_\alpha \rho} \quad (2.13)$$

Se puede reescribir el flujo difusivo de la especie J_α , en términos del número de Schmidt, como sigue:

$$\vec{J}_\alpha = -\Gamma_\alpha \nabla Y_\alpha \quad \Gamma_\alpha = \frac{\mu}{Sc_\alpha} = \rho D_\alpha \quad (2.14)$$

Al aplicar las suposiciones anteriores y sustituir las expresiones de flujos difusivos, las ecuaciones de continuidad, cantidad de movimiento, especies químicas y energía se pueden escribir como:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = 0 \quad (2.15)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \vec{v}) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) = -\nabla p + \nabla \cdot \left[\mu \left(\nabla \vec{v} + (\nabla \vec{v})^T - \frac{2}{3}(\nabla \cdot \vec{v})\vec{\delta} \right) \right] + \rho \vec{g} \quad (2.16)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_\alpha) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} Y_\alpha) = \nabla \cdot \Gamma_\alpha \nabla Y_\alpha + S_\alpha \quad (2.17)$$

El número de Prandtl, Pr, se define así:

$$Pr = \mu \frac{C_p}{k} \quad (2.18)$$

En términos del número de Prandtl, la expresión es igual a:

$$\vec{J}_h = -\Gamma_h \nabla_h \quad \Gamma_h = \frac{\mu}{\text{Pr}} \quad (2.19)$$

2.5 Ecuación diferencial homogénea y fracción de mezcla

Es común que en flujos con combustión se haga la suposición de que los coeficientes de difusión de las especies y la entalpía son iguales:

$$\Gamma = \Gamma_\alpha = \Gamma_h \quad (2.20)$$

El número de Lewis, Le , es definido como:

$$Le = \frac{Sc_\alpha}{\text{Pr}} = \frac{k}{\rho D_\alpha C_p} \quad (2.21)$$

Así pues, la hipótesis de igual difusividad implica que Le es uno.

Esta hipótesis de igual difusividad de las especies no suele ser apropiada en flujo laminar para especies ligeras, como H y H₂, cuya menor masa les confiere una mayor difusividad. Para flujo turbulento, el

término de difusividad molecular es frecuentemente despreciable si se compara con el transporte turbulento $\bar{v}'' \phi''_\alpha$, como es presentado más adelante. Este flujo turbulento frecuentemente se modela como un término de difusión turbulenta con igual coeficiente de difusión para las especies y la entalpía, por lo que la hipótesis de igual difusividad está justificada.

Para especies inertes y para otros escalares transportados que no tienen término fuente, la hipótesis de igual difusividad, tiene como consecuencia que sus ecuaciones de conservación tengan la misma forma:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi_z) + \nabla \cdot (\rho\bar{v}\phi_z) - \nabla \cdot \Gamma\nabla\phi_z = 0 \quad (2.22)$$

donde ϕ_z puede ser la especie inerte o la entalpía o la fracción de mezcla. A la ecuación (2.17) se le denomina ecuación “homogénea”, por no tener término fuente (S^α).

En las hipótesis enunciadas anteriormente para la ecuación de la entalpía, no se tienen para ésta términos fuente y, por lo tanto, en la hipótesis de número de Lewis unitario, la entalpía también responde a la ecuación diferencial homogénea (2.17).

También es posible combinar linealmente las fracciones másicas de las especies reactivas, convenientemente pesadas con los coeficientes estequiométricos en las distintas reacciones, de forma que el término fuente de la ecuación para la variable resultante es nulo. Así pues, la ecuación (2.17) también representa estas combinaciones resultantes, que se denominan frecuentemente funciones de acoplamiento .

Cuando el sistema en estudio tiene solamente dos condiciones de contorno distintas para estas variables que responden a la ecuación diferencial homogénea, es decir, dos entradas de material, entonces todas

las soluciones para esas variables están relacionadas linealmente a través de esas condiciones de contorno:

$$\frac{\phi_{z,1} - \phi_{z,2}}{\phi_{z,1} - \phi_{z,2}} = \frac{h - h_2}{h_1 - h_2} \quad (2.23)$$

donde las subíndices 1 y 2 indican las entradas. El cociente de la expresión se denomina fracción de mezcla, f , y por estar normalizada con las condiciones de contorno, varía entre 0 (en una entrada) y 1 (en la otra). En cualquier punto del dominio, f indica la fracción de material local que procede de la entrada 1, y $(1 - f)$ la que procede de la entrada 2, independientemente del estado de reacción del fluido local. La fracción de la mezcla también responde a la ecuación diferencial (2.17), al ser una combinación lineal de soluciones de esta ecuación.

2.6 Promediado de las ecuaciones

El flujo en la mayor parte de los problemas de interés práctico, así como en este trabajo, es turbulento. Una de las características de este tipo de flujos es la variación aleatoria e irregular tanto en el espacio como en el tiempo de las propiedades del fluido.

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

Si el flujo presenta variaciones en la densidad, se pueden usar dos tipos de promedio. Uno es el promedio de Reynolds, el cual toma a la densidad como constante. El otro es el promedio de Favre, que es ponderado con la densidad ([2.2]).

De manera ilustrativa, se presenta con el símbolo Φ cualquier propiedad transportada, tal como la fracción másica de la especie Y_α , la entalpía h y las componentes de la velocidad \vec{v} . Los valores instantáneos de estas propiedades son escritos en términos de un promedio y una fluctuación turbulenta:

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

$$\Phi = \tilde{\Phi} + \Phi'' \quad (2.25)$$

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

$$\bar{\Phi} = \lim_{n_e \rightarrow \infty} \frac{1}{n_e} \sum_{i=1}^{n_e} \Phi^{(i)} \quad \text{Promedio de Reynolds} \quad (2.26)$$

$$\tilde{\Phi} = \lim_{n_e \rightarrow \infty} \frac{1}{n_e} \sum_{i=1}^{n_e} \rho^{(i)} \Phi^{(i)} \quad \text{Promedio de Favre} \quad (2.27)$$

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

De las definiciones anteriores:

$$\overline{\rho\Phi''} = 0, \quad \overline{\Phi''} \neq 0 \quad (2.28)$$

Con la definición de los dos promedios se obtiene:

$$\overline{\Phi} = \overline{\tilde{\Phi}} + \overline{\Phi''} \quad (2.29)$$

$$\overline{\Phi''} = -\frac{\overline{\rho'\Phi''}}{\overline{\rho}} \quad (2.30)$$

$$\overline{\rho'\Phi''} = \overline{\rho'\Phi'} \quad (2.31)$$

$$\overline{u_i\Phi'} = u_i\overline{\tilde{\Phi}} + \frac{\overline{\rho'u_i\Phi''}}{\overline{\rho}} + \overline{u_i\Phi''} \quad (2.32)$$

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

Si se aplica el promedio de Favre a las ecuaciones instantáneas de continuidad, cantidad de movimiento, energía y especies químicas, se obtienen las siguientes ecuaciones [2.11]:

$$\frac{\partial \overline{\rho}}{\partial t} + \nabla \cdot (\overline{\rho\vec{v}}) = 0 \quad (2.33)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \tilde{v}) + \nabla \cdot (\rho \tilde{v} \tilde{v}) = -\nabla p + \nabla \cdot \underbrace{\left[\mu \left(\nabla \tilde{v} + (\nabla \tilde{v})^T - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \tilde{v}) \tilde{\delta} \right) \right]}_I + \underbrace{\nabla \cdot (\rho \tilde{v}'' \tilde{v}'')}_{II} + \rho \tilde{g} \quad (2.34)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \tilde{Y}_\alpha) + \nabla \cdot (\rho \tilde{v} \tilde{Y}_\alpha) = \nabla \cdot \underbrace{\Gamma_\alpha \nabla \tilde{Y}_\alpha}_I + \underbrace{\nabla \cdot (\rho \tilde{v}'' \tilde{Y}_\alpha'')}_{II} + \tilde{S}_\alpha \quad (2.35)$$

Si se aplica el promedio de Favre en la ecuación homogénea se obtiene:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \tilde{\phi}_z) + \nabla \cdot (\rho \tilde{v} \tilde{\phi}_z) = -\nabla \cdot \underbrace{(\Gamma \nabla \tilde{\phi}_z)}_I + \underbrace{\nabla \cdot (\rho \tilde{v}'' \tilde{\phi}_z'')}_{II} \quad (2.36)$$

Las ecuaciones anteriores tienen una forma idéntica a las correspondientes ecuaciones instantáneas, con un término adicional $(u''_i \Phi'')$, que involucra las fluctuaciones de la velocidad y el escalar Φ , y que representa físicamente el transporte convectivo de Φ por movimientos turbulentos. En flujos turbulentos, el término de difusión laminar (*I*), de las ecuaciones anteriores, es generalmente despreciable frente al término de difusión turbulenta (*II*). Por lo tanto, las ecuaciones (2.26), (2.27), (2.28) y (2.29) se escriben como:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \tilde{v}) = 0 \quad (2.37)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \tilde{v}) + \nabla \cdot (\rho \tilde{v} \tilde{v}) = -\nabla p + \nabla \cdot (\rho \tilde{v}'' \tilde{v}'') + \rho \tilde{g} \quad (2.38)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \tilde{Y}_\alpha) + \nabla \cdot (\rho \tilde{v} \tilde{Y}_\alpha) = \nabla \cdot (\rho \tilde{v}'' \tilde{Y}_\alpha'') + \tilde{S}_\alpha \quad (2.39)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{\phi}_z) + \nabla \cdot (\bar{\rho}\bar{v}\phi_z) = \nabla \cdot (\bar{\rho}\bar{v}''\tilde{\phi}_z'') \quad (2.40)$$

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

Los flujos turbulentos $\bar{v}''\Phi''$ de la ecuaciones (2.31), (2.32), y (2.33) son términos desconocidos que requieren modelización. El cierre del término $\bar{\rho}\bar{v}''\bar{v}''$ de la ecuación media de cantidad de movimiento (46) se trata en el apéndice A.

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

Para poder hacer el cierre de las ecuaciones (2.30), (2.31), (2.32), y (2.33), hace falta también conocer el valor medio de la tasa de reacción de la especie química \bar{S}_α y la densidad $\bar{\rho}$. La densidad se puede escribir como:

$$\bar{\rho} = \rho(\tilde{T}, \tilde{\phi}_1, \dots, \tilde{\phi}_N) \quad (2.41)$$

Capítulo III

MÉTODO DE SOLUCIÓN

El desarrollo de la dinámica de fluidos computacional, así como el rápido avance de los medios computacionales, han ocasionado que los investigadores desarrollen alternativas para dar solución a las ecuaciones presentadas en el capítulo anterior, las cuales componen la dinámica del flujo medio. Una de estas alternativas es el Método de los Volúmenes Finitos, este es más simple y numéricamente más eficiente, además se ha convertido en una de las técnicas más utilizadas en las simulaciones en tres dimensiones.

Este método está relacionado con otros métodos numéricos de aproximación como lo son los de elementos finitos y diferencias finitas. En este capítulo se presenta dicho método de solución.

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 $\bar{\phi}$:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\bar{\phi}) + \nabla \cdot (\rho\vec{v}\bar{\phi}) - \nabla \cdot (\Gamma_{\phi}\nabla\bar{\phi}) = \bar{S}_{\phi} \quad (3.1)$$

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 $\bar{\phi}$. En el caso de la ecuación de continuidad $\bar{\phi} = 1$.

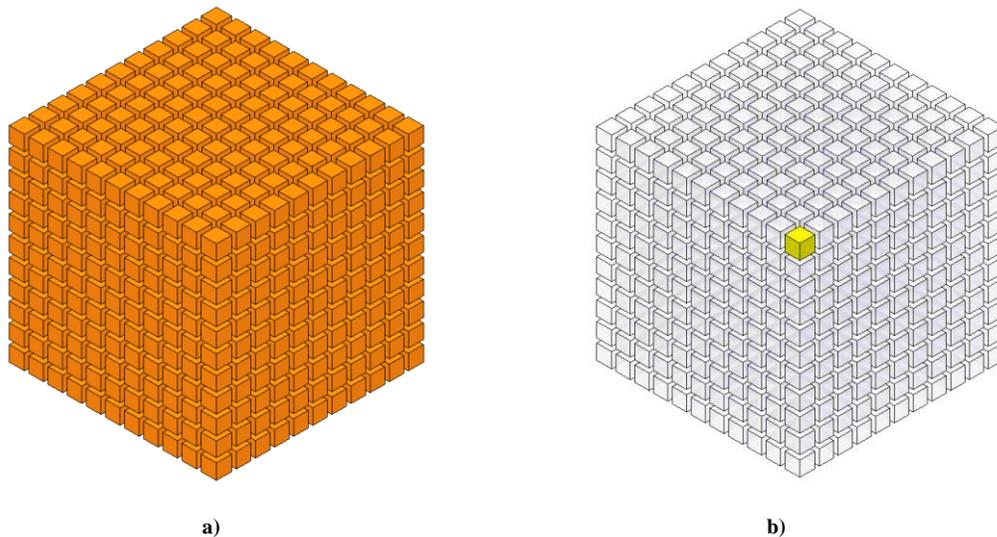


Figura 3.1 Representación del sistema: a) Discretización en volúmenes finitos y b) Volumen de control (celda).

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 $\bar{\phi}$ para un determinado grupo de puntos nodales. Esta ecuación algebraica expresa el principio de conservación de $\bar{\phi}$ 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:

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

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. La deducción detallada de la ecuación (2) puede consultarse en ([9] y [4]), así como en un gran número de textos de dinámica de fluidos computacional.

En el caso de una malla cartesiana, escalonada (staggered) y uniforme (celdas de iguales dimensiones espaciales), se puede emplear por sencillez un volumen de control bidimensional, tomando el espesor de la celda en dirección z como 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 tres direcciones:

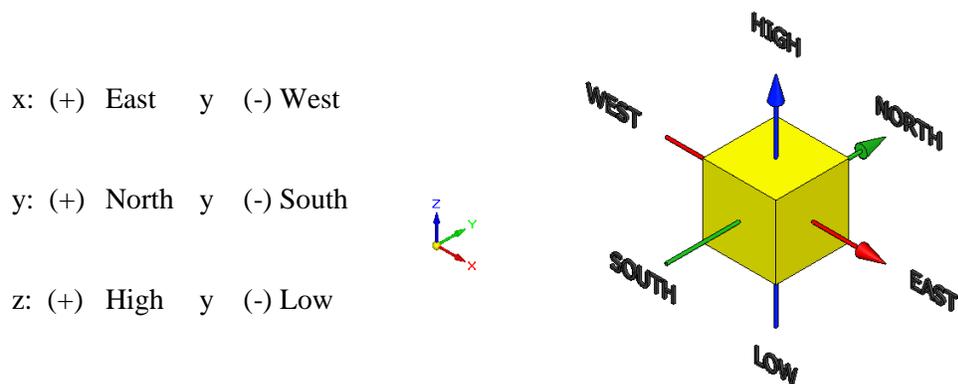


Figura 3.2 Diagrama esquemático del Punto P de una celda y la dirección de sus vecinas.

Las caras de la celda se nombran con la misma nomenclatura, pero con letras minúsculas. A su vez, el tiempo también se discretiza. Las celdas en la dirección temporal se llaman intervalos temporales. La celda P en el paso temporal se nota como T .

A continuación, se presentan los términos de la ecuación discretizada (3.2).

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

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

Donde \bar{v}_i es la velocidad en la cara i , δ_i es la distancia entre los nodos que incluyen la cara i y Pe es de número de Peclet, que es una relación entre la convección y la difusión. 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 α_i de la ecuación (3.2) son:

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

Los valores F y D en la cara de la celda de la ecuación (3.4) son:

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

donde Δ_i es la longitud de la cara i .

Para determinar F_i se necesita conocer ρ y \bar{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, $\bar{\phi}$ en la cara de la celda. La velocidad \bar{v}_i está calculada en la cara de la malla escalonada; pero ρ y $\bar{\phi}$ están calculados en el nodo y necesitan ser interpolados a la cara para calcular los coeficientes α_i de la ecuación discretizada (3.1).

La obtención de estas variables en la cara de la celda es importante para la precisión y convergencia de la solución. El cálculo de ρ y $\bar{\phi}_i$ da lugar a los llamados esquemas de discretización. La función $f(|Pe|)$ de la ecuación (4) depende del esquema de interpolación; por ejemplo, en el esquema de diferencias desplazadas, $f(|Pe|) = 1$. Para el sistema híbrido [9]:

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

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

El coeficiente para el término transitorio es:

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

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:

$$\bar{S}_\phi = \bar{S}_{\phi,C} + \bar{S}_{\phi,v} \check{\phi}_p \quad (3.9)$$

donde el término $\bar{S}_{\phi,v}$ se elige de acuerdo a la relación existente entre \bar{S}_ϕ y $\bar{\phi}$, 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:

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

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

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 $\bar{\phi}$, 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), ([10], [9] y [8]). El algoritmo utilizado en esta tesis para resolver el problema de acoplamiento velocidad-presión pertenece a esta familia.

El proceso de solución de este sistema de ecuaciones es iterativo y durante éste, las ecuaciones del sistema, en general, no se cumplen; el balance entre la parte izquierda y derecha de la ecuación se denomina residuo. La convergencia del proceso iterativo se da cuando los residuos disminuyen. Para procurar acelerar esta convergencia, se utiliza un método de relajación de algunas de las variables dependientes y propiedades. Se emplean dos tipos de relajación: la inercial y la lineal. La relajación inercial se emplea para las velocidades y los parámetros de turbulencia, y aumenta la diagonal de la matriz de coeficientes el agregar a la ecuación de cualquier variable $\bar{\phi}$, el término fuente:

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

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:

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

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 [12], para resolver las ecuaciones que describen la aerodinámica del flujo, recordando que son, la de continuidad, de cantidad de movimiento, densidad de la mezcla y de turbulencia.

3.2 Método BFC

La estructura o topología de una malla consiste en la forma de disponer los puntos nodales en el dominio considerado. Cuando se utiliza el método de los volúmenes finitos, el método particular de discretización de las ecuaciones puede determinar el método del mallado.

En esta Tesis trabajaremos con un mallado conocido como coordenadas ajustadas al cuerpo (Body Fitted Coordinate-BFC), debido a su simplicidad. Este mallado adopta la geometría del volumen de computacional. Es el método más indicado cuando la geometría (bidimensional o tridimensional) está influenciada por configuraciones cúbicas o paralelepípedas.

El uso de las mallas ajustadas al cuerpo (BFC) se justifica cuando interesa tener una malla más fina en ciertas regiones del dominio de cálculo, en las que pueden existir problemas de convergencia o exactitud en los resultados. En otras regiones, sin embargo, la convergencia es rápida, y el tiempo de cálculo necesario es menor; por ello, no es acertado mantener una malla tan fina en estas zonas.

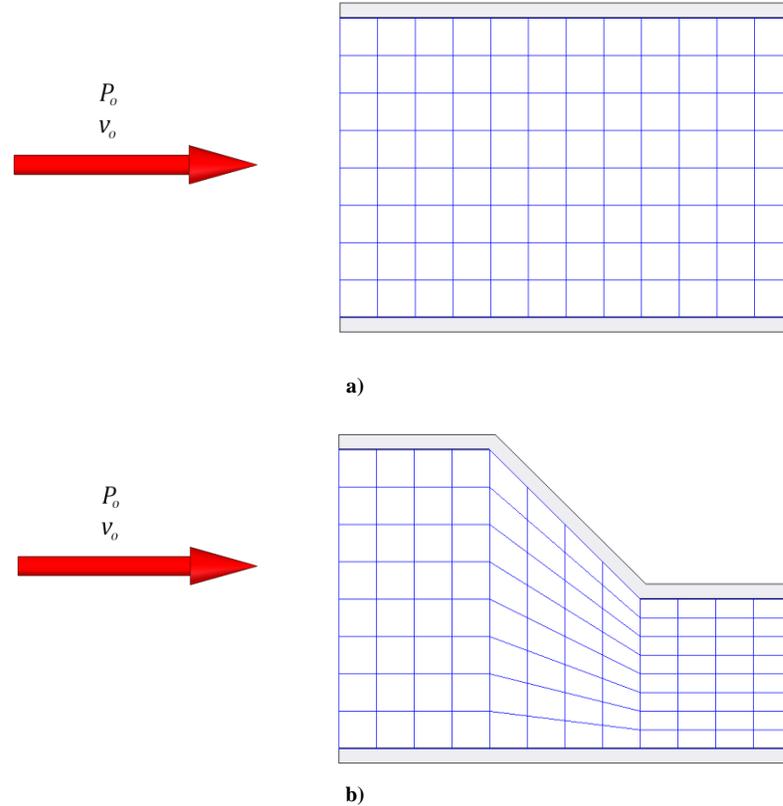


Figura 3.3 Volúmenes de computacionales bidimensionales: a) Malla cartesiana y b) Malla BFC.

En la Figura 3.3a, podemos observar que el volumen de cálculo, no tiene algún área o sección en la cual se deba realizar un análisis detallado y una malla cartesiana se ajusta a las necesidades de esa simulación, por otra parte, en geometrías más complejas nos apoyamos en el mallado BFC para realizar un mejor análisis en secciones que sufren cambios que afectan el desarrollo del flujo.

3.3 Término transitorio

Para el límite del volumen de control, la discretización llega a ser.

$$\iint \frac{\partial}{\partial t} (\rho \phi) dx dy = \frac{(\rho \phi)_P^n - (\rho \phi)_P^o}{\Delta t} A_P \quad (3.14)$$

Donde los subíndices n y o representan los nuevos y viejos valores para un tiempo de paso Δt y $A_P = \Delta x_P \Delta y_P$.

3.4 Término Convectivo

El flujo convectivo puede ser evaluado como:

$$\int \int \nabla \cdot (\rho \vec{v} \bar{\phi}) dx dy = c_n \phi_n - c_s \phi_s + c_e \phi_e - c_w \phi_w \quad (3.15)$$

Donde ϕ_n, ϕ_s, ϕ_e y ϕ_w , son los valores de ϕ al norte, sur, este y oeste.

3.5 Término Difusivo

El término difusivo puede ser integrado como:

$$\int \int \nabla \cdot (\Gamma_\phi \nabla \phi) dx dy = \left[q_n \Delta x_p \Gamma_{\phi_n} \left(\frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_n - q_s \Delta x_p \Gamma_{\phi_s} \left(\frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_s \right] + \left[q_e \Delta x_p \Gamma_{\phi_e} \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e - q_w \Delta x_p \Gamma_{\phi_w} \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_w \right] \quad (3.16)$$

La tarea clave en la discretización del término difusivo es la precisa evaluación de los gradientes de la cara de la celda de ϕ .

3.6 Término Fuente

$$\int \int \bar{S}_\phi dx dy = S_\phi A_p \quad (3.17)$$

Habiendo evaluado la convección, el flujo difusivo y los términos fuente, las ecuaciones discretizadas para ϕ pueden ser escritas en forma general.

$$a_p \phi_p = \sum a_{nb} \phi_{nb} + S_p \quad (3.18)$$

Donde el subíndice nb indica los vecinos de la celda "P". Las detalladas expresiones del coeficiente a_p y a_{nb} en la ecuación (3.25) dependen del esquema particular adoptado para discretizar el término convectivo.

Capítulo IV

CONFIGURACIÓN SIMULADA

Para este capítulo se presenta la configuración simulada, que consiste en una descarga de combustible que arrastra aire atmosférico durante su movimiento hacia el mezclador, para finalmente salir hacia la descarga del quemador como una mezcla aire y combustible. El combustible es gas n-butano.

Las ecuaciones que permiten describir las condiciones del flujo en el sistema son las ecuaciones de transportes basadas en la aproximación de ecuaciones promediadas, las cuales son presentadas como se muestra en el capítulo 2 y resueltas mediante el método de volúmenes finitos que se presenta en el capítulo 3.

4.1 Consideraciones

El análisis del flujo en esta Tesis se realiza para el mezclador de un quemador del tipo atmosférico, en la Figura 4.1 se muestran los componentes más significativos del sistema a simular. En la parte superior del arreglo se tiene una tapa que permite que la mezcla aire combustible salga hacia la parte periférica del quemador, en donde se llevará a cabo la combustión de la misma. En la parte media está el mezclador, donde se combinará el combustible con el aire atmosférico circundante. Finalmente, en la parte inferior se encuentra el inyector del combustible.

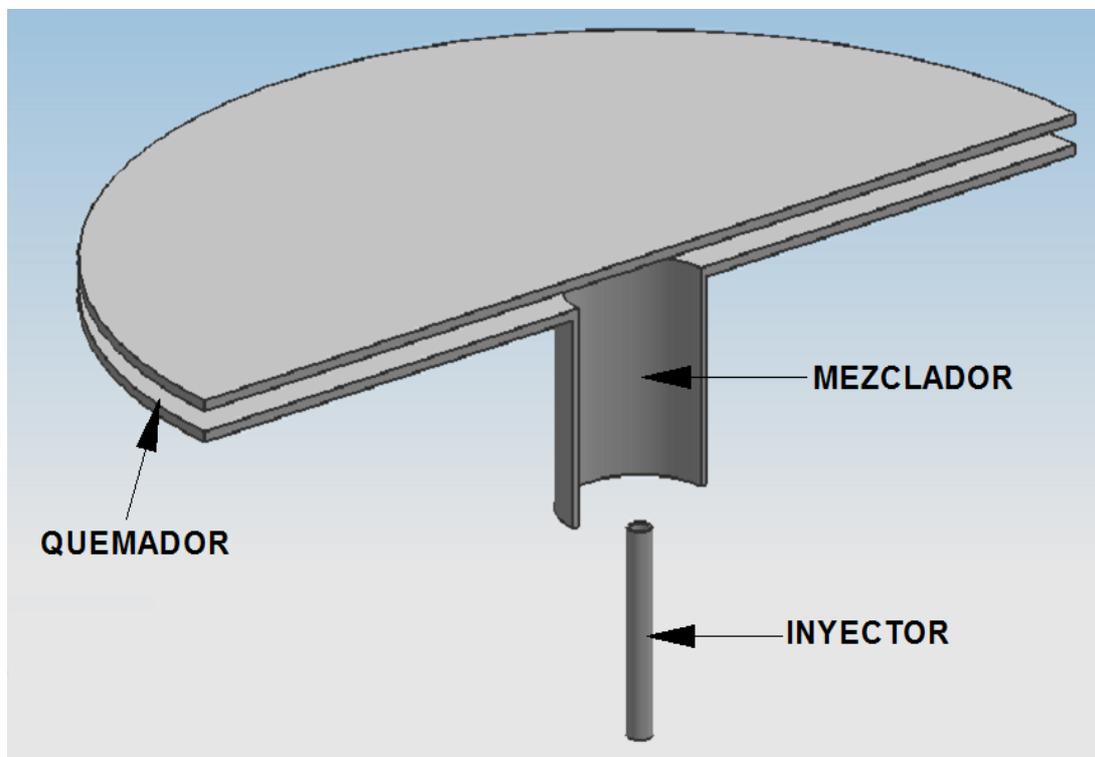


Figura 4.1 Representación tridimensional del mezclador.

Aunque el volumen de cálculo puede considerarse pequeño por sus dimensiones, la cantidad de celdas necesarias para el análisis de la dinámica del flujo incrementa el tiempo de simulación,

El resolver modelos de flujo para geometrías tridimensionales es difícil debido a las limitaciones en la potencia de las computadoras. Por lo tanto, a veces, es necesario realizar diversas simplificaciones para reducir el tiempo de trabajo.

También es punto de análisis, para la adecuada realización de las simulaciones, determinar la distancia a la que deben encontrarse las fronteras y sus condiciones, de tal forma que no tengan algún efecto sobre los resultados.

4.2 Parámetros del quemador

Caso base

Una geometría común para el mezclador del quemador atmosférico es un perfil recto (cilindro), que es la considera en esta tesis.

Adicionalmente, se considera que la velocidad del combustible a la salida del inyector es de $v = 20 \text{ [m/s]}$. El fluido de trabajo es n-butano, con una densidad $\rho = 2.38 \text{ [kg/m}^3\text{]}$. El fluido se considera como incompresible y en estado permanente.

Las medidas para el quemador se consideran de:

- a) Diámetro del quemador = 300 [mm]
- b) Longitud de separación entre tapa y mezclador = 15[mm]
- c) Longitud del mezclador = 33[mm]
- d) Diámetro del mezclador = 20 [mm]
- e) Longitud del inyector = 100[mm]
- f) Diámetro del inyector = 1[mm]
- g) Longitud entre boquilla y mezclador = 10 [mm]

Las medidas del arreglo para el análisis de mezclador del caso base se muestran en la Figura 4.2

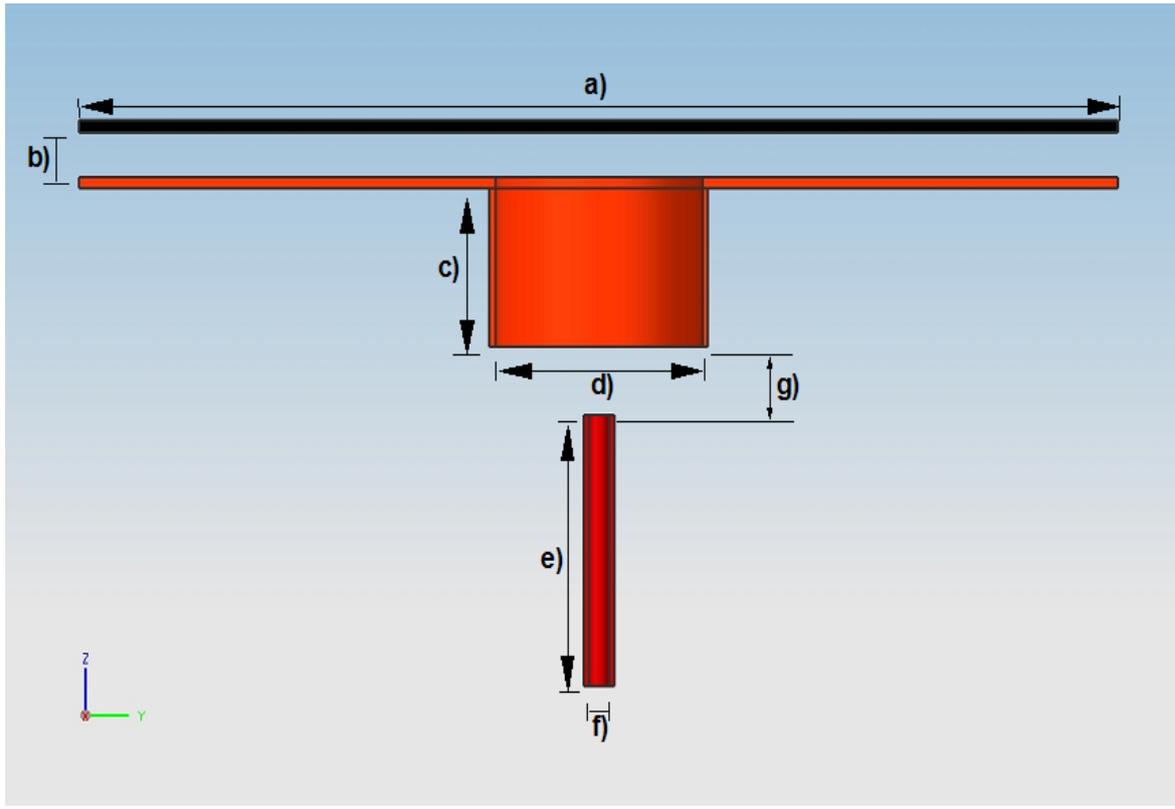


Figura 4.2 Dimensiones del quemador, todas las dimensiones en mm.

A continuación, para estudiar su efecto en la cantidad de aire arrastrado durante el movimiento del combustible se varía:

- Velocidad de entrada del combustible
- Diámetro del mezclador
- Longitud del mezclador
- Distancia entre el inyector y el mezclador

Variación de la velocidad del combustible descargado

Para este primer caso de análisis, todas las medidas del quemador permanecen constantes y se varía solamente la velocidad de entrada del combustible por el inyector de 1 a 30 m/s.

Variación del diámetro del mezclador

Para estudiar su efecto en el arrastre de aire se varía el diámetro del mezclador como se muestra en la figura 4.3. Los diámetros del mezclador se varían para los casos mostrados en la tabla 1. Las otras variables permanecen constantes, tales como la velocidad de descarga del combustible, de 20 m/s.

Caso	Diámetro [m]
1	.01773
2(caso base)	.02

3	0.0259
4	0.0298
5	0.0337
6	0.0376

Tabla 1 Diámetros para cada caso

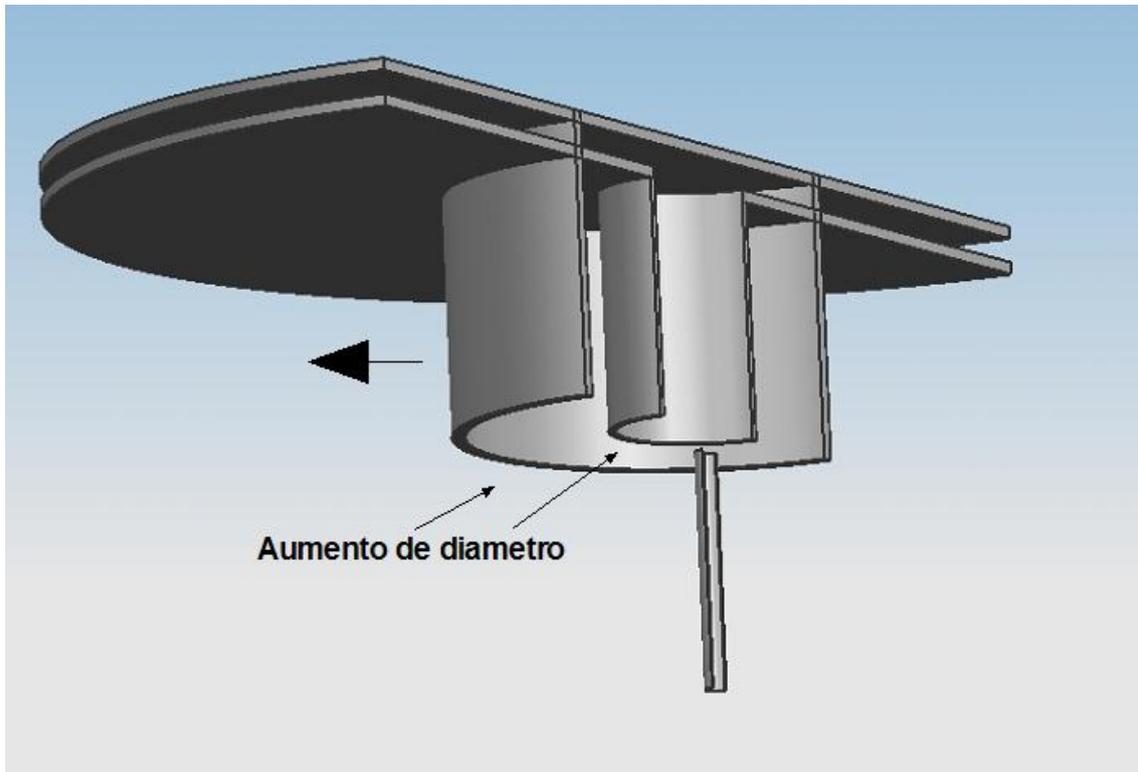


Figura 4.3 Representación del aumento de diámetro

Variación de la distancia entre el inyector y el mezclador

Para esta tercera simulación, se varía la distancia entre el inyector y el mezclador como se muestra en la figura 4.4, y de acuerdo a los casos mostrados en la tabla 2. Las demás dimensiones permanecen constantes, como por ejemplo la velocidad de descarga del combustible, de 20 m/s.

Caso	distancia [m]
1(caso base)	0.01
2	0.008
3	0.006
4	0.004
5	0.002
6	0

Tabla 2 Longitudes para cada caso

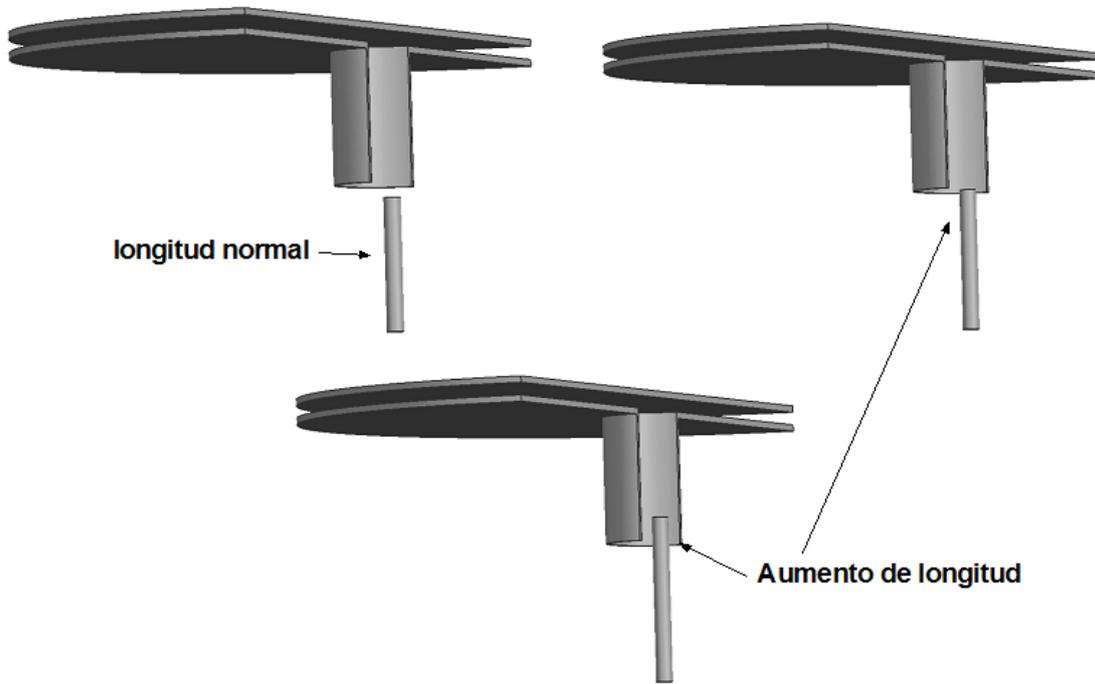


Figura 4.4 Aumento de longitud del inyector

Variación de la longitud del mezclador.

En este cuarto caso de simulación, se varía la longitud del mezclador, como se muestra en Figura 4.5, teniendo en cuenta la misma distancia entre el tubo de inyección del combustible y el mezclador. Las longitudes que se varían se muestran en la tabla 3. Las demás dimensiones permanecen constantes, como la velocidad del combustible, de 20 m/s.

Caso	Longitud mezclador [m]
1(caso base)	0.033
19	0.0297
2	0.0264
3	0.0231
4	0.0198
5	0.0165

Tabla 3 Longitudes para cada caso del mezclador y el inyector

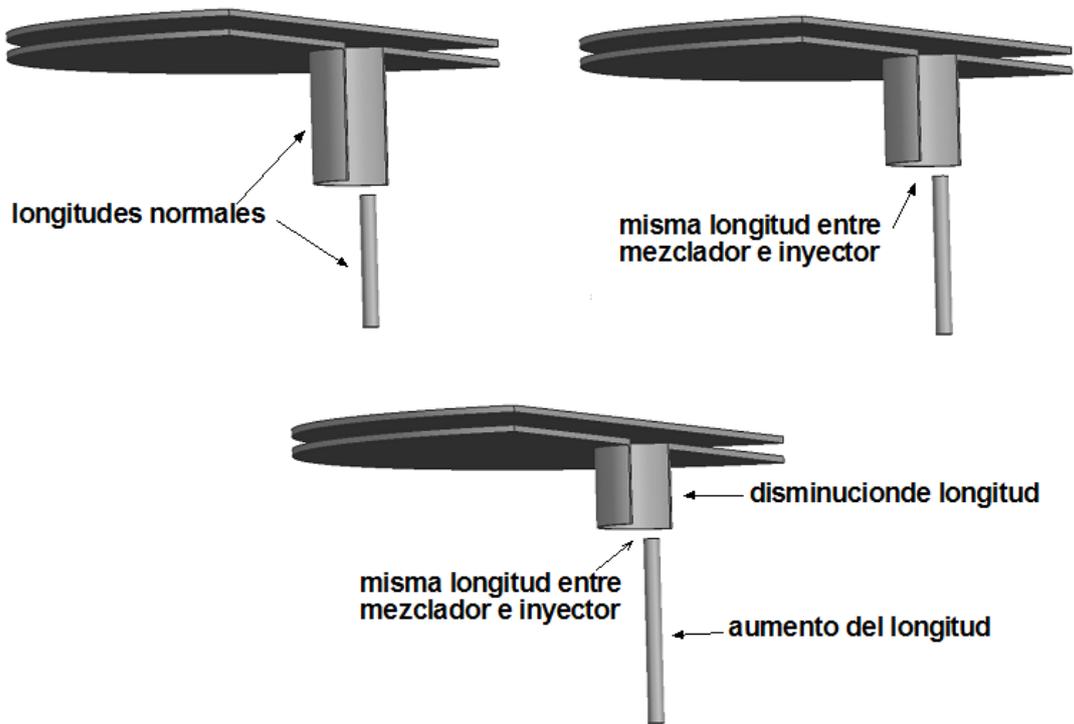


Figura 4.5 Diferentes longitudes, misma distancia entre mezclador e inyector

Para terminar con la presentación de los casos se muestra el punto de monitoreo en el código PHOENICS (Figura 4.6), donde observamos que el punto de monitoreo que se encuentra a la salida del mezclador exactamente en la celda 40y y 90z, esto es para todos los casos de simulación que se tratan en esta tesis.

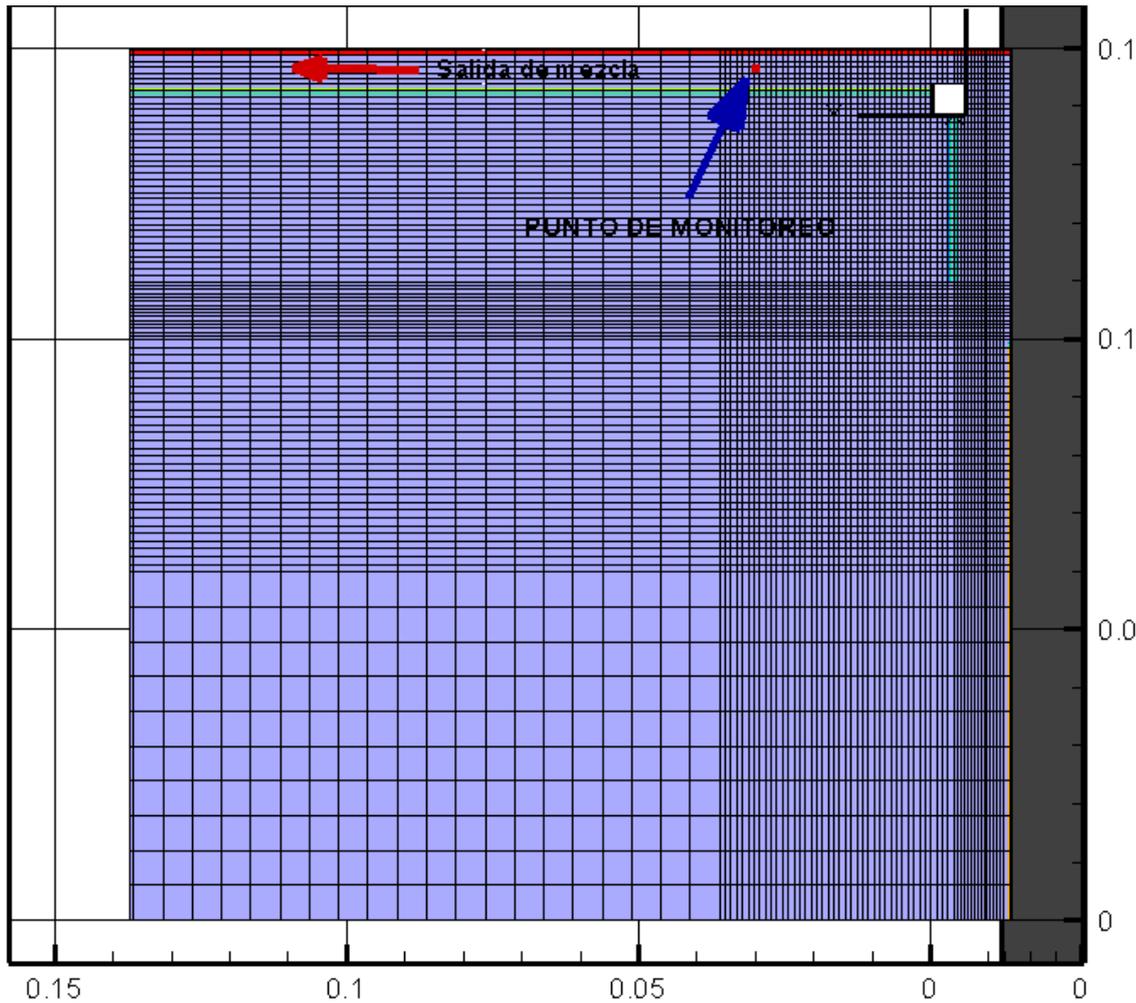


Figura 4.6 Punto de monitoreo

4.3 Detalles Numéricos

La simulación se realiza en tres dimensiones (3D), con la técnica de mallado cilíndrico para todos los casos. La intención de este trabajo es simular el flujo de aire arrastrado al interior del mezclador.

Para los arreglos numéricos, la turbulencia se simula con el modelo $\kappa - \varepsilon$. La descripción del sistema se captura en el archivo **Q1**, en el cual se incluyen las condiciones iniciales y de frontera, así como las variables a resolver tales como la velocidad, la presión, la energía cinética turbulenta, además del sistema de discretización. El archivo **Q1** es una interface entre el usuario y el código numérico.

4.4 Mallado en coordenadas cilíndricas

Para presentar de manera sencilla el mallado del volumen de cómputo, se explicaran a continuación las características de discretización que se ha utilizado para las simulaciones, mostrando las zonas de interés, así como la densidad de mallado y dimensiones para las direcciones en $x=angular$, $y=radial$, y $z=axial$. Véase tablas 1, 2 y 3

	No. Región	Celdas	Longitud [rad]
Eje X	1	16	1.6

Tabla 1. Discretización de eje x.

	No. Región	Celdas	Longitud [m]
Eje Y	1	1	.0005
	2	1	0.001
	3	15	0.0085
	4	1	0.001
	5	40	0.039
	6	20	0.1

Tabla 2. Discretización de eje y.

	No. Región	Celdas	Longitud [m]
Eje Z	1	10	0.06
	2	30	0.04
	3	15	0.01
	4	30	0.033
	5	1	0.001
	6	5	0.005
	7	1	0.001

Tabla 3. Discretización de eje z.

De esta manera, para el perfil recto se obtiene un volumen computacional con 16 x 78 x 92 celdas del mallado cilíndrico para la sección recta y longitudes de 1.6 [rad] x .15 [m] x 0.15 [m], para los ejes x, y y z, respectivamente. Las Figura 4.7, 4.8 y 4.9 muestran un esquema de los planos para cada perfil.

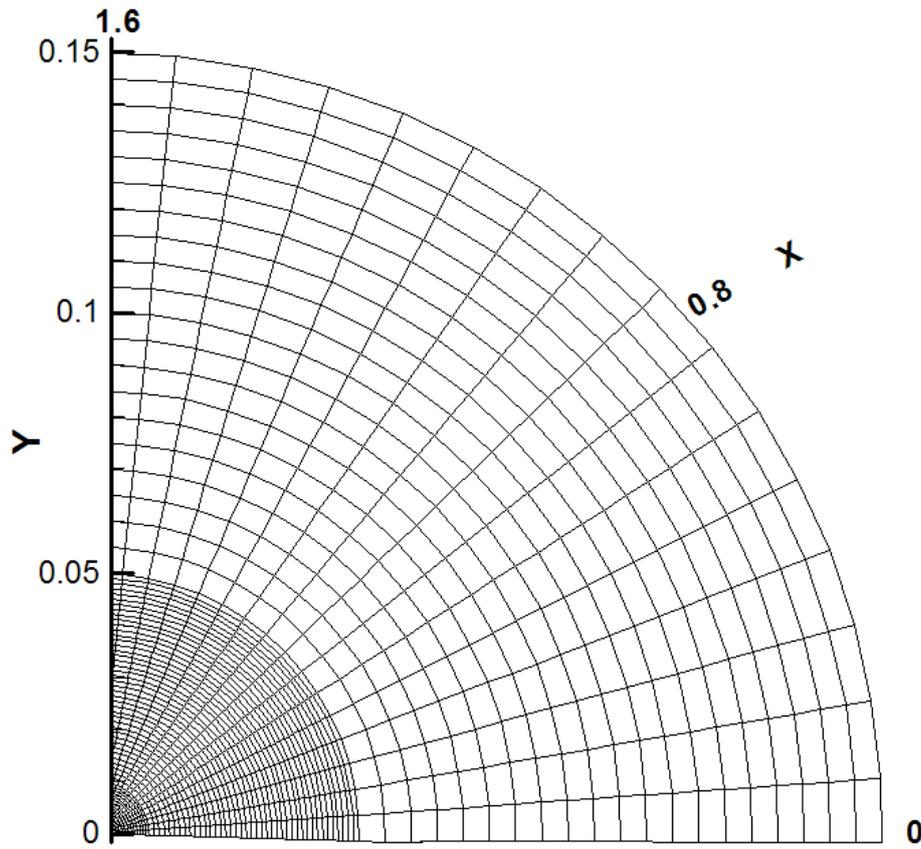


Figura 4.7 Mallado en X

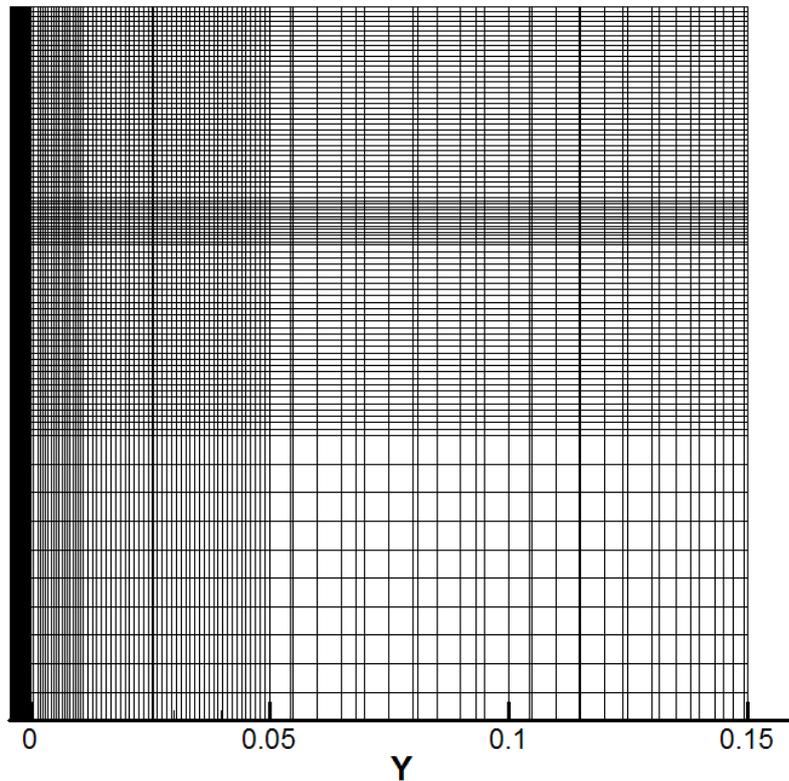


Figura 4.8 Mallado en Y

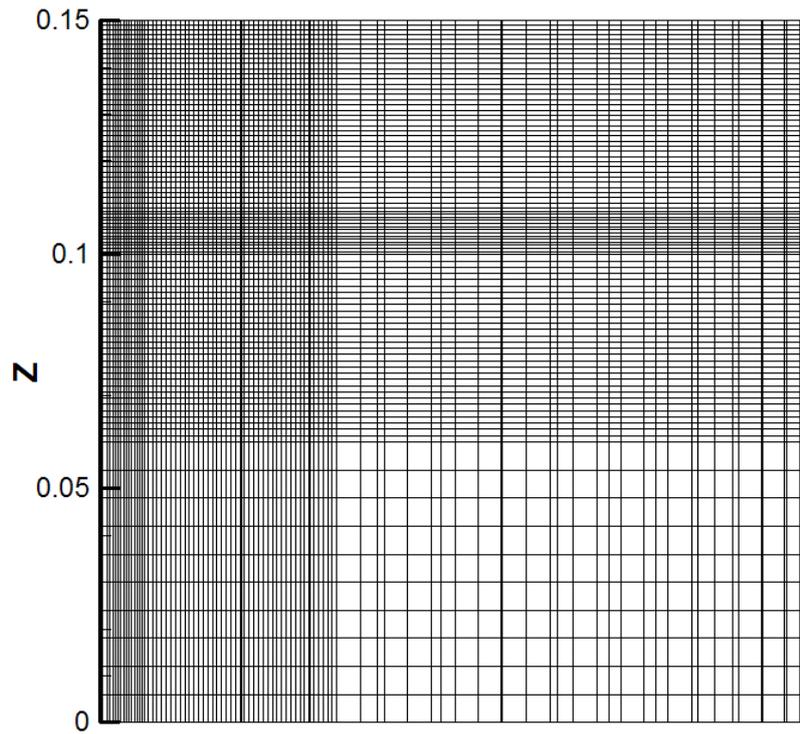


Figura 4.9 Mallado en Z

Al unir las vistas de los planos podemos generar una pieza tridimensional que esquematiza el mallado de los dominios, Figura 4.10

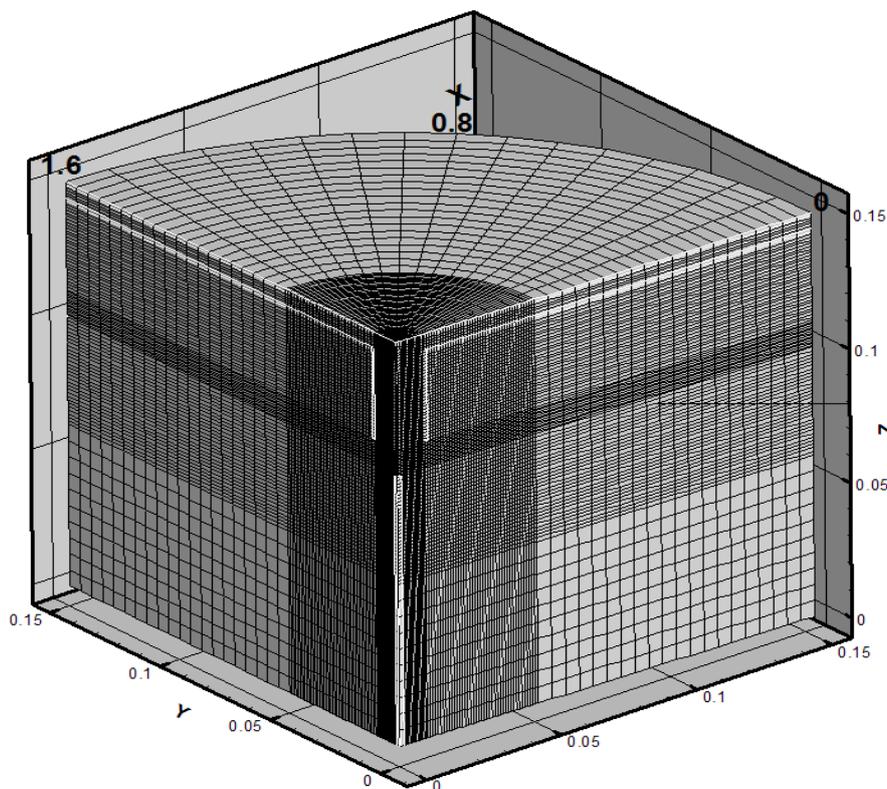


Figura 4.10 Esquema del mallado para el dominio del mezclador cilíndrico

El bloque de celdas se lleva a cabo para darle la configuración del sistema a simular.

En este caso aunque las dimensiones son pequeñas para el mallado, el mismo es demasiado grande para llevar a cabo la simulación completa del quemador, por lo solamente se simula una cuarta parte del sistema a simular, que permitirá menos tiempo y memoria de cálculo.

Capítulo V

INTRODUCCION

En este capítulo se presentan los resultados cualitativos de la simulación numérica con las condiciones para el caso base. Después se presenta el efecto en el arrastre de aire, al variar los parámetros:

- Velocidad de entrada del combustible
- Diámetro del mezclador
- Distancia en el mezclador y la longitud del mezclador
- Longitud del mezclador

5.1 RESULTADOS DE LA SIMULACIÓN NUMÉRICA

Resultados cualitativos del caso base

La configuración simulada para el caso base se muestra esquemáticamente en la figura 5.1.

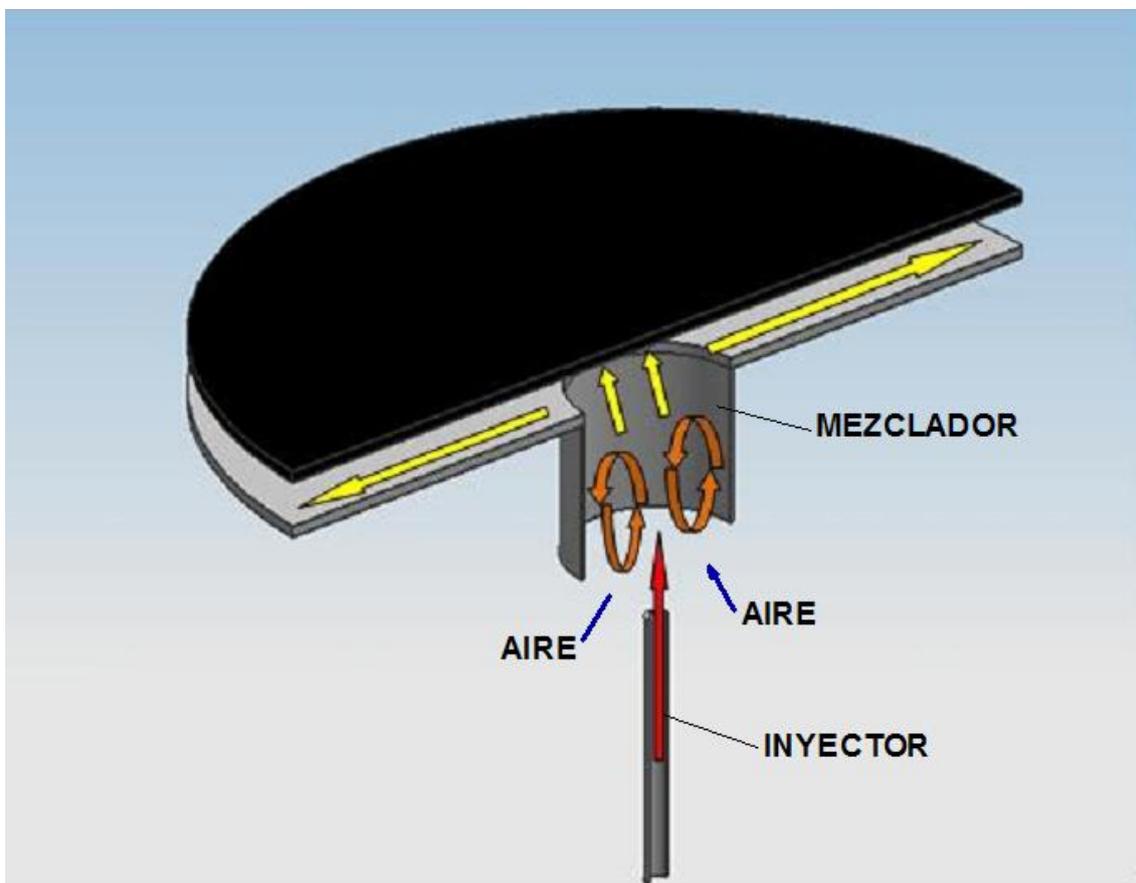


Figura 5.1 Representación esquemática del flujo en el mezclador.

Como ya se había presentado en el capítulo 4, las condiciones para este caso son: velocidad del combustible a la salida del inyector de $v = 20 \text{ [m/s]}$, fluido de trabajo es n-butano, con una densidad $\rho = 2.38 \text{ [kg/m}^3\text{]}$.

5.2 Campo de presiones

Los contornos de presión para el caso base se muestra en la figura en la Figura 5.3

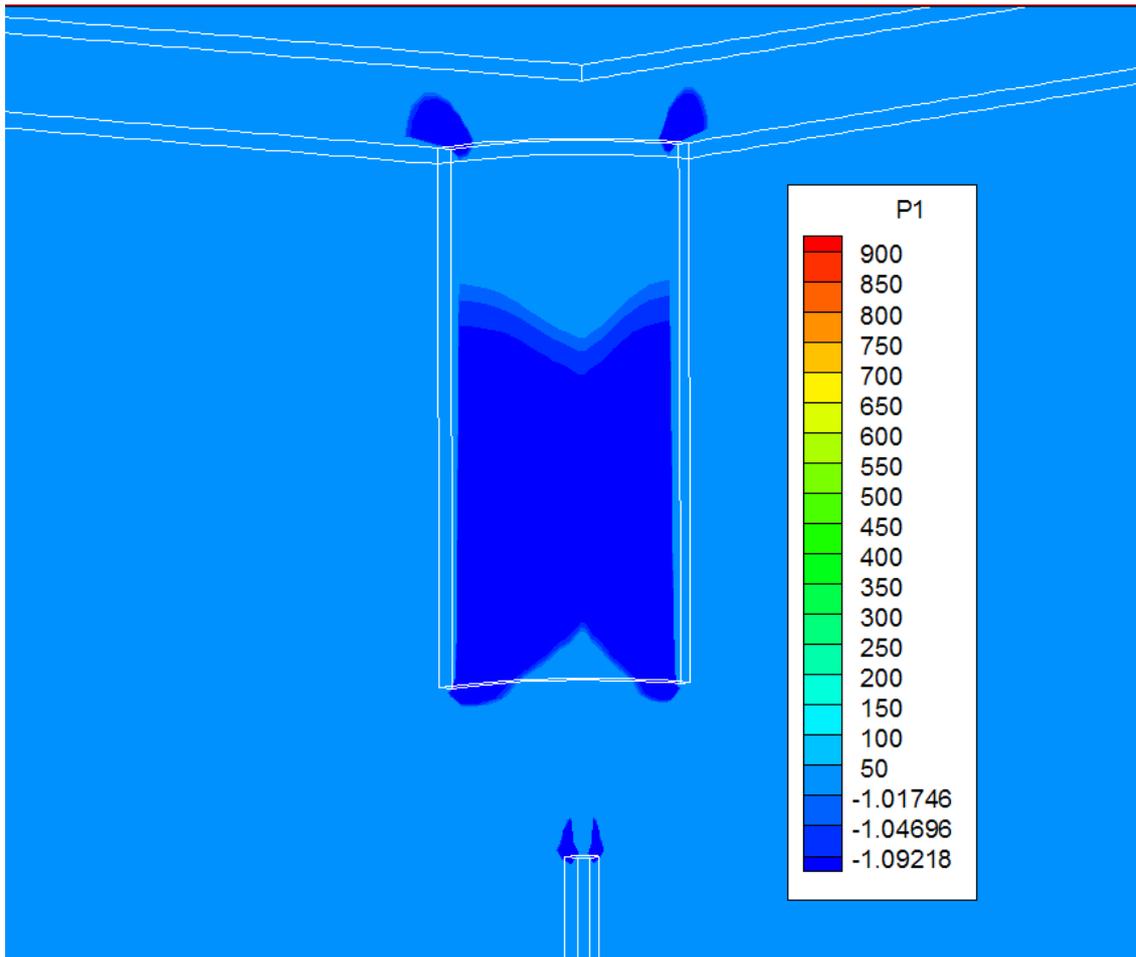


Figura 5.3 Contornos de presión.

Una zona de baja presión es observada entre el mezclador y el inyector de combustible, que es consecuencia del movimiento del combustible y en esta zona de baja presión es donde se presenta la ingestión de aire atmosférico.

5.3 Campo de velocidades

La figura 5.3 muestra el campo de velocidad para el caso base, aquí el flujo de combustible inicia su movimiento en el inyector, conforme comienza a salir de él y a aumentar el área transversal su velocidad cae progresivamente, y al entrar en contacto con la atmósfera provoca el arrastre de aire debido a su movimiento. Con el arrastre de aire la mezcla comienza para seguir su homogenización en el mezclador y finalmente salir por el quemador.

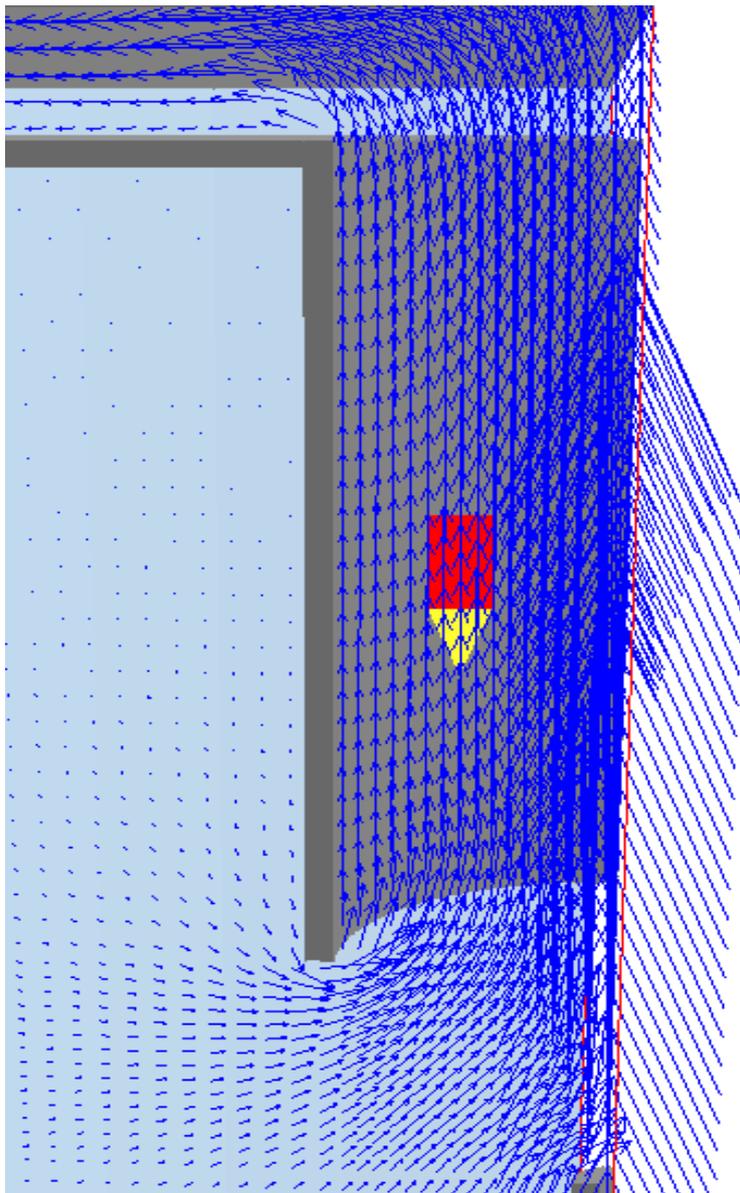


Figura 5.3

Los contornos para el campo de velocidades se presentan en la Figura 5.5.

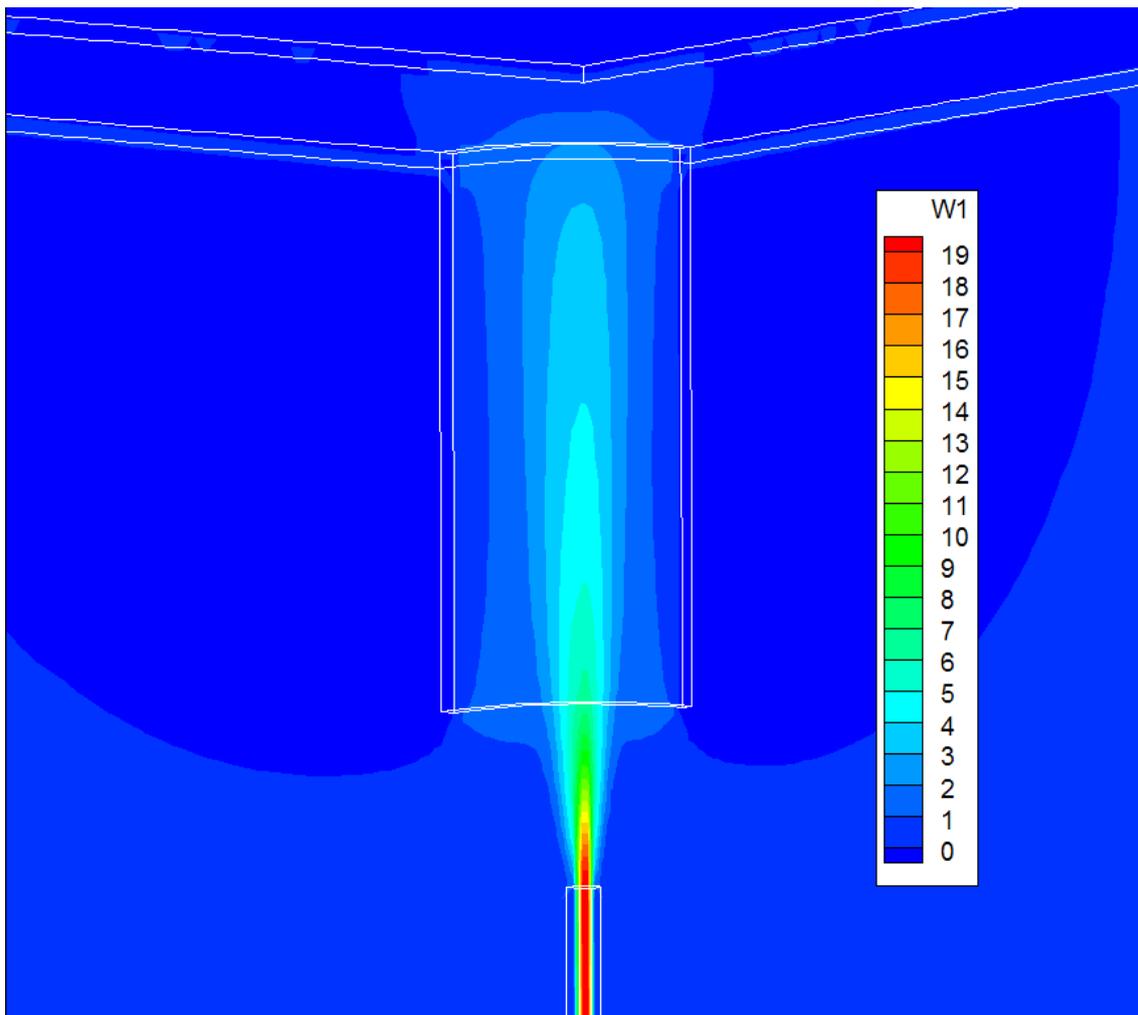


Figura 5.5 Contornos de velocidad.

5.4 Energía Cinética Turbulenta

La figura 5.9 muestra los contornos de energía cinética turbulenta. La energía cinética turbulenta es una medida de la intensidad de turbulencia que está presente en el fluido, en este caso se presenta con mayor intensidad en la zona que anteriormente llamamos sección libre, debido a la interacción entre los dos fluidos, y dado este fenómeno se provoca el inicio de la mezcla.

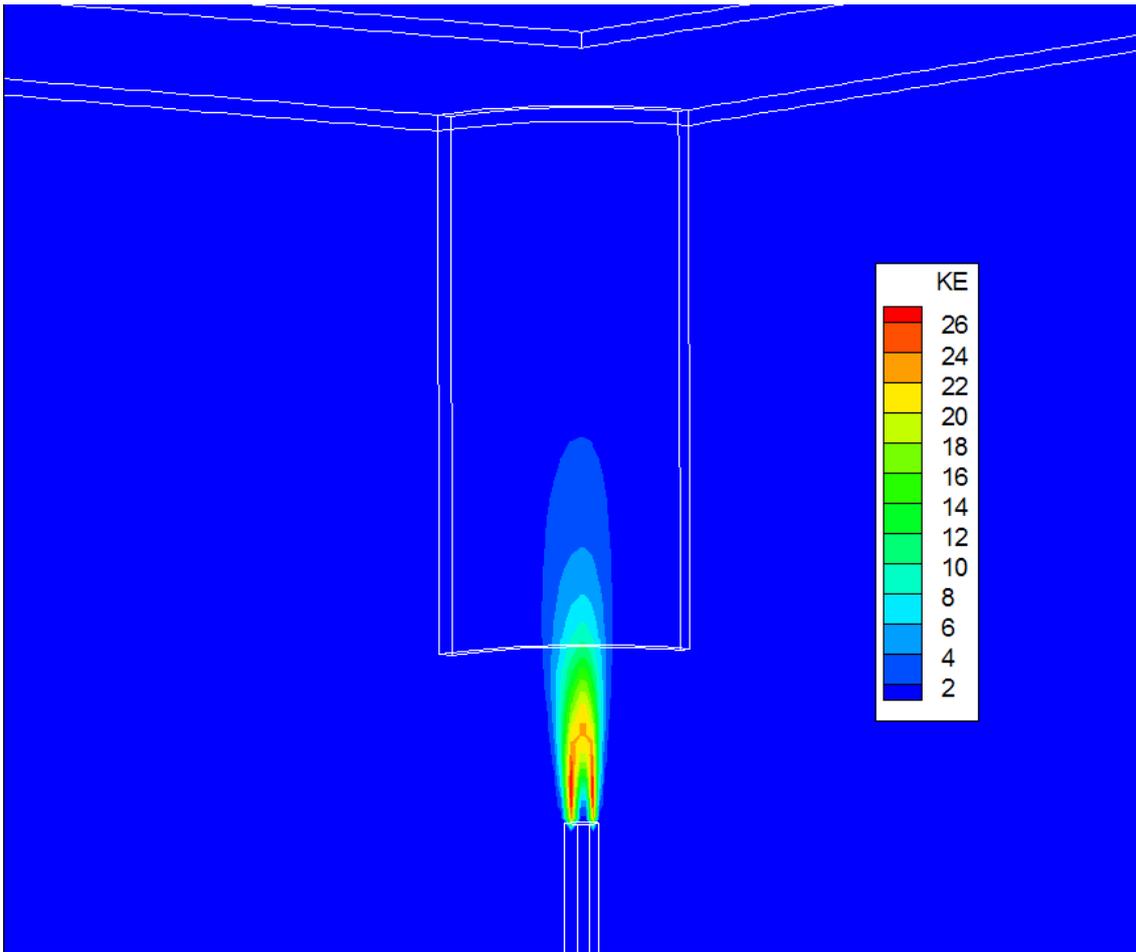


Figura 5.9 Energía cinética turbulenta.

5.5 Tasa de disipación

La tasa de disipación de energía turbulenta nos indica la disipación de la energía turbulenta y se da principalmente en la sección de arrastre de aire atmosférico. Los contornos para la tasa de disipación se presentan en la Figura 5.10.

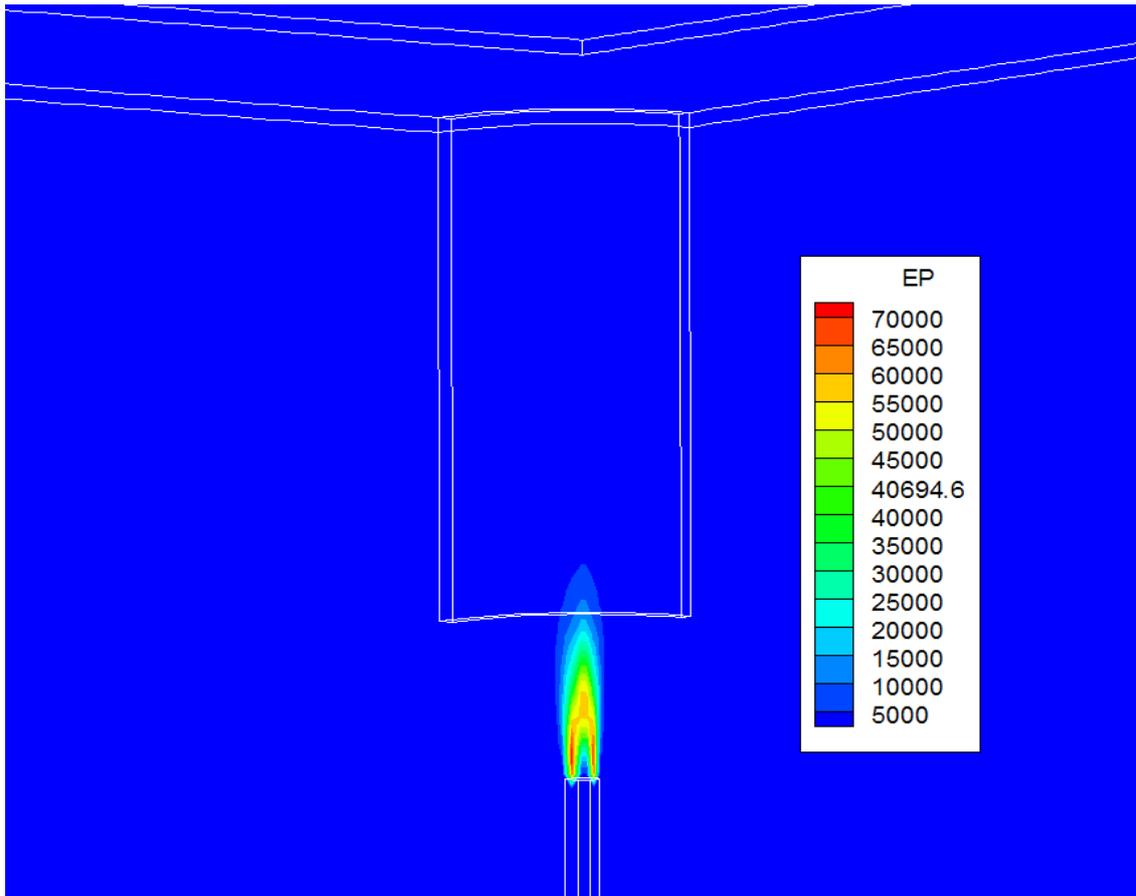


Figura 5.10 Tasa de disipación.

Es de esperarse que el valor más alto para disipación de la energía turbulenta se presente en la incorporación del aire arrastrado principalmente en esta zona.

5.6 Fracción másica de combustible

La figura 5.12 muestra los contornos de concentración de combustible, con la entrada de aire atmosférico se produce una mezcla entre éste y el combustible que se está descargando por el inyector. La concentración de combustible va disminuyendo debido a esta mezcla y alcanza un valor de 0.06 en la salida del quemador.

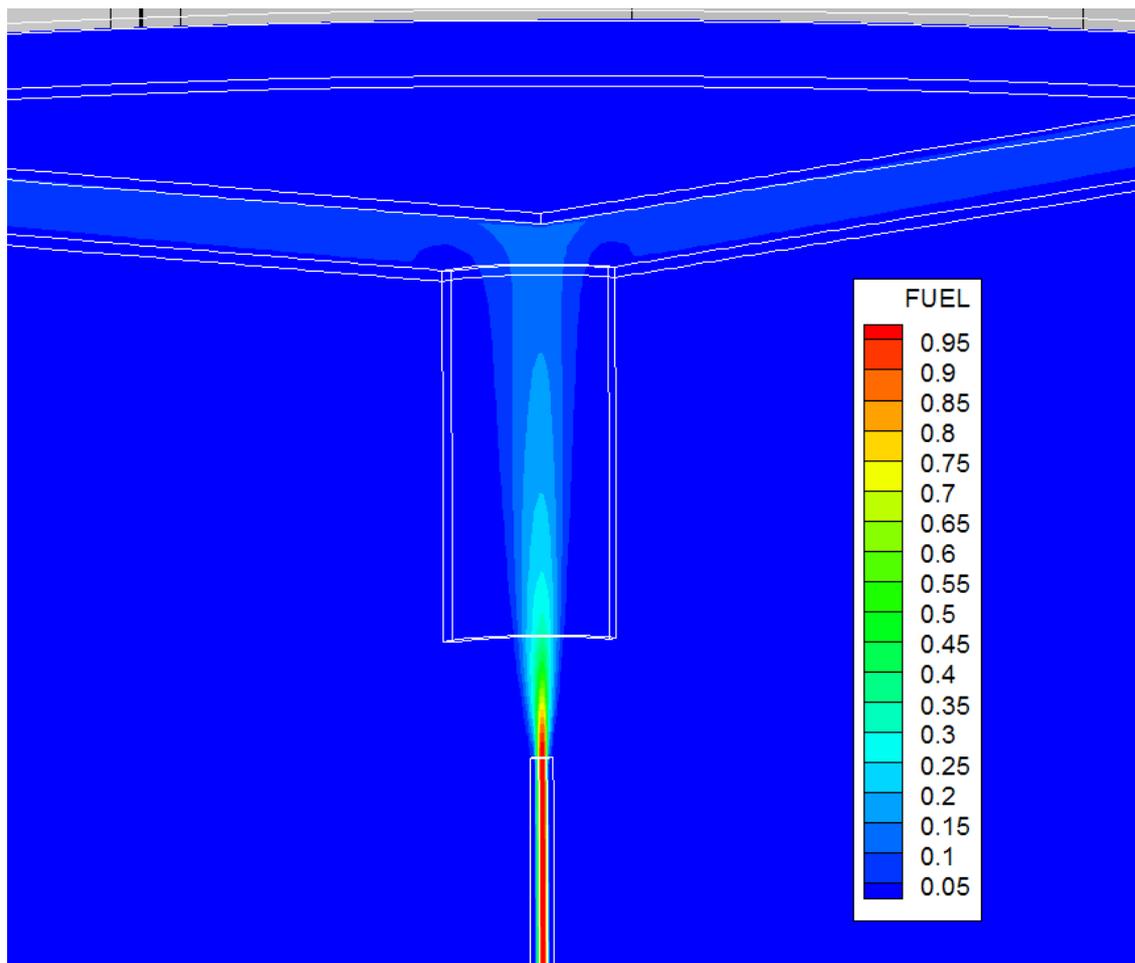


Figura 5.12 Contorno de fracción másica.

5.7 Efecto de la variación de la velocidad en el combustible.

Para este caso se varió la velocidad del combustible a la entrada del inyector en las siguientes velocidades 1, 5, 10, 15, 20, 25 y 30 m/s. Todos los demás parámetros permanecen iguales que el caso base.

En la figura 5.13 se presentan los resultados de graficar en el eje de las abscisas la velocidad de descarga del combustible por la relación de densidades (densidad del combustible entre densidad del aire) y en el eje de las ordenadas la relación de flujos másicos en la salida del quemador entre la entrada en el inyector. En esta figura se aprecia que al incrementarse la velocidad de entrada de combustible la relación de flujos másicos también aumenta hasta una velocidad 10 m/s, a partir de la cual la relación tiende a un valor constante de aproximadamente 15.5; es decir, en esta última parte, un incremento en el gasto de combustible produce un incremento lineal en el gasto de aire inducido.

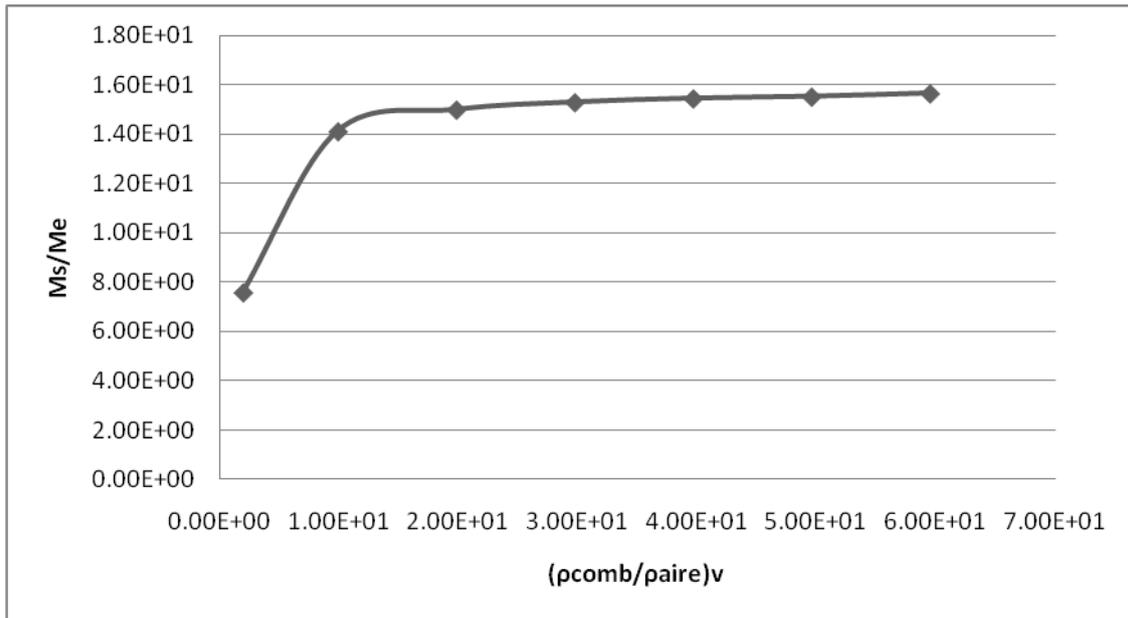


figura 5.13

5.8 Efecto de la variación del diámetro del mezclador.

Para este caso, se varió el diámetro del mezclador como se muestra en la tabla 2. El diámetro del mezclador se adimensionaliza con el diámetro del inyector de 1 mm.

Los resultados de graficar en el eje de las abscisas el diámetro del mezclador adimensionalizado con el diámetro del inyector y en el eje de las ordenadas la relación de flujos másicos en la salida del quemador entre la entrada en el inyector se muestra en la figura 5.14. Al haber un área mayor por la que entra el aire, una mayor cantidad de aire puede ser arrastrado. Conforme se incrementa el diámetro del mezclador se incrementa el arrastre de aire de forma exponencial. Una tendencia hacia mantenerse constante la relación de gastos puede ser observada en la figura 5.14.

D_m/D_i
17.73
20
25.9
29.8
33.7
37.6

Tabla 2

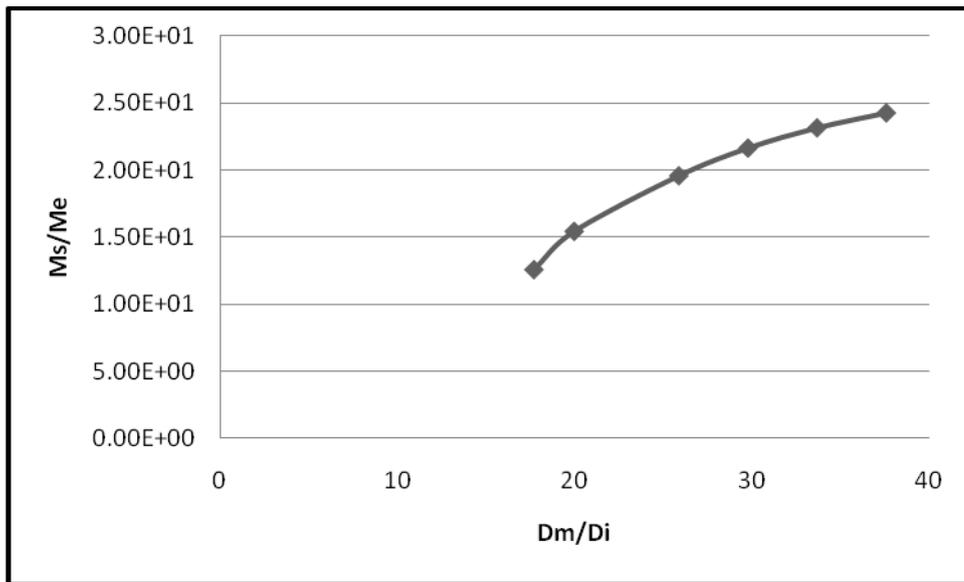


Figura 5.14

5.9 Efecto de la distancia entre el mezclador y el inyector del combustible

Para este caso, se varió la distancia entre el mezclador y el inyector del combustible como se muestra en la tabla 3. La longitud del inyector se adimensionaliza con el diámetro del inyector de 1 mm.

Los resultados de graficar en el eje de las abscisas la distancia entre el inyector del combustible y el mezclador adimensionalizado con el diámetro del inyector y en el eje de las ordenadas la relación de flujos másicos entre la salida del quemador entre entrada en el inyector se muestra en la Figura 5.15. Conforme se hace más pequeña la longitud entre inyector y el mezclador se incrementa el arrastre de aire de forma exponencial, hasta llegar a un punto máximo, después del cual empieza a caer casi de la misma forma con la que aumento. El valor en la relación de diámetros en el cual se obtiene el máximo arrastre de aire circundante es aproximadamente de 6.

Distancia/Di
10
8
6
4
2
0

Tabla 3

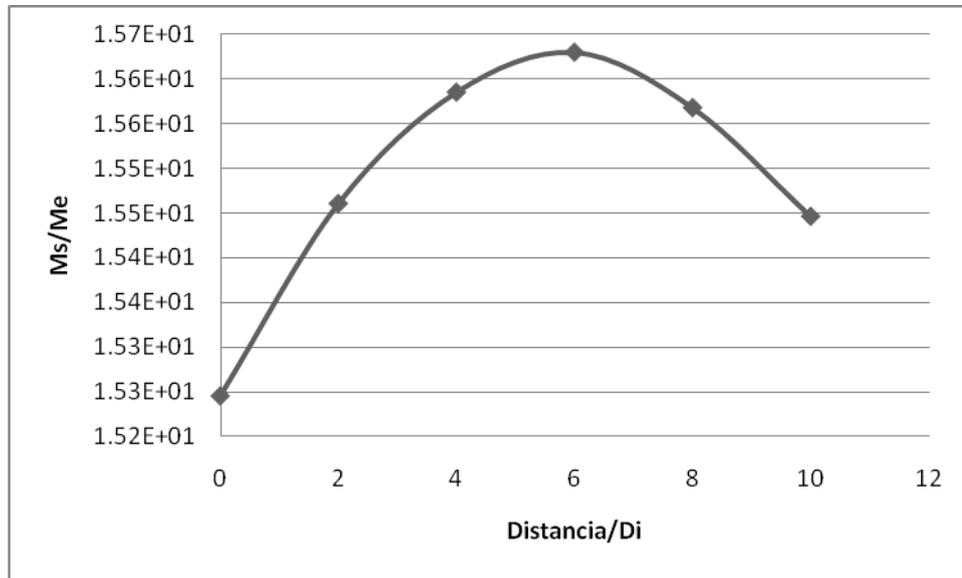


Figura 5.15

5.10 Efecto de longitud del mezclador.

Para este caso se varió la longitud del mezclador de acuerdo a la tabla 4. La longitud del mezclador se adimensionaliza con el diámetro del mezclador.

Los resultados de graficar en el eje de las abscisas la longitud del mezclador adimensionalizado con el diámetro del mezclador y en el eje de las ordenadas la relación de flujos másicos en la salida del quemador entre la entrada en el inyector se muestra en la figura 5.16. Conforme se incrementa la longitud del mezclador se incrementa el arrastre de aire de forma exponencial, hasta llegar a un punto máximo, después el incremento de aire arrastrado empieza a descender más rápido de lo que ascendió. El valor en la relación entre la longitud del mezclador y su diámetro en el cual se obtiene el máximo arrastre de aire circundante es aproximadamente de 1.5.

$L_{\text{mezclador}}/D_{\text{mezclador}}$
1.65E+00
1.49E+00
1.32E+00
1.16E+00
9.90E-01

8.25E-01
Tabla 4

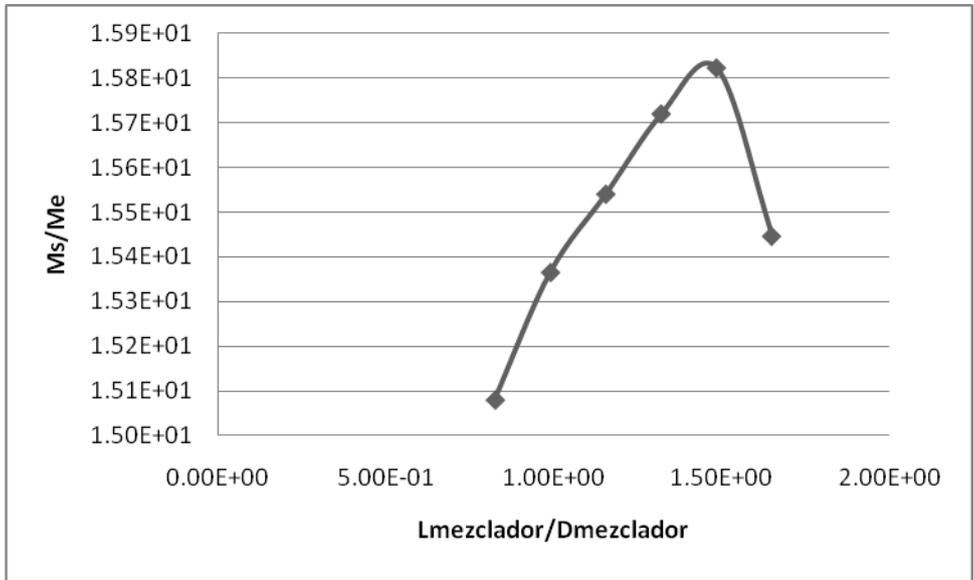


Figura 5.16

Capítulo VI

CONCLUSIONES Y TRABAJOS FUTUROS

En este trabajo de Tesis, se ha simulado numéricamente el arrastre de aire producido por la descarga de un flujo en el mezclador de un quemador atmosférico. El análisis es en forma Tridimensional y son resueltas las ecuaciones de transporte que gobiernan el movimiento del flujo en términos de valores medios.

El sistema consiste en la descarga de un combustible que durante su movimiento arrastra aire del medio circundante, que son introducidos en un mezclador. En esta Tesis, el mezclador es de forma cilíndrica, es decir, utilizar un de un perfil recto. Para estudiar el efecto en la cantidad de aire arrastrado, se modificaron los siguientes parámetros:

- Velocidad de entrada del combustible
- Diámetro del mezclador
- Distancia entre el mezclador y inyector
- Longitud del mezclador

6.1 Conclusiones

El sistema consiste en la descarga de un combustible a través de un inyector que por el movimiento de éste se arrastra el aire del medio ambiente circundante. El combustible es n-butano. Estos fluidos son introducidos al mezclador, para salir finalmente hacia el quemador, donde se va a producir la oxidación de la mezcla.

Las predicciones numéricas permiten establecer lo siguiente:

- Si se incrementa la velocidad de descarga del combustible la relación de flujos máxicos también aumenta hasta una velocidad 10 m/s, a partir de la cual la relación tiende a un valor constante de aproximadamente 15.5; es decir, en esta última parte, un incremento en el gasto de combustible produce un incremento lineal en el gasto de aire inducido.
- Si se incrementa el diámetro del mezclador, al haber un área mayor por la que entra el aire, una mayor cantidad de aire puede ser arrastrado. Conforme se incrementa el diámetro del mezclador se incrementa el arrastre de aire de forma exponencial.
- Si disminuye la distancia entre el mezclador y el inyector, se incrementa el arrastre de aire de forma exponencial, hasta llegar a un punto máximo, después del cual empieza a caer casi de la misma forma con la que aumento. El valor en la relación de diámetros en el cual se obtiene el máximo arrastre de aire circundante es aproximadamente de 6.

- Si disminuye la longitud del mezclador, se incrementa el arrastre de aire de forma exponencial, hasta llegar a un punto máximo, después el incremento de aire arrastrado empieza a descender más rápido de lo que ascendió. El valor en la relación entre la longitud del mezclador y su diámetro en el cual se obtiene el máximo arrastre de aire circundante es aproximadamente de 1.5.

6.2 Trabajos futuros

Como recomendación para trabajos futuros se sugiere:

- Utilizar modelos de turbulencia más complejos.
- Simulaciones para perfiles que tengan mayor arrastre del aire circundante.
- Comparación con datos experimentales.

Apéndice A

MODELO DE TURBULENCIA

1-A Introducción

En este apéndice se introducen, de forma concisa, algunos de los modelos que se pueden utilizar para representar el efecto de la turbulencia del flujo en el mezclador de un quemador atmosférico. Los modelos se clasifican en dos categorías:

Modelos de tipo “difusividad turbulenta”, son esencialmente variantes del método conocido como κ - ϵ . Cierres de segundo orden, en la forma de modelos de transporte de los esfuerzos de Reynolds.

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

2-A Cierres de Segundo Orden

La ecuación de transporte exacta para los esfuerzos de Reynolds $(u_i'' u_j'')$ es [24]:

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

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

Si se hace uso de la definición (2.5) del capítulo 2, el término que expresa el efecto del gradiente de presión media (a), se puede escribir como:

$$-\left(\overline{u_i'' \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j} u_j'' \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i}}\right) = \frac{\overline{\rho' u_j''}}{\rho} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\overline{\rho' u_i''}}{\rho} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j} \quad (\text{A.2})$$

La correlación $\overline{\rho' u_j''}$ se puede modelar de una ecuación de conservación truncada como ([24]):

$$\overline{\rho' u_j''} = -\frac{1}{4.3} \frac{\tilde{k}}{\varepsilon} u_i'' u_j'' \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j} \quad (\text{A.3})$$

donde $k = 1/2 \overline{u_i'' u_i''}$ es la energía cinética turbulenta y ε es su tasa de disipación. La contribución de este término es muy pequeña y frecuentemente se desprecia ([11] y [30]).

Con fines de modelización, la correlación entre gradientes de presión fluctuante y fluctuaciones de velocidad, (b), frecuentemente se divide en una parte re-distributiva y una parte isótropa [25]:

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

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

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

En flujos de baja velocidad $Ma \ll 1$, el término (II) de la ecuación (A.5) generalmente se desprecia [24]. El término (I) se suma al término de transporte turbulento de los esfuerzos de Reynolds © para formar el término:

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

El término C_{ijk} se modela mediante un cierre de tipo gradiente [27]:

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

El término © es la correlación de la disipación viscosa:

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

Si se supone isotropía local, el término ε_{ij} se puede escribir en función de la disipación de energía cinética turbulenta $\tilde{\varepsilon}$ como [24]:

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

La tasa de disipación de la energía cinética turbulenta, $\tilde{\varepsilon}$, se calcula de la siguiente ecuación de transporte, deducida por procedimientos similares a los utilizados en el caso de densidad constante [24]:

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

donde, de acuerdo con lo expuesto anteriormente, el término © se desprecia.

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

Modelos para este término se han propuesto por ejemplo por Launder et al [7] (modelo ML), Gibson y Younis [28] (modelo MG) y Musonge [29] (modelo MJ). Denotando al término redistributivo como Π_{ij} , los modelos se escriben como:

$$\Pi_{ij} = -C_1 \bar{\rho} \tilde{\varepsilon} \left(\frac{u_i'' u_j''}{\tilde{k}} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \right) + C_2 \delta_{ij} \bar{\rho} u_i'' u_m'' \frac{\partial \tilde{u}_l}{\partial x_m} - C_3 \bar{\rho} P_{ij} + C_4 \bar{\rho} \tilde{k} \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right)$$

$$-\frac{2}{3}C_4\bar{\rho}\tilde{k}\frac{\partial\tilde{u}_k}{\partial x_k}\delta_{ij}-\left(\frac{2}{3}C_2+C_3\right)\left(\bar{\rho}u_i''u_j''\frac{\partial\tilde{u}_l}{\partial x_i}+\bar{\rho}u_l''u_i''\frac{\partial\tilde{u}_l}{\partial x_j}\right) \quad (\text{A.11})$$

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

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

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

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}u_i''u_j'') + \frac{\partial}{\partial x_k}(\bar{\rho}\tilde{u}_k u_i''u_j'') &= \frac{\partial}{\partial x_k}(C_{ijk}) - \bar{\rho}\left(u_i''u_k''\frac{\partial\tilde{u}_j}{\partial x_k} + u_j''u_k''\frac{\partial\tilde{u}_i}{\partial x_k}\right) \\ &\quad - \frac{2}{3}\bar{\rho}\tilde{\varepsilon}\delta_{ij} + \Pi_{ij} \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

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

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

3-A Modelos de Viscosidad Turbulenta

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

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

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

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

$$\rho \overline{u_i'' u_\alpha''} = -\bar{\rho} \frac{v_T}{S_{C_T}} \frac{\partial \bar{\phi}_\alpha}{\partial x_i} \quad (\text{A.14})$$

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

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

4-A El modelo $k-\varepsilon$ (modelo de turbulencia utilizado en esta tesis)

En este modelo, se define como:

$$v_T = C_\mu \frac{\tilde{k}^2}{\tilde{\varepsilon}} \quad (\text{A.15})$$

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

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

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

Los esfuerzos de Reynolds $\overline{u_i''u_j''}$ se expresan de acuerdo con la ecuación (A.13).

El término (a) se aproxima como:

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

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

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

donde:

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

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

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

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

C	k		C ₁	C
0.09	1.0	1.314	1.44	1.92

Tabla 2: Constantes del modelo κ - ε estándar.

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

Apéndice B

ESQUEMAS DE DISCRETIZACIÓN

1-B Introducción

En este apéndice se presentan los esquemas lineales que se usan en la discretización de término convectivo de la ecuación general (2.1) introducida en el capítulo 2.

En la formulación de la ecuación discretizada (2.2), se requiere conocer la densidad ρ y la variable escalar, ϕ , en la cara de la celda. Estas variables se calculan en el nodo de la celda, por lo que es necesario interpolar entre celdas para conocer su valor en la cara. Este cálculo de ϕ y ρ en la cara de la celda da lugar a los llamados esquemas de discretización. La determinación de los valores de estas variables en la cara es importante para la precisión y convergencia de la solución numérica.

A continuación, se presentan los esquemas de discretización lineales que se usan en esta tesis. Estos esquemas se describirán en base al sistema de celdas que se ilustra en la figura 1. Como ejemplo, se obtendrá el valor de ϕ en la cara e de la celda P. La velocidad en la cara e se considerará, sin pérdida de generalidad, positiva ($u_e > 0$).

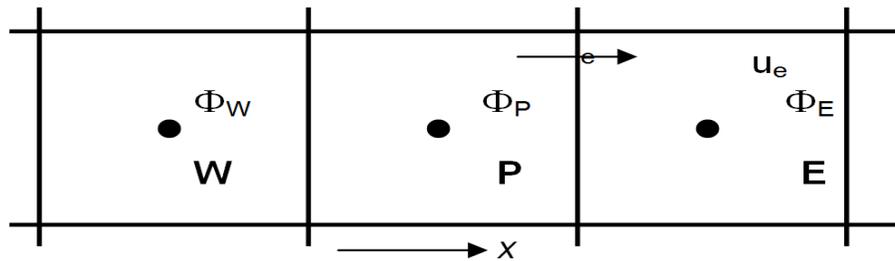


Figura 1: Diagrama esquemático de celdas.

2-B Esquemas Lineales

a) Diferencias desplazadas de primer orden

Con este esquema se supone que el valor de la variable ϕ en la cara e es igual al nodo adyacente aguas arriba, es decir, para $u_e > 0$ [29]:

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

Esta alternativa es de implementación sencilla, acotada y altamente estable casi bajo cualquier situación pero tiene los inconvenientes de su precisión, que es de primer orden y de presentar problemas de difusión numérica. Esta falsa difusión es mayor si en el flujo no hay una alineación en

la dirección de la dirección del flujo y las líneas de malla, como por ejemplo en flujos de recirculación.

b) Diferencias Centradas

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

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

Este esquema tiene una precisión de segundo orden pero tiene el inconveniente de no estar acotado, por lo que puede presentar inestabilidades numéricas. El límite de estabilidad de este esquema viene dado en función del número de Peclet (ecuación 3.3 del capítulo 3), que es un parámetro comparativo entre los procesos convectivo y difusivo.

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

c) Híbrido

Este esquema fue introducido por Spalding [30] y consiste en combinar los esquemas de diferencias desplazadas y centradas para calcular el valor de la propiedad ϕ en la cara del volumen de control. La selección del esquema se hace en función del número de Peclet de la celda:

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

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

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

$$\phi_e = \phi_P, \quad Pe > 2 \quad (\text{B.4})$$

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

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

Apéndice C

Q1

1-C Archivo de datos de entrada Q1

El archivo Q1 contiene los datos de las condiciones de frontera para la simulación numérica. A continuación, se presenta el archivo Q1, escrito en el lenguaje de entrada del programa PHOENICS, PIL (Phoenix Input Language).

2-C Q1

El archivo PIL que se presenta a continuación fue utilizado para el análisis de los diferentes parametros.

Perfil recto velocidad 20 (caso base):

```
TALK=F;RUN (1,1)
TEXT( MEZCLADOR)
STEADY= T
CARTES=F

NX=16
NREGX=1
IREGX=1; GRDPWR (X,16,1.6,1.0)

NY=78
NREGY=6
IREGY=1; GRDPWR (Y,1,0.0005,1.0)
IREGY=2; GRDPWR (Y,1,0.001,1.0)
IREGY=3; GRDPWR (Y,15,0.0085,1.0)
IREGY=4; GRDPWR (Y,1,0.001,1.0)
IREGY=5; GRDPWR (Y,40,0.039,1.0)
IREGY=6; GRDPWR (Y,20,0.1,1.0)

NZ=92
NREGZ=7
IREGZ=1; GRDPWR (Z,10,0.06,1.0)
IREGZ=2; GRDPWR (Z,30,0.04,1.0)
IREGZ=3; GRDPWR (Z,15,0.01,1.0)
IREGZ=4; GRDPWR (Z,30,0.033,1.0)
IREGZ=5; GRDPWR (Z,1,0.001,1.0)
IREGZ=6; GRDPWR (Z,5,0.005,1.0)
IREGZ=7; GRDPWR (Z,1,0.001,1.0)
XCYCLE=T
SOLVE (P1,U1,V1,W1,FUEL)
SOLUTN(P1,Y,Y,Y,N,N,Y)
SOLUTN(P1,Y,Y,Y,N,N,N)
STORE (TMP1,RHO1,VOA)
TMP1= 300.0
RHO1=GRND
ENUL=1.12E-5
```

```

TURMOD (KEMODL)
FIINIT (P1)= 0.1
FIINIT (U1)= 0.0
FIINIT (V1)= 0.0
FIINIT (W1)= 20.
FIINIT (KE)= 0.1
FIINIT (EP)= 0.1
      PRT (FUEL) = .400000E+00
      ENTRADA DE COMBUSTIBLE
PATCH (ENTRADA,LOW,1,NX,#1,#1,1,1,1,1)
COVAL (ENTRADA,P1,FIXFLU,2.381289*20.0)
COVAL (ENTRADA,U1,ONLYMS,0.0)
COVAL (ENTRADA,V1,ONLYMS,0.0)
COVAL (ENTRADA,w1,ONLYMS,1.0)
COVAL (ENTRADA,KE,ONLYMS,0.01)
COVAL (ENTRADA,EP,ONLYMS,0.1)
COVAL (ENTRADA,FUEL,ONLYMS,1.0)

      SALIDA DE COMBUSTIBLE
PATCH (SALIDA, NORTH,1,NX,NY,NY,#6,#6,1,1)
COVAL (SALIDA,P1,FIXP,0.0)

      ENTRADA DE AIRE CARA NORTE
PATCH (PAREDE,NORTH,1,NX,NY,NY,#1,#5,1,1)
COVAL (PAREDE,P1,FIXP,0.0)
      COVAL (PAREDE,U1,ONLYMS,0.0)
      COVAL (PAREDE,V1,ONLYMS,0.0)
      COVAL (PAREDE,w1,ONLYMS,0.0)
      COVAL (PAREDE,KE,ONLYMS,0.0)
      COVAL (PAREDE,EP,ONLYMS,0.00)
      COVAL (PAREDE,FUEL,ONLYMS,0.0)

      ENTRADA DE AIRE CARA SUR
PATCH (PAREDS,LOW,1,NX,#3,#6,1,1,1,1)
COVAL (PAREDS,P1,FIXP,0.0)
      COVAL (PAREDS,U1,ONLYMS,0.0)
      COVAL (PAREDS,V1,ONLYMS,0.0)
      COVAL (PAREDS,w1,ONLYMS,0.0)
      COVAL (PAREDS,KE,ONLYMS,0.0)
      COVAL (PAREDS,EP,ONLYMS,0.00)
      COVAL (PAREDS,FUEL,ONLYMS,0.0)

CONPOR (BINYC, 0.0,CELL,1,NX,#2,#2,#1,#2)
CONPOR (BMEZCLA, 0.0,CELL,1,NX,#4,#4,#4,#5)
CONPOR (BTAPAI, 0.0,CELL,1,NX,#5,#6,#5,#5)
CONPOR (BTAPAS, 0.0,CELL,1,NX,#1,#6,#7,#7)

RELAX (P1, LINRLX,0.3)
RELAX (U1,FALSDT, 1.0E-3)
RELAX (V1, FALSDT, 1.0E-3)
RELAX (W1, FALSDT, 1.0E-3)
RELAX (KE, FALSDT, 1.0E-3)
RELAX (EP,FALSDT,1.0E-3)

```

```
RELAX (FUEL, LINRLX,0.6)
LSWEEP= 40000
  restrt(all)
VARMAX (P1)= 1.0E4
VARMIN (P1)= -1.0E4
VARMAX (U1)= 50.0
VARMIN (U1)= -50.0
VARMAX (V1)= 50.0
VARMIN (V1)= -50.0
VARMAX (W1)= 50.0
VARMIN (W1)= -50.0
VARMAX (KE)= 100.0
VARMIN (KE)= 0.000001
VARMAX (EP)= 1.0E6
VARMIN (EP)= 0.000001
VARMAX (FUEL)= 1.0
VARMIN (FUEL)= 0.000

IXMON= 1
IYMON= 10
IZMON= 67
TSTSWP=-1
STOP
```

Bibliografía

- Colannino, Joseph, *Modeling of combustion systems: A practical approach*. Taylor & Francis Group, 2006.
- Gary L. Borman y Kenneth W. Ragnald, *Combustion Engineering*. McGraw-Hill, 1998.
- Aris, R. *Vectors, Tensors and the Basic Equations of Fluid Mechanics*. Prentice Hall International Series in the Physical and Chemical Engineering Sciences. 1962.
- Warnatz, J., Mass, U., Dibble, R. W. *Combustion*. Springer. 1996.
- Ferziger, H. H., Peric, M. *Computational Methods for Fluid Dynamics*. Springer-Verlag. 1996.
- Favre, A. *Problems of Hydrodynamics and Continuum Mechanics*. SIAM. 1969.
- Jones, W. P. Models for Turbulent Flows with Variable Density and Combustion. En W. Kollmann, editor, *"Prediction Methods for Turbulent Flows"*. Lecture Series 1979-2. Von Karman Institute for Fluid Dynamics. Rhode Saint Genese, Bélgica. 1979.
- Jones, W. P. Turbulence Modeling and Numerical Solutions Methods for Variable Density and Combustion Flows. pp 306-374. Academic Press. 1994.
- Lindstedt, R. P., Váos, E. M. Modeling of Premixed Flames with Second Moment Methods. *Combustion and flame*, 116:461-485. 1999
- Patankar, S. V. *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. Series in Computational Methods in Mechanics and Thermal Science. Hemisphere Publishing Corporation. 1980.

- Patankar, S. V., Spalding, D. B. A Calculation Procedure for Heat, Mass and Momentum Transfer in Three Dimensional Parabolic Flows. *Int. J. Heat and Mass Transfer*, 15. pp. 1787-1806. 1972.
- Spalding, D. B. *Mathematical Modeling of Fluid Dynamics, Heat Transfer and Mass Transfer Process*. Technical Report HTS/8011, Imperial College of Science Technology and Medicine. 1980.
- Ludwig, J. C., Qin, H. Q., Spalding, D. B. *The PHOENICS Reference Manual*. Technical Report CHAM TR/200, CHAM Ltd, London. 1989.
- J. Thompson, Z. Warsi, C. Wayne-Mastin, *Numerical Grid Generation: Foundation and Applications*, Elsevier, Amsterdam, 1985.
- M. Berger, R. LeVeque, *An Adaptive Cartesian Mesh Algorithm for the Euler Equations in Arbitrary Geometries*, AIAA paper 89-1930-CP, 1989.
- J. Quirk, *An alternative to unstructured grids for computing gas dynamic flows around arbitrarily complex two-dimensional bodies*, *Comput. Fluids* 23 (1) (1994) 125–142.
- G. Yang, D. Causon, D. Ingram, R. Saunders, P. Batten, *A Cartesian cut cell method for compressible flows. Part A. Static body problems*, *Aeronaut. J.* 101 (1001) (1997) 47–56.
- G. Yang, D. Causon, D. Ingram, *Calculation of compressible flows about complex moving geometries using a 3D Cartesian cut cell method*, *Int. J. Numer. Methods Fluids* 33 (2000) 1121–1151.

- S. Cieslak, S. Ben Khelil, I. Choqiet, A. Merlen, Cut cell strategy for 3D blast wave numerical simulation, *Shock Waves* 10 (6) (2001) 421–429

- Paul D. Bates, Stuart N. Lane, Robert I. Ferguson, *Computational Fluid Dynamics Applications in Environmental Hydraulics*, 2005

- Henderson, F. M., 1966, *Open Channel Flow*. Macmillan Company, New York

- Biagioli, F. Comparison Between Presumed and Monte Carlo PDF Transport Methods for Turbulent Combustion Modeling. *AIAA-Journal of Propulsion and Power*, 13(1):109-116. 1997.

- Jones, W. P. Turbulence Modeling and Numerical Solutions Methods for Variable Density and Combustion Flows. pp 306-374. Academic Press. 1994.

- Daly, B. J., Harlow, F. H. Transport Equations in Turbulence. *Physics of Fluids*, 3(11):2634-2649. 1970.

- Dahm WJA, Southerland K, Band Buch KA (1991) Direct, high resolution, four-dimensional measurements of the fine scale structure of $Sc \gg 1$ molecular mixing in turbulent flows. *Phys Fluids A* 3(5):1115–1127.

- Spalding, D. B. A Novel Finite-Difference Formulation for Differential Expressions Involving Both First and Second Derivates. *Int. Journal. Num. Methods Engineering*, 4, pp. 551. 1972