



Centro Universitario de la Defensa en la Escuela Naval Militar

TRABAJO FIN DE GRADO

*Diseño de un equipo de mezclado de gases para el estudio
experimental de combustión*

Grado en Ingeniería Mecánica

ALUMNO: Ignacio Rodríguez Ribas

DIRECTORES: Miguel Ángel Gómez Rodríguez
Arturo González Gil

CURSO ACADÉMICO: 2015-2016

Universida_{de}Vigo



Centro Universitario de la Defensa en la Escuela Naval Militar

TRABAJO FIN DE GRADO

*Diseño de un equipo de mezclado de gases para el estudio
experimental de combustión*

Grado en Ingeniería Mecánica
Intensificación en Tecnología Naval
Cuerpo General

Universida_{de}Vigo

RESUMEN

En este trabajo se propone un sistema de mezclado de gases hidrocarburos con aire para el estudio experimental de la combustión. La Dinámica de Fluidos Computacional (CFD) nos da la oportunidad de recrear procesos que de otra forma serían caros, peligrosos o sencillamente inabarcables. Mediante el software “ANSYS Fluent” se ha recreado el comportamiento de una llama generada a partir de una premezcla de aire y propano. Tomando como referencia un quemador genérico se ha propuesto una geometría alternativa para el nuevo diseño del mismo. A continuación se ha generado un mallado tridimensional para el estudio CFD. De esta forma se han calculado las velocidades de propagación de la llama por aproximaciones del método de medición de velocidad mediante el cono de llama, así como por el avance del frente de llamas por un conducto cilíndrico, contrastando los datos extraídos de las simulaciones con los obtenidos de diversas fuentes.

In this paper a system of mixed hydrocarbon gases with air for the experimental study of combustion, is proposed. Computational Fluid Dynamics (CFD) gives us the opportunity to recreate processes that would otherwise be expensive , dangerous or simply boundless . With "ANSYS Fluent" software the behavior of a flame generated from a premix of air and propane has been recreated. Referencing a generic burner an alternative geometry for the new design has proposed. Then it has generated a three-dimensional mesh for the CFD study. Thus velocities of propagation of the flame approaching the method of measuring speed by flame cone have been calculated, as well as by the advance of the flame front by a cylindrical conduit , comparing the data extracted from the simulations with the obtained from various sources .

PALABRAS CLAVE

DFC, COMBUSTIÓN, LLAMA, VELOCIDAD, PROPANO

KEY WORDS

CFD, COMBUSTION, FLAME, VELOCITY, PROPANE

AGRADECIMIENTOS

Al profesor Miguel Ángel, que me ayudado a sacar a delante el proyecto y a manejar los programas que han sido necesarios.

A mis compañeros y amigos de camareta, Juan, Guillermo y Carlos y a la gente del grupo 5, sin ellos como dice José Luis, *“habría sido más fácil, pero también más aburrido”*.

A la promoción 416-146. Buena suerte a todos.

CONTENIDO

Contenido	3
Índice de Figuras	5
Índice de Reacciones	8
Índice de Tablas.....	9
1 Introducción y objetivos	10
1.1 Introducción	10
1.2 Objetivos	10
1.3 La Reacción de Combustión	11
1.3.1 Introducción	11
1.3.2 Generalidades	11
1.3.3 Termodinámica química	11
1.3.4 Elementos de la Reacción de Combustión.....	12
1.3.5 La Estequiometría de la Reacción de Combustión	19
1.3.6 Introducción	22
1.3.7 La llama	22
1.3.8 Perfil de temperatura.....	22
2 Estado del arte	25
2.1.1 Velocidad de propagación	25
2.1.1 Medición de ángulo del cono.....	28
2.1.2 Medición de la velocidad de propagación	29
2.1.3 Tipos de quemadores en el mercado actual	31
2.2 Computational Fluid Dynamics (CFD).....	33
2.2.1 Introducción	33
2.2.2 ¿En qué consiste la CFD?	33
2.2.3 Formulación Física	36
3 Diseño y simulación	48
3.1 Introducción	48
3.1.1 Componentes del quemador	48
3.1.2 Diseño en Siemens NX.....	49
3.1.3 Mallado 2D	53
3.1.4 Mallado 3D	56
3.1.5 Condiciones de contorno	57

3.1.1 Simulación	59
4 Resultados	61
4.1 Procedimiento	61
4.2 Simulaciones	64
4.2.1 Trayectoria gas.....	64
4.2.2 Velocidades.....	66
4.2.3 Temperatura	67
4.2.4 Especies	68
4.3 Estudio transitorio de propagación de la llama	72
4.4 Datos numéricos.....	76
4.4.1 Llama generada en la cámara	76
4.4.2 Llama de desplazamiento por conducto	77
5 Conclusiones y líneas futuras	78
5.1 Conclusiones	78
5.2 Líneas futuras	79
6 Bibliografía.....	80
Anexos.....	82
Anexo I: Componentes del modelo de referencia	83
Anexo II: Mallado 2D	85
Anexo III: Mallado 3D	91
Anexo IV: Tablas de caudales.....	93

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1-1 Reacción de combustión del metano (5).....	12
Figura 1-2 Diferencia en el punto de ebullición entre isómeros (7).....	14
Figura 1-3 Curva equilibrio líquido-vapor (8)	16
Figura 1-4. Gases atmosféricos mayoritarios.	17
Figura 1-5. Gases atmosféricos minoritarios.	18
Figura 1-6 Variación de velocidad para distintas mezclas (2)	21
Figura 1-7 Perfil de temperaturas de los gases en combustión (4).....	23
Figura 1-8 Esquema de la propagación de la combustión (11)	23
Figura 1-9 Generación de llamas amarillas para combustiones de baja eficiencia (6).	24
Figura 2-1 Vectores de velocidad (11)	26
Figura 2-2 Medición de la velocidad de propagación en un conducto (2).	26
Figura 2-3 Tasa de aireación (15).....	27
Figura 2-4.Cada combustible tiene asociado un color de llama (18).	28
Figura 2-5 Esquema de las partes de una llama de premezcla (15).....	28
Figura 2-6 Estructura del cono de llama (13).....	29
Figura 2-7 Dimensiones de un cono	30
Figura 2-8 Medición del ángulo del cono mediante software de CAD (6)	31
Figura 2-9 Esquema de un quemador industrial de gas (20).	31
Figura 2-10 Mecheros Meker izq. y Bunsen dch. (22).....	32
Figura 2-11 McKenna Burner (24).....	33
Figura 2-12. Malla de discretización por volúmenes finitos.	37
Figura 3-1 Montaje experimental en las instalaciones de la Universidad de Vigo	49
Figura 3-2 Diseño de modelo en Siemens NX	50
Figura 3-3 Cámara de combustión	51
Figura 3-4 Entradas de aire y gas	51
Figura 3-5 Mezclado de gases	51
Figura 3-6 Chimenea	52
Figura 3-7 Boquilla	52
Figura 3-8 Vidrio protector	52
Figura 3-9 Distintos ejemplos de calidad de malla (12).....	53
Figura 3-10 Mallado general-gravedad en la dirección del vector “Z”	54
Figura 3-11 Detalle del mallado	55

Figura 3-12 Detalle de la superficie y mallado	56
Figura 3-13 Datos mostrados por TGrid tras el mallado.....	56
Figura 3-14 Histograma de calidad de las celdas (TGrid).....	57
Figura 3-15 Vista general del mallado exterior.....	58
Figura 3-16 Cámara.....	58
Figura 3-17 Entradas	59
Figura 3-18 Chimenea	59
Figura 3-19 Vidrio.....	59
Figura 4-1 Detalle trayectoria en la zona de la boquilla.....	65
Figura 4-2 Detalle trayectoria en la zona de mezcla	65
Figura 4-3 Vectores de velocidad coloreados según la fracción molar de propano existente.....	66
Figura 4-4 Vectores de velocidad.....	67
Figura 4-5 Contorno de temperaturas para un corte de la zona del vidrio de protección.....	68
Figura 4-6 Detalle del contorno de temperaturas en la zona de la llama	68
Figura 4-7 Detalle de la fracción molar de oxígeno y temperatura en la zona de llama.	69
Figura 4-8 Fracción molar de propano	70
Figura 4-9 Las líneas de disipación del oxígeno son opuestas a las del propano.....	71
Figura 4-10 Las simulaciones en transitorio	72
Figura 4-11 Llama de mezcla estequiométrica para $Q = 0.75$ L/s.....	73
Figura 4-12 Evolución del frente de llama en las primeras fases del avance.....	74
Figura 4-13 Avance del frente de llama en estado avanzado.	75
Figura 0-1 Boquilla.	83
Figura 0-2 Cámara.....	83
Figura 0-3 Caudalímetros de propano y gas.....	84
Figura 0-4 Chimenea.	84
Figura 0-1 Vista general de la malla 2D.....	85
Figura 0-2 Vista general	86
Figura 0-3 Distintas presentaciones permiten apreciar las superficies, y el mallado.....	87
Figura 0-4 Detalle del mallado del vidrio de seguridad, salida de gases, y boquilla.	88
Figura 0-5 Distintas presentaciones permiten apreciar las superficies, y el mallado.....	89
Figura 0-6 Detalle de la superficie y mallado de la unión entre la cámara y la chimenea.	90
Figura 0-7 Detalle del mezclador y las admisiones.....	90
Figura 0-1 Corte malla (plano $y = 0$).....	91
Figura 0-2 Detalle de la malla 3D	92

ÍNDICE DE REACCIONES

Reacción 1-1 Fermentación.....	13
Reacción 1-2 Combustión con aire atmosférico.....	19
Reacción 1-3 Combustión completa.....	20
Reacción 1-4 Combustión con aire en exceso.....	20
Reacción 1-5 Combustión incompleta.....	21

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1-1 Principales alcanos (7).	14
Tabla 1-2 Propiedades del propano (8).	16
Tabla 1-3 Proporción de gases de acuerdo con distintas fuentes (3) (7).	18
Tabla 3-1 Tamaño del mallado.	55
Tabla 4-1 Relaciones de velocidad.	61
Tabla 4-2 Condiociones aire propano	62
Tabla 4-3 Mezcla Estequiométrica.	76
Tabla 4-4 Mezcla 30:1	77
Tabla 0-1 Relaciones de caudales en l/s	93
Tabla 0-2 Relaciones de caudales en g/s	94

1 INTRODUCCIÓN Y OBJETIVOS

1.1 Introducción

En el presente trabajo se pretende diseñar un quemador de gases que, mediante un mezclado previo del combustible con oxígeno, permita realizar un estudio de las características de la reacción que tiene lugar a partir de mediciones de la forma de la llama y de su velocidad de avance.

El diseño del equipo se realizará mediante softwares apropiados que recreen el comportamiento de los gases inmersos en el seno del mismo. Para ello se tendrán en cuenta las distintas consideraciones tales como la conservación de energía o la estequiometría de las reacciones, factores los cuales desarrollaremos más a fondo a lo largo del presente trabajo.

1.2 Objetivos

El objetivo principal del presente trabajo es el diseño de un sistema de mezclado de gases para el estudio experimental de la combustión bajo distintas condiciones. La aplicación que presenta el mezclador de gases aquí expuesto, presenta un elevado interés académico de cara a asignaturas relacionadas tanto con química, como con mecánica de fluidos o termodinámica. Debido a lo cual, el fin último de este proyecto será la futura fabricación de un prototipo que permita la experimentación en los laboratorios de la Escuela Naval Militar (ENM).

Debido a su extensión y a las limitaciones que se nos presentan en el presente proyecto, nos limitaremos a diseñar el equipo y a realizar diversos estudios de su comportamiento utilizando como principal herramienta programas de diseño y simulación, concretamente de Dinámica de Fluidos Computacional (CFD). Con la simulación del quemador se estudiará la viabilidad del diseño y las propiedades de la combustión obtenida.

Para ello se comenzará hablando de los principios científicos y del Estado del Arte, haciendo referencia a los tres grandes bloques en que hemos dividido el estudio de los elementos que intervienen. Así pues, se desarrollará lo relativo a la CFD, tomando como referencia otros trabajos similares al presente, comentando qué consideraciones se tienen en cuenta a la hora de trabajar con estas herramientas, los modelos que utilizan o las simplificaciones que permiten hacer posible el estudio y simulación de cuerpos en general y de fluidos más concretamente. De igual forma estudiaremos la reacción de combustión, centrándonos en la combustión de hidrocarburos gaseosos, en especial los más comunes y comerciales tales como el metano, butano o propano, entre otros.

Terminaremos exponiendo lo relativo a quemadores que actualmente existen en el mercado, más en concreto aquellos orientados a la experimentación y no tanto a la transformación y obtención de energía calorífica. Por otra parte tomaremos ejemplo de las técnicas utilizadas en la medición de caudales durante la generación de la llama así como en el avance del frente de llama.

1.3 La Reacción de Combustión

1.3.1 Introducción

Para llevar a cabo el presente proyecto es necesario hacer un estudio previo de la reacción de combustión para poder realizar un diseño de la manera más fiel posible. Es por ello que si bien el objeto de este trabajo no es la redacción de un manual de todo lo que engloba dicho proceso químico, labor que nos ocuparía más tiempo del deseado y que por otra parte ya ha sido tratado de manera profunda en diversos manuales de química (1) (2) (3) (4), es imprescindible tomar una serie de nociones que nos faciliten un punto de partida.

1.3.2 Generalidades

Definiendo la combustión como una reacción química entre el oxígeno y un material oxidable, acompañada de desprendimiento de energía y que habitualmente se manifiesta por incandescencia o llama, según la define la Real Academia Española (RAE).

La reacción de combustión es un proceso que si bien lleva inherentes connotaciones químicas puede ser estudiado desde el punto de vista de distintos campos (3):

- Termodinámica.
- Cinética Química.
- Mecánica de Fluidos.
- Transferencia de Calor y Masa.
- Turbulencia.
- Estructura y Desarrollo de Materiales.

...

En lo que al análisis respecta, es de mayor interés lo relativo al estudio de la termodinámica y la estequiometría de dicha reacción. Aunque es cierto que el resto de puntos también nos van a afectar, quedarán reflejados posteriormente cuando hablemos del software de diseño, razón por la cual se obviarán en esta parte. Por ello en las siguientes líneas se hablará de los principios que rigen estos procesos para posteriormente hablar de reactivos y productos, finalizando con las diversas variantes que existen en las combustiones de hidrocarburos. Hay que mencionar que, puesto que se pretende diseñar un quemador que pueda ser fabricado y puesto en funcionamiento, tomaremos como referencia en las siguientes líneas combustibles gaseosos comunes tales como los alcanos de cadena corta (metano, butano, propano...).

1.3.3 Termodinámica química

La termodinámica química es la rama de la química que estudia la relación del intercambio de energía en los procesos químicos, así como trabajo y los equilibrios asociados a dichas reacciones y a sus cambios de estado. La liberación de calor que existe tras producirse una reacción, se puede estudiar atendiendo a los valores de entalpías de los elementos que participan en ella. Esto es tomando como base el principio de conservación de materia. Gracias a él podemos calcular la energía

intercambiada a nivel molecular mediante la estequiometría de la reacción en cuestión y, por ende, a extrapolarlo a unidades manejables tales como el kilogramo.

La segunda consideración que utilizamos para basar nuestros cálculos es el principio de conservación de la energía recogido en la primera ley de la termodinámica. Por este principio, la variación de energía interna de un sistema deberá ser igual al calor intercambiado y al trabajo realizado. Establecemos el criterio de signos de acuerdo con la Ecuación 1.1. Para nuestro caso concreto, el de la química, la aplicación dicha ley queda patente al realizar el cálculo de la variación de las entalpías entre reactivos y productos, siendo la diferencia entre ambos el calor y trabajo intercambiados con el medio, tal como se muestra en la Ecuación 1.2.

$$\Delta U = Q - W$$

Ecuación 1.1

$$\Delta H_R = \sum n_p \Delta H_{f_p} - \sum n_r \Delta H_{f_r}$$

Ecuación 1.2

1.3.4 Elementos de la Reacción de Combustión

Para entender mejor el proceso es conveniente identificar los elementos que intervienen en ésta, a fin de poder medir, y por consiguiente, estudiar los factores que afectan y la manera en que lo hacen. Así pues, tras una primera división, establecemos que una reacción consta de reactivos, productos y energía intercambiada. Todos ellos van unidos a cualquier reacción química, independientemente de la naturaleza de la misma. No obstante tras una segunda división, establecemos en los reactivos una subdivisión (combustible y comburente). Esta última es específica de la reacción de combustión. Si bien es cierto que el resto de reacciones hablamos de reductor y oxidante, y que utilizaremos los términos oxidante y comburente de forma indistinta, el término combustible hace referencia a una sustancia o material con valores de entalpía elevados y que tras la combustión rompe su estructura molecular generando otra de menor tamaño y entalpía (Figura 1-1). De esta forma decimos que si bien todos los combustibles actúan como reductor, no todos los reductores son combustibles.

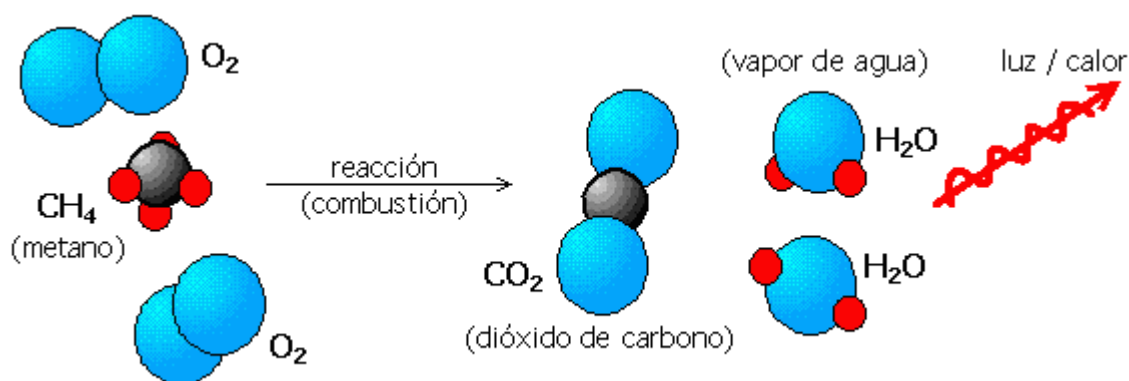
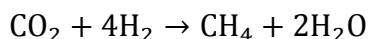


Figura 1-1 Reacción de combustión del metano (5).

1.3.4.1 Combustible

Llamamos combustible a la sustancia que lleva en su estructura molecular el aporte energético en la reacción energía mediante la cual, alcanzada la temperatura de ignición, mantiene la reacción en cadena. La energía liberada es en forma de luz y calor. El poder calorífico del combustible se refleja en unidades de calor entre unidades de masa, o volumen si se trata de un gas. Así pues en unidades del sistema internacional utilizaremos la KJ/kg o (en sistema técnico) la Kcal/m³ (2) (6).

A nivel comercial, la gama de combustibles se compone de un amplio abanico a partir de derivados del petróleo y de otros combustibles, en la mayoría de los casos, fósiles. Se trata de compuestos formados por cadenas de hidrocarburos, moléculas formadas a base átomos de carbono e hidrógeno como elementos principales que en ocasiones se enlazan con otros átomos tales como el oxígeno, nitrógeno o el azufre. Hay que matizar que en la actualidad cada vez se está trabajando más en la obtención de estas mismas moléculas a partir de otras fuentes como la biomasa. Es el caso de algunas bacterias que generan metano como residuo de metabolizar dióxido de carbono para obtención de energía, como se muestra en la Reacción 1-1, o el caso de los alcoholes obtenidos en condiciones anaerobias mediante la fermentación de la glucosa también por bacterias.



Reacción 1-1

Así pues, por ser un campo extenso, nos centraremos en los hidrocarburos denominados alcanos por ser éstos los que presentan mayor interés de cara a nuestro diseño, concretamente al propano, el cual pertenece a los alcanos de cadena lineal, más conocidos como alifáticos.

1.3.4.2 Alcanos

Son hidrocarburos, formados exclusivamente por moléculas de carbono e hidrógeno. Como característica principal y a diferencia de alquenos y alquinos, los alcanos están formados exclusivamente por enlaces simples. Por esta razón son llamados hidrocarburos saturados.

Por su configuración, tanto los de cadena simple como los de ramificada, se ajustan a la formula $\text{C}_n\text{H}_{2n+2}$, siendo n un numero entero positivo. Puesto que el metano es el primer miembro de esta serie (CH_4), se les conoce también como serie del metano (1) (3).

Entre sus principales características está el hecho de que son fáciles de licuar a temperatura ambiente y por lo tanto también son fáciles de manejar. En el caso de los de cadenas más largas, éstos ya se presentan como líquidos a temperaturas próximas a los 20°C.

<i>n</i>	Nombre (-ano)	Fórmula (C _n H _{2n+2})	<i>n</i>	Nombre (-ano)	Fórmula (C _n H _{2n+2})
1	metano*	CH ₄	10	decano	CH ₃ (CH ₂) ₈ CH ₃
2	etano*	CH ₃ CH ₃	11	undecano	CH ₃ (CH ₂) ₉ CH ₃
3	propano*	CH ₃ CH ₂ CH ₃	12	dodecano	CH ₃ (CH ₂) ₁₀ CH ₃
4	butano*	CH ₃ (CH ₂) ₂ CH ₃	13	tridecano	CH ₃ (CH ₂) ₁₁ CH ₃
4	<i>iso</i> butano	(CH ₃) ₃ CH	14	tetradecano	CH ₃ (CH ₂) ₁₂ CH ₃
5	pentano	CH ₃ (CH ₂) ₃ CH ₃	15	pentadecano	CH ₃ (CH ₂) ₁₃ CH ₃
5	<i>iso</i> pentano	(CH ₃) ₂ CHCH ₂ CH ₃	20	eicosano	CH ₃ (CH ₂) ₁₈ CH ₃
5	<i>neopentano</i>	(CH ₃) ₄ C	21	heneicosano	CH ₃ (CH ₂) ₁₉ CH ₃
6	hexano	CH ₃ (CH ₂) ₄ CH ₃	22	docosano	CH ₃ (CH ₂) ₂₀ CH ₃
7	heptano	CH ₃ (CH ₂) ₅ CH ₃	30	triacontano	CH ₃ (CH ₂) ₂₈ CH ₃
8	octano	CH ₃ (CH ₂) ₆ CH ₃	40	tetracontano	CH ₃ (CH ₂) ₃₈ CH ₃
9	nonano	CH ₃ (CH ₂) ₇ CH ₃	50	pentacontano	CH ₃ (CH ₂) ₄₈ CH ₃

Tabla 1-1 Principales alcanos (7).

Otro factor a tener en cuenta es la isomería. Si bien este fenómeno no se da hasta que llegamos a moléculas del tamaño del butano en adelante (4 carbonos más), es importante destacar que elementos del mismo tamaño pueden presentar distintas propiedades de solubilidad o punto de ebullición. De esta manera al hablar de un determinado compuesto no será necesario hacer referencia a su isomería si sólo nos interesa su cálculo estequiométrico, no siendo así para otros casos, donde sí se deberá indicar, como queda patente en la Figura 1-2.

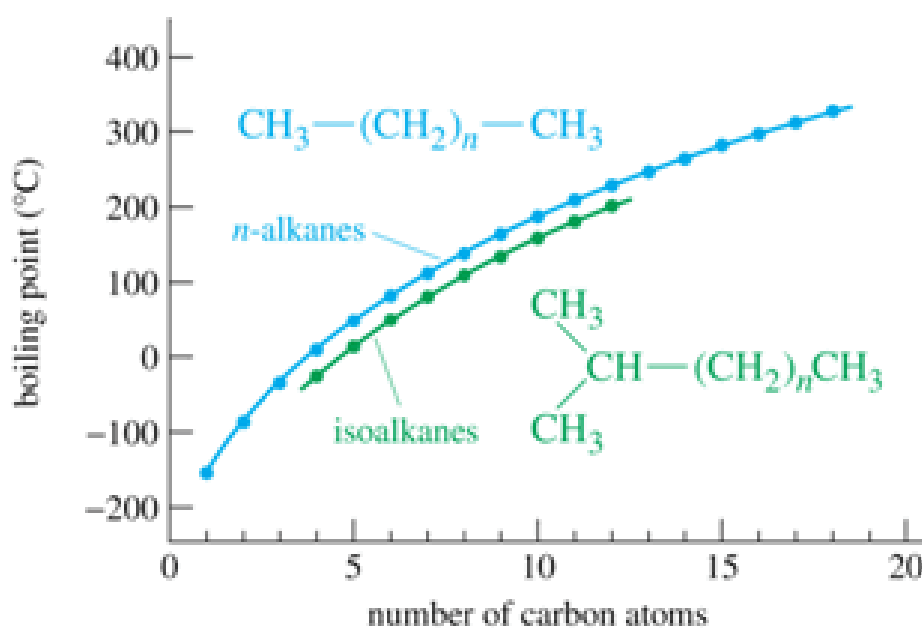


Figura 1-2 Diferencia en el punto de ebullición entre isómeros (7).

1.3.4.3 El propano

Puesto que, como se ha dicho en líneas superiores, el combustible que vamos a utilizar se trata del propano, conviene tener en cuenta algunas consideraciones acerca de este compuesto. Se trata de un compuesto gaseoso en condiciones normales pero que licua con facilidad, de ahí su interés como combustible (6).

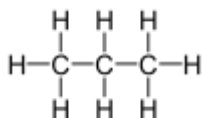


Ilustración 1 Estructura molecular del propano.

$$\text{Peso molecular } (C_3H_8) = (3 \cdot (12g/mol)) + (8 \cdot (1g/mol))$$

$$\text{Peso molecular } (C_3H_8) \approx 44 \text{ g/mol}$$

Ecuación 1.3

Encontramos el propano como elemento predominante en el gas licuado del petróleo (GLP). En esta mezcla, encontramos propano en un 60% en volumen y butano en un 40%. Las principales características del propano son de acuerdo con la Tabla 1-2.

Propiedad	Valor
Fórmula química:	C_3H_8
Masa	44.096 Kg/Kmol
Densidad del Gas (1.013 bar y 15 °C (59 °F))	1.8988 kg/m ³
Vol. Específico (1.013 bar y 21 °C (70 °F))	0.546 m ³ /kg
Punto de autoignición:	450-470°C
Punto de fusión	-187.68 °C (1013bar)
Calor latente de fusión	79.917 KJ/Kg
Punto de ebullición	-42.11 °C (1013bar)
Calor latente de vaporización	425.59 kJ/kg (1013bar)
Entalpía de formación	$\bar{h}_f^\circ = -103850 \frac{KJ}{Kmol}$
- Punto Crítico	- Punto triple
○ Temperatura Crítica: 96.74 °C ○ Presión Crítica: 42.51 bar ○ Densidad Crítica: 220.48 kg/m³	○ Temperatura del punto triple: -187.62 °C ○ Presión del punto triple: 1.724E-09 bar
- Capacidad calorífica	
○ a presión constante (Cp) (1 bar y 25 °C (77 °F)) : 0.07430 kJ/(mol.K) ○ a volumen constante (Cv) (1 bar y 25 °C (77 °F)) : 0.0654 kJ/(mol.K)	

- Razón de calores específicos (Gama:Cp/Cv) (1 bar y 25 °C (77 °F)) : 1.1364
- Viscosidad (1.013 bar y 0 °C (32 °F)) : 7.4692E-05 Poise
- Conductividad Térmica (1.013 bar y 0 °C (32 °F)) : 15.65 mW/(m.K)
- Límites de inflamabilidad en aire (condiciones Estándar de Temperatura y Presión) : 2.2-9.5 vol%

Tabla 1-2 Propiedades del propano (8).

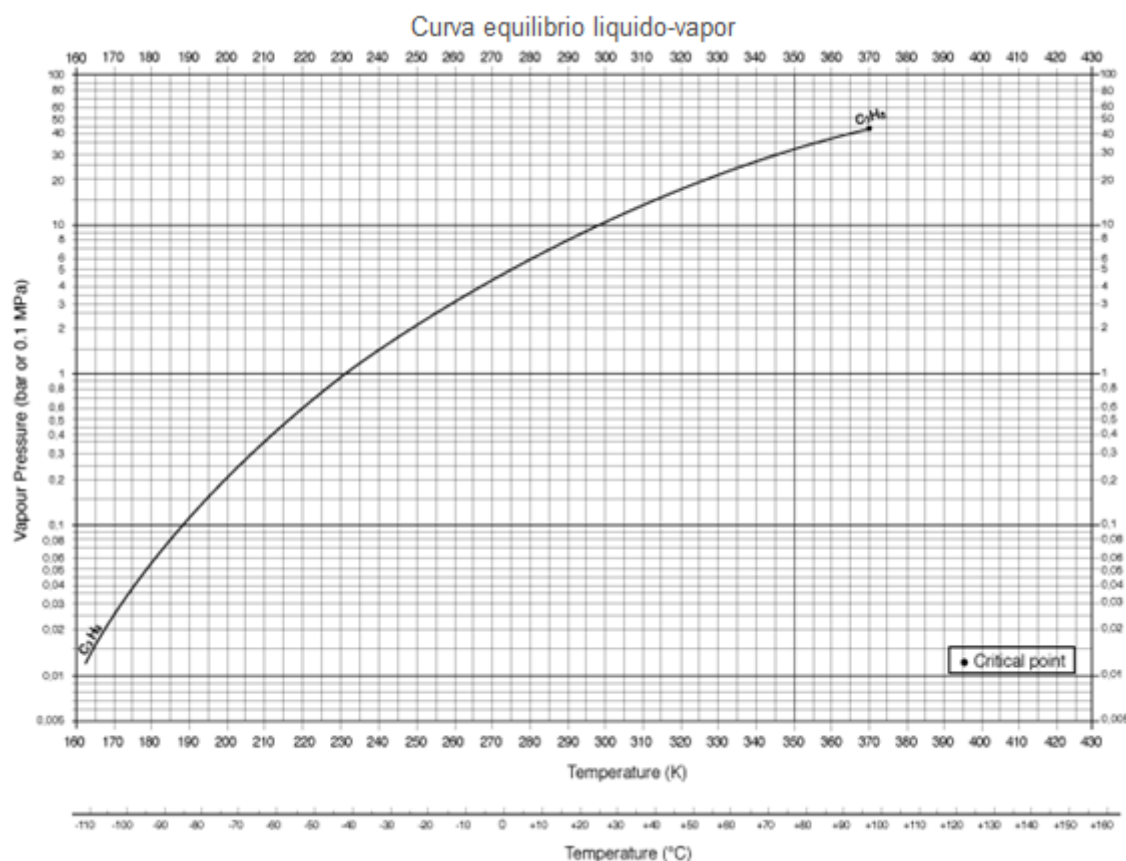


Figura 1-3 Curva equilibrio líquido-vapor (8)

A la hora de trabajar con este producto es importante tener en cuenta la compatibilidad química del mismo con otros materiales. Así pues encontramos que el propano tiene un buen comportamiento al estar en contacto con metales y plásticos, no siendo así con los siguientes elastómeros y lubricantes:

- Goma de peroil (isopreno - isopreno) (IIR)
No recomendado, hinchazón significativa.
- Cloropreno (CR)
No recomendado, hinchazón significativa.
- Silicona (Q)
No recomendado, hinchazón significativa y modificación de las propiedades mecánicas.
- Etileno - Propileno (EPDM)
No recomendado, hinchazón significativa y modificación de las propiedades mecánicas.
- Lubricante basado en hidrocarburos

No recomendado, significativa pérdida de masa por extracción o reacción química.

Mención aparte tienen las posibles impurezas que arrastre la muestra que sí que podrían tener efectos corrosivos en los metales (8) (9).

1.3.4.4 Comburente

Definido como la parte dentro de los reactivos que en la reacción de combustión hace las veces de elemento oxidante, podemos encontrar distintos compuestos químicos que tienen esta función, como el peróxido de hidrógeno o el permanganato potásico. Por su abundancia y su bajo riesgo de manipulación (según en qué concentraciones) así como no ser tóxico para el hombre, es el di-oxígeno el comburente por excelencia. Conocido popularmente como oxígeno gaseoso o simplemente como oxígeno, se presenta como O_2 . Hay que mencionar la existencia otros compuestos de oxígeno tales como el ozono (O_3), si bien de ahora en adelante, al hablar de “oxígeno” nos referiremos al primero.

El oxígeno utilizado es el atmosférico, que se presenta en mezcla con otros gases considerados inertes en las reacciones. No obstante hay que añadir que a elevadas temperaturas elementos como el nitrógeno reaccionan formando óxidos, alterando la estequiometría esperada (3) (6).

Como bien se ha mencionado en las líneas superiores, el oxígeno se encuentra en mezcla con el resto de gases atmosféricos. Las concentraciones de la mezcla varían en función del lugar pero lo hacen de forma significativa a distintas alturas. Teniendo en cuenta que la localización de nuestro equipo está prevista para un edificio estándar de no más de dos plantas, consideraremos para los cálculos las concentraciones de la atmósfera a nivel del suelo.

Gases mayoritarios

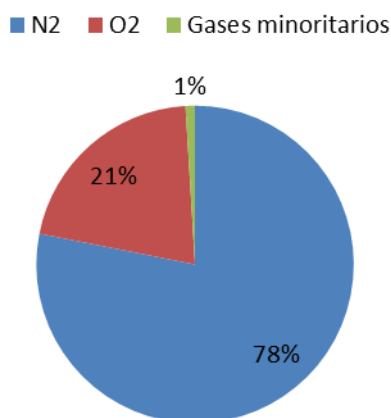


Figura 1-4. Gases atmosféricos mayoritarios.

Gases minoritarios

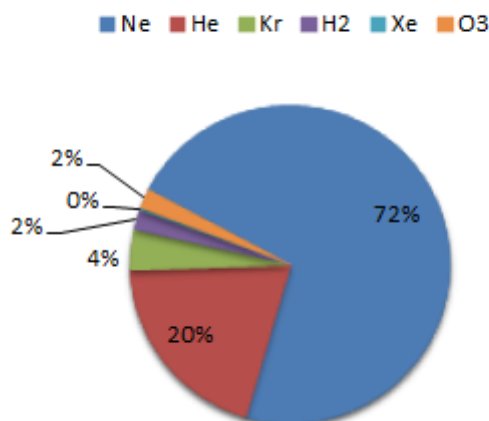


Figura 1-5. Gases atmosféricos minoritarios. Porcentaje sobre un 0.96% del volumen de aire total.

Teniendo en cuenta que la concentración de agua en la atmósfera varía de forma muy superior al resto de los componentes tanto en lugar y altura como en tiempo, normalmente se hace referencia a las proporciones de los gases en aire seco. No obstante la media de concentración de aire del orden del 1% en volumen por lo que se puede considerar el tercer gas más abundante por detrás del nitrógeno y del oxígeno para las capas más bajas de la atmósfera.

En lo que respecta al resto de gases, el aire seco está compuesto en volumen por un 78.08% de nitrógeno molecular (N₂), un 20.93% de oxígeno y a un 0.93% de Argón. El resto de la mezcla la forman otros gases minoritarios como el CO₂, NH₄, O₃ y óxidos de nitrógeno, además de partículas en suspensión como aerosoles o polvo de arena (Figura 1-4 y Figura 1-5). Hay que mencionar que existen ligeras variaciones en la proporción de los gases en función de la fuente utilizada (10).

Gas	Porcentaje en moles o volumen
N ₂	78.09 %
O ₂	20.93 %
Ar	0.93 %
CO ₂	0.03 %
Ne	1.8×10^{-3} %
He	5.0×10^{-4} %
Kr	1.0×10^{-4} %
H ₂	5.0×10^{-5} %
Xe	8.0×10^{-6} %
O ₃	5.0×10^{-5} %

COMPONENTES	VOLUMEN % (aire seco)
Nitrógeno (N ₂)	78.08
Oxígeno (O ₂)	20.95
Argón (Ar)	0.93
Dióxido de carbono (CO ₂)	350 ppmv
Neón (Ne)	18.20 ppmv
Helio (He)	5.24 ppmv
Metano (CH ₄)	2 ppmv
Criptón (Kr)	1.1 ppmv
Hidrógeno (H ₂)	0.5 ppmv
Óxido nítrico (N ₂ O)	0.3 ppmv
Xenón (Xe)	0.08 ppmv
Monóxido de carbono (CO)	0.05-0.2 ppmv
Ozono (O ₃)	0.02-0.03 ppmv

Tabla 1-3 Proporción de gses de acurdo con distintsa fuentes (3) (7).

Por ser estas concentraciones variables se realiza una simplificación a fin de poder abordar los cálculos de las reacciones. La idea consiste en suponer como comburente aire seco formado en

exclusiva por oxígeno y nitrógeno en una proporción de 3.76 moléculas de N_2 por cada molécula de O_2 .

$$79\% \text{ de } N_2, 21\% \text{ de } O_2 \rightarrow (79/21)=3.76$$

$$\text{Peso molecular}_{(aire)} = (0.79 \cdot (14 \text{ g/mol}) \cdot 2) + (0.21 \cdot (16 \text{ g/mol}) \cdot 2)$$

$$\text{Peso molecular}_{(aire)} = 28.84 \text{ g/mol}$$

Ecuación 1.4

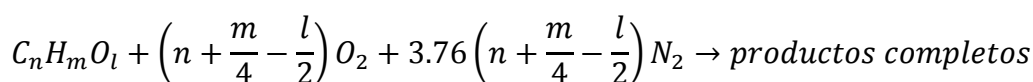
1.3.5 La Estequiometría de la Reacción de Combustión

En líneas generales, la reacción de combustión se estudia como una reacción en la que a partir de unos reactivos, obtenemos unos productos. Por el tipo de combustibles que se utilizan, los productos que se obtienen son típicamente dióxido de carbono y agua. Esto es cierto para la mayoría de los casos pero en la realidad se generan una mayor variedad de moléculas como puede ser óxidos de nitrógeno.

Así pues, para determinados combustibles que cuentan con moléculas de nitrógeno o de azufre en su estructura es común la generación de SO_2 , HC , y diversos óxidos de nitrógeno. En el caso de estos últimos por estar el nitrógeno presente en el aire pueden generarse sin existencia de dicho átomo en el combustible. De esta forma encontramos generación de óxidos de nitrógeno en procesos que generan elevadas temperaturas. Caso distinto es el del monóxido de carbono (CO), que suele ser debido a una mala combustión por falta de oxígeno en la mezcla aire-combustible.

Dentro de la una misma reacción podemos encontrar diversas variantes. En el caso que nos concierne dichas variantes son debidas a la relación de combustible-comburente. Según esta relación fijaremos como reacción estequiometria perfecta aquella en que todos los reactivos reaccionan entre sí y en su totalidad. Por tomar el comburente de la mezcla de gases que es el aire, en lugar de hacer referencia al oxígeno puro, hablaremos de la relación de aire-combustible. Tomando la consideración anterior por la que simplificamos la mezcla de aire en los cálculos como una formada por oxígeno y nitrógeno en relación atómica de 1 a 3.76 (un átomo de oxígeno por cada 3.76 átomos de nitrógeno) (2) (3).

Considerando la fórmula estequiométrica general para un combustible $C_nH_mO_l$ en el que la combustión es completa y que se ajuste a la Reacción 1-2, podemos establecer una relación ideal de aire-combustible aproximando el peso molar del aire a 28.84 Kg/Kmol. De esta forma y suponiendo un rendimiento, que en caso de la reacción teórica es un tanto por ciento del teórico, establecemos que:



Reacción 1-2

$$RAC_{st} = \frac{m_a}{m_c} = \frac{n_a M_a}{n_c M_c}$$

$$RAC_{st} = \frac{4.76 \left(n + \frac{m}{4} - \frac{l}{2}\right) (28.84) \%teórico}{(1)(12n + m + 16l)} \frac{100}{100}$$

$$RAC_{ST} = 0.343 \frac{(4n + m - 2l)}{(12n + m + 16l)} (\%teórico)$$

Ecuación 1.5

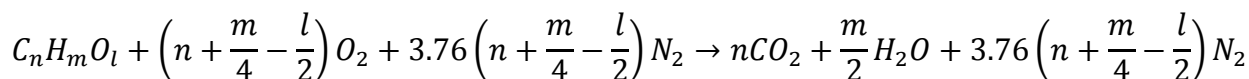
Para un entorno con exceso de aire se ajustaría a:

$$RAC_{real} = 0.343 \frac{(4n + m - 2l)}{(12n + m + 16l)} (100 + \%exceso)$$

Ecuación 1.6

1.3.5.1 Reacción teórica completa

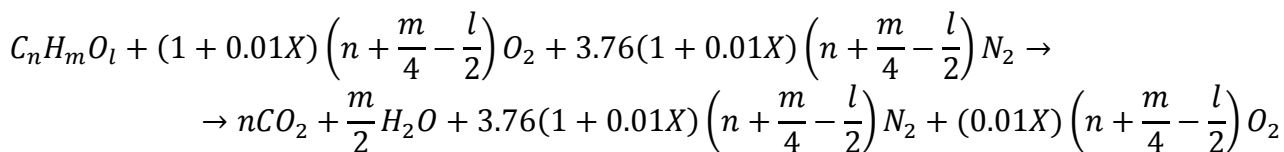
Entendiendo como teórica aquella reacción cuyo rendimiento es del 100% y con una relación aire-combustible perfecta, fijamos la fórmula general que se ajusta a la a continuación expuesta como referencia y patrón.



Reacción 1-3

1.3.5.2 Reacción con aire en exceso

En la mayoría de los casos las distintas cámaras de combustión toman aire atmosférico en exceso. En algunos casos es debido a la configuración del equipo que, como ocurre en algunos motores, permite la regulación del caudal de combustible no siendo así con el de aire. En otros sistemas como los mecheros, si bien se utilizan premezclas de aire-combustible, la llama se produce al aire libre, por lo que contará de nuevo con aire ilimitado.



Reacción 1-4

Otras razones por las que nos puede interesar contar con aire en exceso es el estudio del comportamiento de la reacción ante distintas concentraciones de combustible, como es el caso del diseño que se busca realizar en este trabajo. De acuerdo con esto, es sabido que en determinadas reacciones reales las combustiones se generan mejor con distinta cantidad de aire que el estequiométrico (Figura 1-6), como queda demostrado en distintos estudios (2).

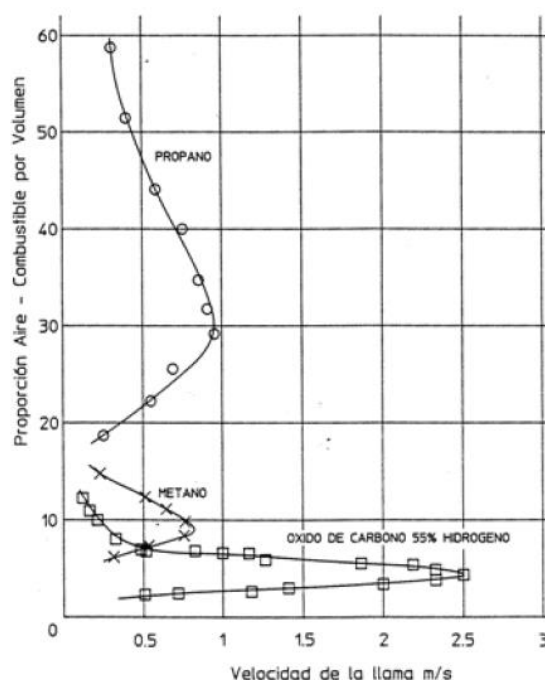
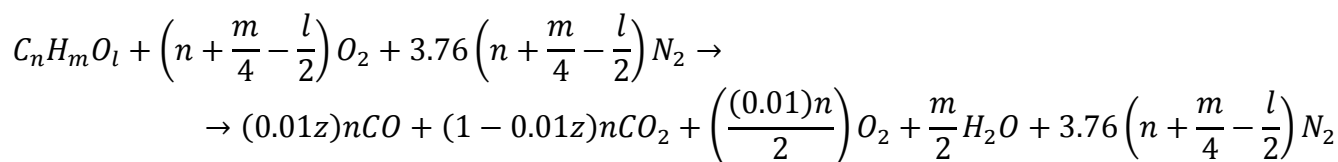


Figura 1-6 Variación de velocidad para distintas mezclas (2)

1.3.5.3 Reacción con defecto de aire

En el caso de tener una mezcla con aire insuficiente para quemar todo el combustible, vamos a encontrar en el lado de los productos moléculas de C, CO o, en último caso, el propio combustible. Generalmente ocurre que en atmósferas de bajo contenido en oxígeno, debido a la falta del mismo, no es posible oxidar por completo al combustible hasta obtener CO₂ y agua. Esto es debido entre otras razones a que el oxígeno tiene mayor tendencia a unirse con el hidrógeno que con el carbono. Suele ocurrir que todos los átomos de H den lugar a la generación de agua, quedando “huérfanos” átomos de C. Es por ello que se forman otras sustancias de mayor nivel energético, sustancias que en una reacción óptima sólo existen durante breves instantes antes de formar los productos finales. De acuerdo con esto, la aparición de las mismas entre los productos son síntoma de una combustión ineficiente, así mismo, cabe destacar el riesgo de algunas de ellas como es el caso del monóxido de carbono, popularmente conocido por su alta toxicidad.¹



Reacción 1-5 Estudio de la llama

¹ Generalmente en las reacciones reales encontramos estas partículas, a pesar de utilizar aire en exceso, por razones

1.3.6 Introducción

Una vez estudiada la reacción desde el punto de vista de lo que ocurre a nivel atómico, el siguiente paso es estudiar esta misma reacción a un nivel más superficial. Hablamos de la propagación de la reacción, más concretamente de la llama.

Como es sabido, el objeto de este estudio es realizar una simulación de un llama de propano para lo cual es imprescindible establecer los parámetros que se esperan recrear y medir. Así pues, a continuación expondremos de forma breve las características y comportamiento de una llama (3) (11) (12) (13).

1.3.7 La llama

Entendemos “llama” como el efecto que generan las reacciones de combustión en la que la mezcla de gases formada por reactivos y productos generan una emisión de luz. No obstante y a pesar de todas las características, es el perfil de temperaturas lo que más nos interesa. Uno de los problemas que encontramos a la hora de recoger datos, es establecer un sistema de coordenadas. En el caso de desplazamientos por un tubo esto resulta relativamente sencillo, no siendo así en el caso de las llamas al aire.

Atendiendo a la velocidad hablaremos de detonaciones para propagaciones supersónicas o de deflagraciones para aquellas que siendo subsónicas superen la velocidad de 1m/s. Si bien es cierto que algunos estudios afirman alcanzarse velocidades próximas al metro por segundo en la combustión del propano para mezclas con determinados grados de riqueza, difícilmente superaremos esta cifra por lo que no hablaremos de deflagración en cuanto a llamas de propano. En cuanto al tipo mezcla, esto hace referencia a la forma en que combustible y comburente se combinan. Se forman así dos grandes grupos:

Llamas de premezcla. Son aquellas en los que el aporte de aire (aire primario) se realiza en un lugar ajeno a aquel donde se genera la reacción. Generalmente tiene a fin favorecer la mezcla aire-gas completándola después con aire tomado de la atmósfera (aire secundario). De este tipo hablaremos con más profundidad por ser la que vamos a utilizar.

Llamas de difusión. Conocidas vulgarmente como llamas de vela, son aquellas que, sin más aporte de aire que el atmosférico, consiguen realizar la mezcla aire-gas mediante las turbulencias generadas por la propia llama. De esta forma una vela se sustenta vaporizando la cera que, tras ascender por el movimiento de los gases, se mezcla con el aire generando la combustión.

1.3.8 Perfil de temperatura

Como se ha dicho en anteriores líneas, el estudio de los valores de temperatura es de vital importancia. Así pues, para tratar el tema lo enfocaremos desde los dos escenarios posibles, la llama propagándose en el interior de un conducto cilíndrico de diámetro constante y la propagación libre. Si bien es cierto que ambos casos presentan matices propios de cada uno, no son sino variantes de un mismo caso general (11).

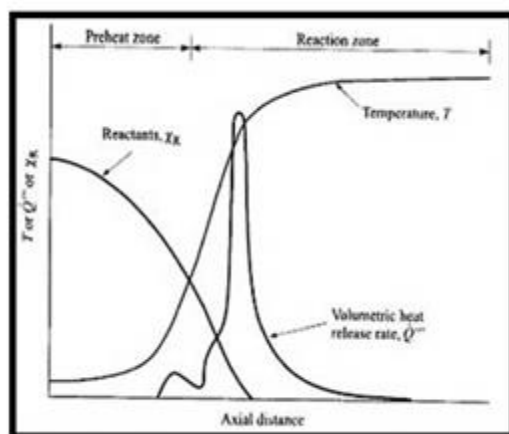


Figura 1-7 Perfil de temperaturas de los gases en combustión (4)

Una de las principales diferencias de cara a estudiar cada caso, es la velocidad de propagación. En el caso de propagación en el interior de un tubo el frente de llama tiene una determinada velocidad de avance o no en función de las velocidades de los gases de la mezcla y del avance de la llama. En el segundo, este efecto se traduce en un desprendimiento de la llama, un retorno o una llama estable según las circunstancias.

En líneas generales diremos que el frente de la llama está compuesto por la mezcla de gases (reactivos) que a medida que, incrementan su temperatura, en la zona de precalentamiento, fruto del calor generado por el frente de llama, se descomponen en los productos finales generando un desprendimiento de calor que mantiene la reacción en cadena junto con una disminución de la densidad (Figura 1-8).

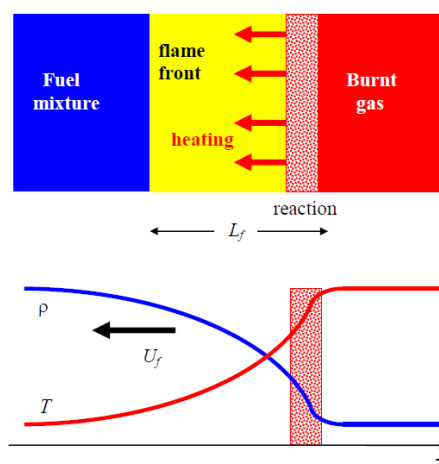


Figura 1-8 Esquema de la propagación de la combustión (11)

Se puede observar como en el modelo de llama de propagación por frente lineal, en la zona del frente de llama tendríamos un máximo de temperatura así como un mínimo de densidad. La caída de las presiones va acompañada de la destrucción de los reactivos.

Tomando una serie de presunciones tales como sistema estacionario de flujo constante, con propagación normal, así como una única entrada de mezcla opuesta a la salida de los productos podemos igualar las velocidades de cada zona. Para ello nuevamente suponemos la llama como un elemento de una sola dimensión (11).

Siguiendo todas estas consideraciones podemos fijar una ecuación de continuidad en función de la densidad, velocidad y área, que nos relaciona la velocidad de propagación de la llama con la de los gases antes y tras la combustión (6).

$$\rho_u S_L A = \rho_u V_u A = \rho_b V_b A$$

Ecuación 1.7

Donde “u” y “b” hacen referencia respectivamente a los reactivos y a los productos, “ ρ ” a la densidad y “S” y “V” a las velocidades de la llama y de los gases.

Para facilitar el estudio, los autores que han tratado el tema recomiendan una división en dos. Por una lado la zona de precalentamiento y por otro la de reacción. Hay que mencionar que a presiones próximas a la atmosférica la zona de reacción es una fina lámina de un milímetro de espesor aprox. lo que facilita la observación y diferenciación de ambas partes.

La zona de reacción a la que se hace referencia es la conocida como zona de reacción primaria o química rápida de en torno a 1mm de espesor. En ella se descomponen los reactivos dando lugar a especies intermedias. Existe una segunda zona conocida como zona lenta en la cual los productos intermedios ($CO+OH+CO_2+H$) se oxidan dando lugar a los productos finales (CO_2+H_2O). Ésta segunda, generalmente más ancha que la anterior y de tamaños más variables es característica de las mezclas de aire-combustible parciales. No suele producirse en premezclas de aire completas con exceso de aire. Como se puede apreciar en la Figura 1-9, las dos zonas de reacción quedan patente en los distintos tipos de llama. Así pues diversas mezclas con distintas riquezas dan lugar a llamas más azules para combustiones ricas en aire, o a llamas más amarillas para aquellas cuya mezcla es pobre en oxígeno. El color de la llama depende del combustible y varía de unos a otros.



Figura 1-9 Generación de llamas amarillas para combustiones de baja eficiencia (6).

2 ESTADO DEL ARTE

2.1.1 Velocidad de propagación

A la hora de hablar de la velocidad en lo referente a la propagación de las llamas podemos hacer referencia a diversos puntos. De cara a facilitar el estudio planteamos dos escenarios. El primero es el de la llama en el interior de un conducto mientras que el segundo se centra en el cono que la llama adopta al producirse la combustión en el límite exterior de éste, punto que por su importancia abordaremos aparte.

En el caso de la propagación por un conducto suponemos un flujo laminar (Figura 2-1) y hablamos de tres velocidades. Por un lado tenemos la velocidad de quemado o de la llama “ S_l ” (velocidad de deflagración según la mezcla) que se corresponde con un valor determinado para la mezcla utilizada. En segundo lugar, tenemos la velocidad del gas “ V_g ”, esta es función del caudal que estemos insuflando al conducto (a la hora de llevar a cabo el montaje experimental es necesario tener en cuenta las correcciones en los caudales por temperatura y presión). Por último, hablamos de la velocidad del frente de llamas “ V_f ”. Ésta no es más que suma de las dos anteriores. Nótese que la velocidad de quemado y las del gas son opuestas en sentido (14).

$$V_f = S_l + V_g$$

Ecuación 2.1

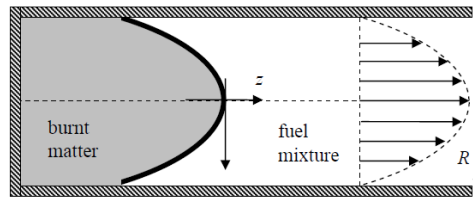


Figura 2-1 Vectores de velocidad en el gas de mezcla a su paso por un conducto cilíndrico (11)

Por tanto, cuando la velocidad de quemado se iguala a la del gas, el frente de llama permanece estático respecto a una zona del tubo. Existen diversos métodos experimentales para calcular la velocidad de avance. El más simple consiste en a partir de una llama ya generada, cortar la admisión de la mezcla. Eliminando así la componente V_g como se muestra en la Ecuación 2.2. De esta forma tomando como referencia dos puntos del conducto a distancia ΔX , y midiendo la diferencia de tiempos Δt podemos calcular V_f de acuerdo con la Ecuación 2.3. Esto queda patente en el ensayo mostrado en la Figura 2-2.

$$V_f = S_l$$

$$V_g = 0$$

Ecuación 2.2

$$V_f = \frac{\Delta X}{\Delta t}$$

Ecuación 2.3



Figura 2-2 Medición de la velocidad de propagación en un conducto (2).

Diversos estudios han calculado los parámetros de los que depende la velocidad del frente de quemado (14).

$$V_f = S_l \approx \frac{1}{\rho} \sqrt{\frac{\lambda}{C_p}} \omega$$

Ecuación 2.4

Donde ρ es la densidad de cada mezcla, λ depende de la composición de la mezcla y de la temperatura, ω depende tanto de P y T , así como del orden de reacción y de parámetros cinéticos, C_p depende de la composición y temperatura. Desarrollando la ecuación 2.4, mostrada sobre estas líneas, determinamos que la velocidad de llama está directamente relacionada con los siguientes aspectos:

2.1.1.1 Tasa de aireación o exceso de aire

Se entiende como la tasa de aireación la relación de la mezcla aire-combustible. Como se ha comentado en anteriores puntos, no es necesaria una relación estequiométrica para que se genere una llama permanente, si bien la velocidad de la misma, para unas mismas condiciones de presión y temperatura, varía con la mezcla.

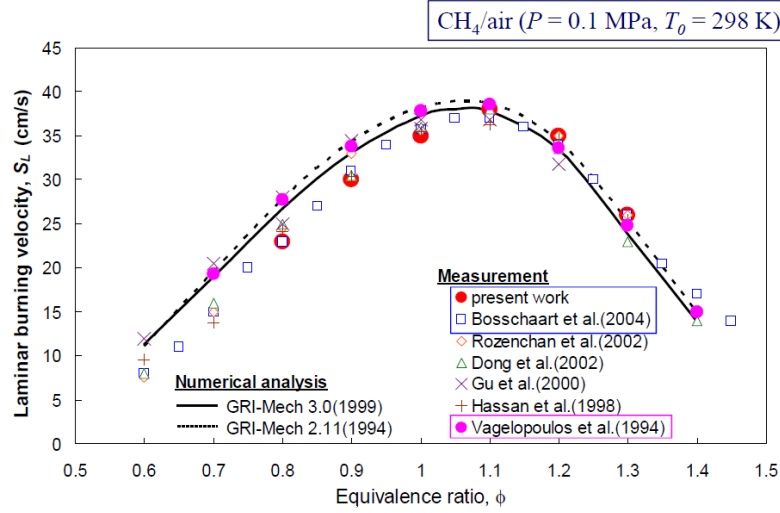


Figura 2-3 Tasa de aireación (15)

2.1.1.2 Naturaleza del combustible y del comburente

Sin ánimo de ser exhaustivos, simplemente comentar respecto a este punto que la presencia de elementos inertes en la mezcla del aire ha demostrado ralentizar la reacción. Encontramos pues que el quemado de sustancia con oxígeno puro nos permite obtener velocidades de llama del orden de 3.6m/s en el caso del propano para temperaturas de 0°C, obteniéndose para las mismas temperaturas velocidades de 0.43m/s al usar aire atmosférico (16).

2.1.1.3 Temperatura y presión de premezcla

La medida en que la presión y la temperatura de la mezcla de gases influyen en la velocidad de la llama ha sido demostrada experimentalmente. Los resultados obtenidos determinan que si por un lado un aumento de la temperatura acelera la reacción, el efecto contrario ocurre al elevar la presión (15).

$$V_{f1} = V_{f0} \left(\frac{T_1}{T_0} \right)^{1.75}$$

Ecuación 2.5

Donde V_{f1} y V_{f0} son velocidades de llama a temperatura T_1 y T_0 respectivamente, cuando éstas oscilan entre los 20 y 400°C (17).

Para el caso de los efectos de la presión se obtiene que combinada con la temperatura se ajusta a la siguiente ecuación 2.6 (15).

$$V_{f1} = V_{f0} \left(\frac{P_1}{P_0} \right)^{\alpha} ; \alpha < 0$$

Ecuación 2.6

2.1.1 Medición de ángulo del cono

El estudio del comportamiento de la llama en una atmósfera libre y sin confinamiento de la misma, sigue los mismos principios que en el modelo de llama en el interior de un tubo. Factores como la tasa de aireación, la naturaleza del combustible-comburente o la temperatura y presión, siguen siendo igual de determinantes para la velocidad de propagación de la reacción.



Figura 2-4. Cada combustible tiene asociado un color de llama (18).

La llama está formada por varias capas que se superponen entre sí, la forma, color o la temperatura son características específicas de cada una en función del combustible (Figura 2-4) y las condiciones en las que se lleva a cabo el quemado. En combustiones poco eficientes con hidrocarburos es típica la aparición de llamas amarillentas e incluso rojas en lugar de las azules. Este efecto se produce por la no combustión completa de la molécula debido a la generación de moléculas de carbono o de monóxido. Si bien todas estas características pueden ser objeto de estudio de cara a distintos experimentos, en lo que a nosotros respecta, sólo nos interesa la primera capa que compone la llama. Más concretamente la zona del triángulo donde se genera la combustión primaria (Figura 2-5). En esta zona se produce la primera descomposición del combustible de igual forma que en la llama en su propagación por un conducto. Las características de esta zona concreta permiten calcular determinados parámetros que a su vez nos aportan los datos necesarios para estudiar las propiedades de la combustión que se esté generando.

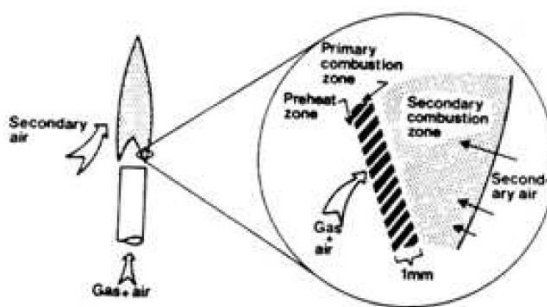


Figura 2-5 Esquema de las partes de una llama de premezcla (15).

Si en el caso que nos ocupaba en las líneas superiores (propagación en tubo), podíamos calcular la velocidad de propagación, con mayor o menor grado de precisión, simplemente tomando como herramientas una regla y un cronómetro, en este segundo utilizaremos la trigonometría. A pesar de que las ecuaciones trigonométricas que a continuación explicaremos no presentan un grado excesivo de dificultad, los métodos de medición sí requieren mayor complejidad. Esto se debe a las técnicas de medición de ángulos por láser que son requeridos para poder efectuar lo más fielmente posible los ensayos en laboratorio.

Para realizar el estudio del comportamiento de la llama en atmósfera abierta hemos de partir de los supuestos a continuación expuestos:

- Flujo laminar para la mezcla de aire primario
- Velocidad constante de deflagración en todo el frente
- Superficie de combustión primaria en forma de cono perfecto
- Llama estable generada en desde la base

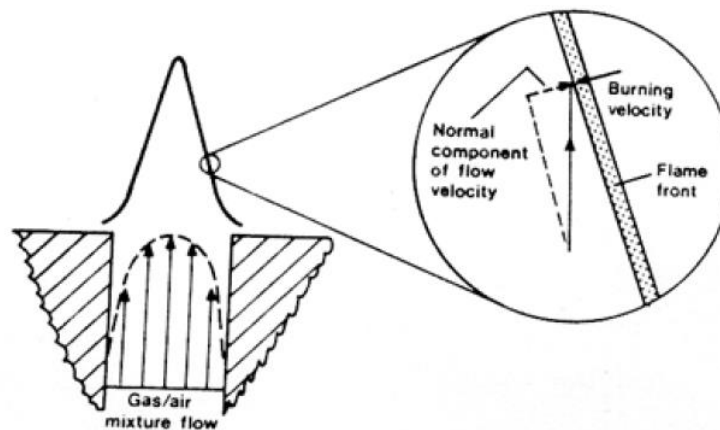


Figura 2-6 Estructura del cono de llama (13).

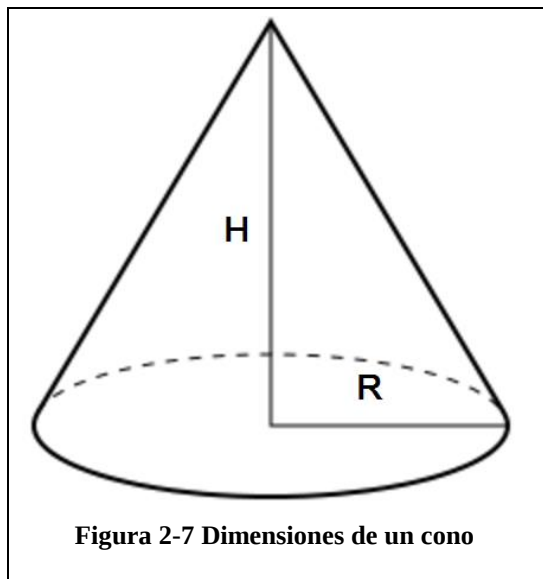
Respecto a este último punto, es importante mencionar la existencia de distintas posibles formas en las que se puede encontrar la llama en función de los caudales usados. Así pues, con caudales insuficientes podemos encontrarnos con un retroceso de la llama hacia el interior del tubo. En el caso opuesto, para caudales excesivos que generen altas velocidades, se da un efecto de desprendimiento de la llama que termina por apagarla. Los casos intermedios restantes se resumen en dos. Por un lado, tenemos el caso ideal de una llama que se genera desde la misma base de la salida del conducto (caso del estudio) y, por otro, el de la llama que “flota” en el aire y que no está en contacto con la base. El método que se pretende utilizar para el estudio de la reacción requiere de la existencia de una llama estable que se genere desde la boquilla del inyector. Debido a las características del equipo, nos resultaría cuantitativamente más laborioso tratar de realizar mediciones en el resto de casos.

2.1.2 Medición de la velocidad de propagación

Para el estudio de la velocidad en el cono de la llama partimos de las siguientes premisas, las cuales se suman a las supuestas para realizar el estudio del comportamiento de la llama en atmósfera abierta, a fin de hacer los cálculos abarcables a pesar de asumir errores a causa de las aproximaciones (14):

- Velocidad de llama constante
- Geometría del cono perfecta
 - Radio de la base constante
 - Altura constante
 - Área constante
- Flujo de mezcla constante e invariante en el tiempo

Suponiendo la formación de un cono perfecto de radio en la base igual al de la salida del quemador, la idea es poder determinar las características de éste tratando de definir la altura. Para ello, realizando una medición del ángulo podemos calcular la altura.



Para un cono de altura H y radio R , con un vértice de ángulo β , tenemos que:

$$\tan \beta/2 = R/H$$

Ecuación 2.7

Por otro lado, tenemos que el gas de mezcla se desplaza en la dirección del eje del cono con velocidad media V en la superficie de éste de área A (excluyendo la base). Se cumple que:

$$V = Q/A$$

Ecuación 2.8

Establecemos con esto una relación entre el caudal y el área. Teniendo en cuenta que A depende de H y R , al ser R y Q ctes. de acuerdo con los supuestos, la idea será relacionar V con R . Para ello plantearemos lo siguiente:

Partiendo del cono de dimensiones H , R y β , siendo el ángulo α complementario a β , decimos que para una mezcla que se desplaza a una velocidad V en la dirección del eje del cono, tendremos un frente de llama de velocidad V_b sobre la superficie perpendicular a la superficie del cono (Figura 2-6) (Ecuación 2.9) según el teorema de Gouy-Stodola (19). Sin ánimo de extendernos en demostraciones, de las anteriores premisas podemos concluir, de acuerdo con otros estudios al respecto en la materia, con que la relación entre la altura del cono y las velocidades de la mezcla y del frente de llama es la Ecuación 2.11 (15).

$$V = V_b * \sin \alpha$$

Ecuación 2.9

Teorema de Gouy-Stodola (19)

$$W\lambda = Sg Ta$$

Ecuación 2.10

$$h = R \sqrt{\frac{V^2}{V_b^2} - 1} ; \text{ si } V^2 \gg V_b^2 \rightarrow H = R \frac{V^2}{V_b^2}$$

Ecuación 2.11

El siguiente punto a considerar es la forma de llevar a cabo la medición (Figura 2-8). Para dicha medición del ángulo del cono, y por ende la de las dos velocidades tratadas de forma indirecta, se ajusta el haz de luz de un láser calibrado a las paredes de éste o en su defecto se realiza una fotografía y se mide el ángulo deseado mediante algún programa de CAD.



Figura 2-8 Medición del ángulo del cono mediante software de CAD (6)

2.1.3 Tipos de quemadores en el mercado actual

Actualmente en el mercado existen un sin fin de quemadores con múltiples propósitos. Desde los grandes generadores de calor utilizados en las centrales térmicas hasta los mecheros utilizados para encender cigarrillos pasando por las cocinas de gas o las estufas, todos parten de la misma idea, la producción de calor a partir de la energía que aporta el combustible.

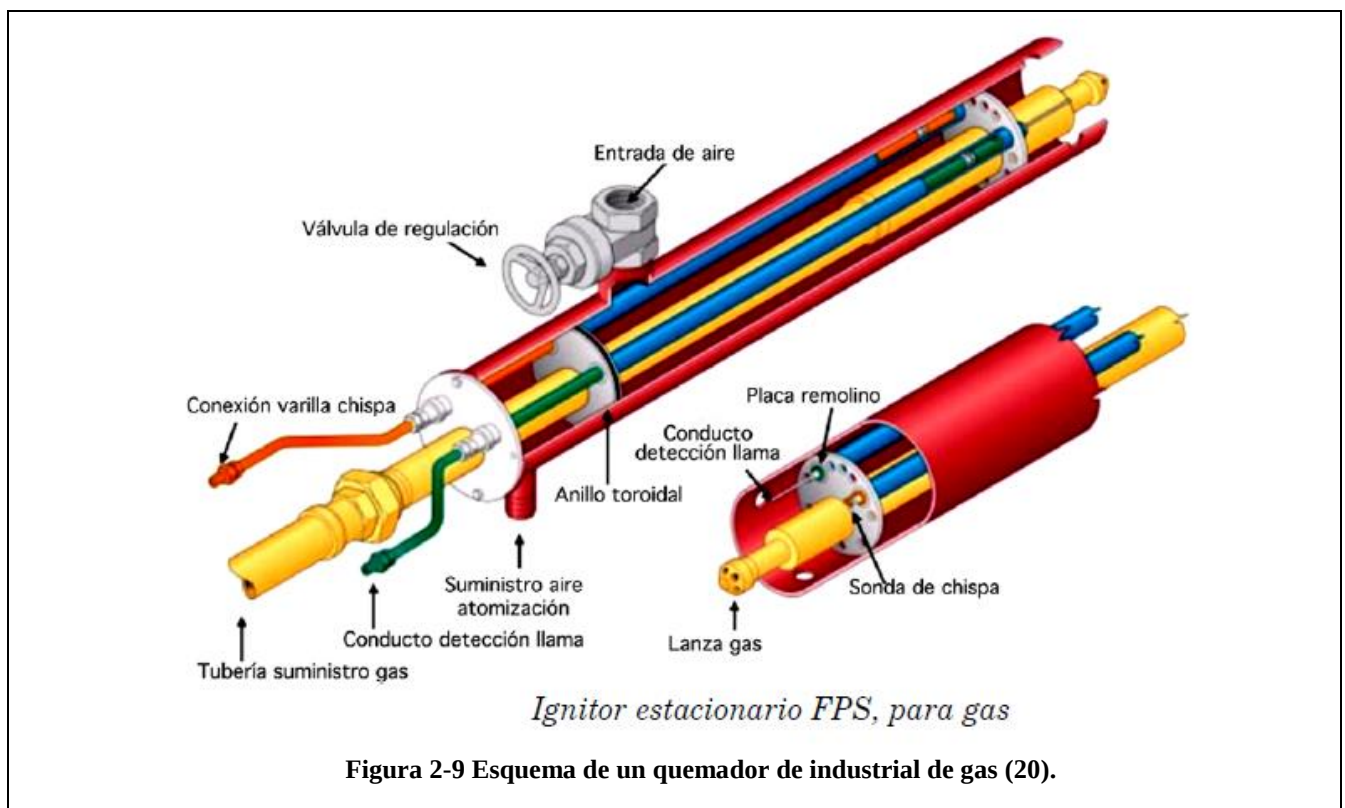


Figura 2-9 Esquema de un quemador de industrial de gas (20).

Los distintos tipos de quemadores se enfrentan entre otros muchos a un problema y éste es el cómo conseguir mezclar combustible y comburente de forma óptima. Mismo problema encontramos en otras máquinas térmicas que han resultado este problema de múltiples formas. Algunas, como las turbinas de gas (nombre que reciben no por el combustible que no se trata de gas si no de combustible líquido pulverizado) toman el aire a altas presiones para mezclarlo con el combustible mediante turbulencias, otros como los muchos motores diésel cuentan con turbo-compresores para enriquecer la mezcla de aire.

La gran diferencia a la hora de tener en cuenta el tipo de mezclado de aire reside en el lugar en el que se va a llevar a cabo la reacción. Encontramos pues que para motores de combustión interna en los que la mezcla aire-combustible no está en contacto con la atmósfera, se busca por lo general una mezcla con exceso de aire a fin de quemar el mayor combustible posible. En el caso de quemadores con generación de llama al aire libre, se busca hacer una premezcla que suele ser con defecto de aire. Una vez en contacto con la atmósfera, el oxígeno existente en ella completa la relación estequiométrica generando exceso de aire.

Dentro de la gama de mecheros de combustión abierta encontramos de nuevo una amplia variedad (21), estos se clasifican generalmente atendiendo a la forma en que generan el gas de premezcla, si bien los más utilizados y simples de los laboratorios son los mecheros Bunsen, los cuales permiten generar una premezcla de aire-combustible de distinta composición tomando aire atmosférico mediante efecto Venturi, o los tipo Meker-Fisher, muy similares a los anteriores en la forma de generar la premezcla, difieren de estos en el quemador que presenta una mayor superficie lo que genera una llama más ancha en su base.



Figura 2-10 Mecheros Meker izq. y Bunsen dch. (22)

También utilizado en los laboratorios, con un propósito más próximo al objeto de este trabajo, encontramos un tipo de mechero denominado McKenna. Estos últimos permiten generar mezclas de alta riqueza a fin de estudiar los rendimientos de las reacciones en profundidad. Su aplicación más común es la calibración mediante laser para llamas planas gracias al sofisticado sistema que es su base junto a la circulación de un co-flujo en el borde del quemador (23).

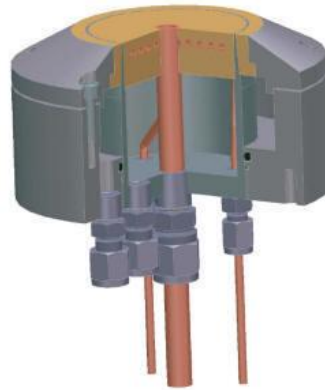


Figura 2-11 McKenna Burner (24)

2.2 Computational Fluid Dynamics (CFD)

2.2.1 Introducción

En este apartado se pretende comentar algunos trabajos relacionados con el ámbito de este proyecto en cuanto a la CFD respecta. Se explica así la idea general de estas simulaciones, las aplicaciones para las que se utiliza y las ecuaciones, principios y métodos de cálculo que sustentan las mismas.

2.2.2 ¿En qué consiste la CFD?

La Dinámica de Fluidos Computacional, también llamada CFD es una de las ramas de la mecánica de fluidos que utiliza métodos numéricos y algoritmos para resolver y analizar problemas sobre el flujo de sustancias. Según su acrónimo en inglés, compone un conjunto de técnicas de simulación por ordenador que generan unos resultados muy cercanos a la realidad con unos costes moderados. Sin embargo, la inversión necesaria para realizar los ensayos experimentales es más elevada. Las posibilidades que hacen este análisis viable son las siguientes.

- Reducción del tiempo de desarrollo y coste de nuevos diseños.
- Posibilidad de analizar sistemas o condiciones muy difíciles de simular experimentalmente: velocidades hipersónicas, temperaturas muy altas o bajas, movimientos relativos, entre otras.
- Capacidad para estudiar sistemas bajo condiciones peligrosas e incluso en condiciones superiores a las límite.
- Posibilidad de estudiar sistemas en los cuales sería muy complicado o incluso imposible llevar a cabo experimentos controlados.
- La precisión de los resultados es ilimitada.

Hasta el final de los 60, los ordenadores no alcanzaron velocidades de cálculo suficientes para resolver casos sencillos. La primera simulación numérica (aun sin ordenadores) del flujo alrededor de un cilindro fue realizada en 1933 en Inglaterra por A. Thom, y comunicada por el propio G.I. Taylor. Similares resultados fueron obtenidos por M. Kawaguti en Japón, resolviendo las ecuaciones de Navier-Stokes para el flujo alrededor de un cilindro para un número de Reynolds de 40.

A partir de finales de la década de 1950 y en toda la década de los sesenta, la división teórica de la NASA situada en Los Álamos (LANL) investigó la dinámica de fluidos computacional, aportando

numerosos modelos numéricos que hoy en día siguen siendo utilizados, como el conocido modelo k- ϵ (k-épsilon) en 1967, que fue denominado luego como q-d por las limitaciones de los editores de texto de la época. En esta década la industria aeroespacial integró las técnicas CFD en el diseño, investigación, desarrollo y fabricación de motores. Estos métodos han sido aplicados más recientemente a otros ámbitos como el diseño de motores de combustión interna o cámaras de combustión de turbinas de gas y calderas. Actualmente los fabricantes de automóviles utilizan continuamente estas técnicas para predecir fuerzas de arrastre, flujos de aire en el vano del motor o los sistemas de ventilación del habitáculo, haciendo que los vehículos actuales sean más seguros, confortables y eficientes.

El análisis CFD es ampliamente utilizado por ingenieros y científicos para un amplio espectro de aplicaciones, como por ejemplo:

- **Industria automovilística**, en la que prima el estudio de la aerodinámica de vehículos, pero que también potencia el análisis de la climatización del habitáculo interior, de la refrigeración de discos de freno y bloque motor o el flujo en conductos de descarga y válvulas de distribución.

- **Industria aeroespacial**, centrada en la aerodinámica de transbordadores, de aviones supersónicos y cazas militares y de cohetes. También se estudia el flujo en condiciones cercanas a la ingravidez, así como las condiciones de salida y reentrada de vehículos espaciales.

- **Industria aeronáutica**, volcada en el estudio de perfiles aerodinámicos para alas de aviones comerciales, en la caracterización del flujo alrededor del fuselaje así como en el diseño de trenes de aterrizaje.

- **Industria naval**, interesada en las características de las hélices de propulsión y en el diseño óptimo de carenas de barcos y submarinos. También se emplean estas técnicas para mejorar las prestaciones de barcos de competición.

- **Industria de fabricación de motores**, tanto alternativos de combustión interna como propulsores de aviones y helicópteros, centrados en el análisis del flujo interno, la eficiencia y la transmisión de potencia así como de las transferencias de calor y refrigeración asociadas.

- **Industria de generación eléctrica**, interesada en diseños eficientes de turbinas de vapor, en el caso de centrales térmicas y nucleares, y de turbinas hidráulicas de gran rendimiento y operatividad en el caso de centrales hidráulicas. También es habitual el estudio de flujos en la caldera, así como el análisis de los repartos y eficiencias térmicas. También el sector de las energías renovables, con el estudio de los perfiles aerodinámicos empleados en las palas de los aerogeneradores, trata de conseguir una óptima transferencia energética con mínimo impacto sonoro.

- **Industrias pesadas y metalúrgicas**, como el caso de acerías con procesos de fundición continua, plantas de fabricación de vidrio, fábricas de transformado de plásticos con el llenado de moldes, trefilerías y plantas transformadoras para fabricación de aluminio y zinc, todas ellas interesadas en el estudio de flujos de metales líquidos a altas temperaturas.

- **Industria química**, que estudia deposición de vapores químicos, flujos reactivos complejos en los que se producen intercambios de masa, calor y reacciones químicas.

- **Industria electrónica**, para analizar refrigeración (líquida o por aire) de los componentes de computadores, sistemas y redes, flujos de aires en las carcasas, entre otros.

- **Industria nuclear**, con el flujo en aquellos conductos con sustancias originadas en las reacciones nucleares, el enfriamiento del reactor y flujos en su interior, así como la eficiencia del intercambiador de calor.

- **Industria biomédica y farmacéutica**, para estudiar los distintos flujos vitales, flujos de aire en la caja torácica, flujos de sangre en arterias y venas y en el interior del corazón. Diseño de dispositivos para centrifugación e inyecciones intravenosas.

- **Industria alimentaria**, con procesos de pasteurización, ciclones, precipitadores, reactores, hornos de convección, procesos de extrusión de líquidos.

Aunque los primeros métodos para simular flujos incompresibles empleaban formulaciones basadas en la vorticidad y la función de corriente, a finales de los años 60 se consiguen desarrollar las primeras simulaciones en términos de las variables primitivas, velocidad y presión. Esto se consiguió gracias al desarrollo del método MAC por Harlow y Welch (1965), precursor del actual mallado decalado (staggered mesh) que se implementa hoy día en la mayoría de los códigos por volúmenes finitos.

Uno de los padres de este método de análisis fue Suhas Patankar, actualmente profesor emérito de la Universidad de Minnesota.

Este método consiste en discretizar una región del espacio creando lo que se conoce por una malla espacial, dividiendo una región del espacio en pequeños volúmenes de control. Luego se resuelve en cada uno las ecuaciones de conservación discretizadas, es decir resolviendo una matriz algebraica en cada celda de forma iterativa hasta que el residuo sea suficientemente pequeño.

El Instituto Americano de Aeronáutica y Astronáutica recomienda una aproximación para validar modelos CFD de sistemas complejos basada en dividir el caso en otros más simples: subsistemas, casos de referencia y problemas unitarios.

En la mayoría de los casos se sigue un procedimiento para resolver mediante el análisis CFD que consiste en tres etapas: pre-procesado, simulación y post-procesado.

Pre-procesado: está compuesta de los siguientes pasos:

- Generación de un modelo CAD que representa de manera física el problema.
- Generación de la malla que se ajusta al modelo CAD anterior. Según el enfoque definido para la aplicación requerida se define la malla utilizando los comandos específicos del programa seleccionado.
- Definición física, es la etapa final. Los modelos físicos, las propiedades del fluido, las condiciones de frontera y los parámetros de solución son definidos de tal manera que se obtenga una solución adecuada al fenómeno simulado.

Procesado: solución de las ecuaciones diferenciales parciales que son integradas de manera no interactiva, de tal modo que se aplican leyes de conservación de materia y momento a cada uno de los volúmenes de control que definen la región analizada. El cálculo, debido a la naturaleza no lineal de los sistemas, conlleva a la obtención de los resultados que definen las variables en cada uno de los nodos presentes en la malla.

Post-procesado: se considera la etapa de análisis e interpretación. Los resultados obtenidos son presentados de forma visual sobre el modelo, de manera que puedan analizarse para así obtener las recomendaciones de diseño.

La solución de un problema depende de las condiciones iniciales y de las condiciones de contorno a las que está sometido el fluido. Las condiciones de contorno más habituales que suelen aparecer en los problemas resueltos con CFD son los siguientes:

- Presión en un determinado contorno. Se puede fijar presión estática o presión total.
- Velocidad en el contorno. Se puede fijar dirección y módulo, o sólo dirección, combinada con la condición de presión. En ocasiones se especifica el caudal en vez de la velocidad.

- Se interviene la ecuación de la energía también hay que concretar condiciones de contorno para la temperatura: valor fijo, flujo de calor entre otros.

Imponiendo estas condiciones, se puede simular el comportamiento de los contornos reales de un fluido, tales como paredes, entradas en tuberías, salidas al exterior entre otras.

Las paredes sólidas son condiciones de contorno especialmente críticas. Esto es debido al comportamiento del fluido en las proximidades de la misma. En las superficies sólidas se genera una capa límite de fluido en la que la velocidad varía rápidamente a medida que nos acercamos a la pared. La simulación directa de la capa límite es extremadamente difícil y requiere unos recursos desproporcionados, por lo que se suelen utilizar modelos específicos.

2.2.3 Formulación Física

La obtención de soluciones se realiza mediante la aplicación de las ecuaciones de Navier-Stokes, que consisten en un conjunto de ecuaciones en derivadas parciales no lineales que describen el movimiento de un fluido. Estas ecuaciones se obtienen aplicando los principios de conservación de la mecánica y termodinámica a un volumen fluido. Haciendo esto se obtiene la llamada formulación integral de las ecuaciones. A la rama de la mecánica de fluidos que se ocupa de la obtención de estas soluciones mediante métodos numéricos se la denomina dinámica de fluidos computacional (CFD).

El flujo del fluido queda definido por las leyes de conservación de la masa y conservación de la cantidad de movimiento como mínimo, junto con la de la conservación de la energía si en el estudio se incluye la resolución del campo de temperaturas. En el caso más general las ecuaciones completas de Navier-Stokes presentan las siguientes características:

- Son dependientes del tiempo.
- Tridimensionales.
- Incluye esfuerzos viscosos.
- Considera la compresibilidad del fluido.
- Son ecuaciones en derivadas parciales elípticas y altamente no lineales.
- Se encuentran acopladas entre sí.

Sin embargo en la mayoría de los casos es posible reducir el análisis, simplificando las ecuaciones mediante:

- Imponiendo unas condiciones de contorno que no varíen con el tiempo (estacionarios).
- La reducción de dimensiones (problemas estacionarios, bidimensionales o asimétricos).
- Aproximando el comportamiento del fluido (incompresible, no viscoso).
- Simplificando las fuerzas que actúan sobre el fluido (hidrostático, potencial).
- Aproximaciones basadas en valores medios (Reynolds medio, profundidad media (depth-averaged)).

Algún fenómeno particular que se analice, puede necesitar de la adición de ciertas ecuaciones que deben ser solucionadas en conjunto con las ecuaciones de continuidad mencionadas. Algunos de estos casos son los siguientes:

- Ecuación de energía térmica: casos de transferencia de calor.
- Ecuaciones de transporte de especies: casos de transferencia de masa

- Ecuaciones de flujo de dominios multifase: casos de fenómenos multifase sólido/gas, sólido/líquido y gas/líquido.
- Ecuaciones para reacciones químicas
- Ecuaciones para campos magnéticos: casos de magneto hidrodinámica
- Modelos de turbulencia

La manera en que son solucionadas estas ecuaciones es variada, pero las más comunes son:

Método de los volúmenes finitos: este método consiste, fundamentalmente, en convertir las ecuaciones diferenciales en su análogo numérico, mediante una transformación física de las ecuaciones. Por ejemplo, la ecuación de la cantidad de movimiento puede ser considerada como una serie de flujos dentro de un volumen de fluido, junto con un término de fuente que es el gradiente de presiones.

Para mostrar la discretización, el cuerpo analizado es dividido en pequeñas regiones denominadas volúmenes de finitos (particiones del espacio) en la dirección x , y se fija la atención en el volumen n -ésimo por simplicidad. Las ecuaciones son discretizadas y evaluadas iterativamente en cada uno de estos volúmenes. El resultado de esta evaluación es la obtención de un valor aproximado de cada una de las variables en todos los puntos del dominio.

Para la discretización mostrada, se tiene el punto P de la malla, el cual tiene como vecinos los punto W (a la izquierda, es decir en la dirección de $-x$) y E (a la derecha, es decir, en la dirección de x). La distancia entre W y P es δx_w , la distancia entre P y E es δx_e . Entre los puntos W y P se encuentran el punto w que corresponde al límite izquierdo del volumen de control construido en torno a P . Entre los puntos P y E se encuentra el punto e que corresponde al límite derecho del volumen de control considerado. La distancia entre w y e es Δx . Como este es un problema unidimensional, el volumen de control tiene dimensiones: $\Delta x \times 1 \times 1$.

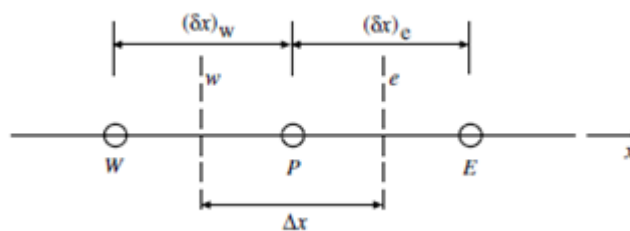


Figura 2-12. Malla de discretización por volúmenes finitos.

Método de los elementos finitos: el cuerpo analizado es dividido en elementos en cuyos extremos se encuentran nodos interconectados con otros elementos. Las ecuaciones son evaluadas iterativamente en cada uno de estos nodos, de tal modo que sus resultados con “ensamblados” en un conjunto global de ecuaciones algebraicas.

Método de las diferencias finitas: el cuerpo analizado es dividido en un conjunto de puntos, para cada uno de los cuales son planteadas las ecuaciones que han de ser solucionadas de manera global por medio de un sistema de ecuaciones algebraicas.

El más utilizado es el método de volúmenes finitos debido a las ventajas que presenta en relación con los otros métodos:

- Mayor precisión en los resultados que los otros métodos.
- Los términos de la formulación discretizada tienen interpretaciones físicas directas.
- Método más eficiente para análisis de flujo y transferencia de calor.

A continuación se explican de forma detallada las principales relaciones utilizadas para la formulación física del modelo. Éstas son las ecuaciones de Ecuación de Navier-Stokes que representan la conservación de las propiedades del flujo. Una descripción más precisa de estas ecuaciones y su aplicación se puede encontrar en la guía de ANSYS Fluent (25).

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} = -\nabla p + \eta \nabla^2 \mathbf{v}$$

Ecuación 2.12

En el principio de conservación de masa en fluidos monofásicos no existe la contribución del término difusivo en la ecuación de continuidad, lo que indica que para cualquier fluido en reposo, la variación de la masa implica un desplazamiento de las partículas fluidas. En cada celda se tiene que cumplir esta ecuación.

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

Ecuación 2.13

$$\frac{\partial(\rho v_x)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v_y)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho v_z)}{\partial z} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$$

Ecuación 2.14

Donde:

v_x, v_y, v_z : Componentes de la velocidad x, y, z respectivamente. [m/s]

ρ : La densidad. [kg/m³]

x, y, z : Sistema cartesiano. [-]

t: Tiempo. [s]

Los tres primeros términos representan el flujo másico neto que sale de la superficie de control por las variaciones del vector velocidad másica, y el cuarto término representa la relación de cambio de masa dentro del volumen de control a través de los cambios de la densidad del fluido para un punto en el tiempo.

Ecuación de conservación de la cantidad de movimiento en la cual cada celda se tiene que cumplir esta ecuación.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \vec{v}) + \nabla(\rho \vec{v} \vec{v}) = -\nabla(p) + \nabla \cdot \bar{\tau} + \rho \vec{g} + \vec{F}$$

Ecuación 2.15

Para la componente X:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \rho v_x}{\partial t} + \frac{\partial(\rho v_x v_x)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v_y v_x)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho v_z v_x)}{\partial z} = \\ & = \rho g_x - \frac{\partial P}{\partial x} + R_x + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu_e \frac{\partial v_x}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu_e \frac{\partial v_x}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_e \frac{\partial v_x}{\partial z} \right) + T_x \end{aligned}$$

Ecuación 2.16

Para la componente Y:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \rho v_y}{\partial t} + \frac{\partial(\rho v_x v_y)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v_y v_y)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho v_z v_y)}{\partial z} = \\ & = \rho g_y - \frac{\partial P}{\partial y} + R_y + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu_e \frac{\partial v_y}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu_e \frac{\partial v_y}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_e \frac{\partial v_y}{\partial z} \right) + T_y \end{aligned}$$

Ecuación 2.17

Y por último la componente Z:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \rho v_z}{\partial t} + \frac{\partial(\rho v_x v_z)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v_y v_z)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho v_z v_z)}{\partial z} = \\ & = \rho g_z - \frac{\partial P}{\partial z} + R_z + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu_e \frac{\partial v_z}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu_e \frac{\partial v_z}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_e \frac{\partial v_z}{\partial z} \right) + T_z \end{aligned}$$

Ecuación 2.18

Donde:

g_x, g_y, g_z : Componentes de la aceleración debida a la gravedad. [m/s²]

ρ : Densidad. [kg/m³]

μ_e : Viscosidad efectiva. [kg/ms]

R_x, R_y, R_z : Distribución de resistencias. [kg/m²s²]

T_x, T_y, T_z : Términos de la pérdida viscosa. [J/kg]

Para los casos de flujo laminar, la viscosidad efectiva es meramente la viscosidad dinámica, propiedad del fluido. La viscosidad efectiva para modelos turbulentos se describe más adelante.

Los términos de pérdidas viscosas son eliminados en los casos de fluido incompresible y propiedades constantes.

Conservación de la energía

El principio en el que se basa la ecuación de la energía es el primer principio de la termodinámica. Si se aplica este principio a un volumen de control, expresa que la variación temporal de la energía total en el volumen de control es igual al incremento de trabajo de las fuerzas que actúan sobre el volumen y el flujo neto de calor a través del contorno del dominio.

La ecuación general, sin realizar simplificación alguna, expresada en términos de temperatura total es la siguiente:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t}(\rho C_p T_o) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho v_x C_p T_o) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v_y C_p T_o) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho v_z C_p T_o) = \\ & = \frac{\partial}{\partial x}\left(K \frac{\partial T_o}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(K \frac{\partial T_o}{\partial y}\right) + \left(K \frac{\partial T_o}{\partial z}\right) + W^v + E^k + Q_v + \phi + \frac{\partial P}{\partial t} \end{aligned}$$

Ecuación 2.19

Donde:

C_p : Calor específico. [J/kgK]

T_o : Temperatura total.[K]

K : Conductividad térmica. [W/m K]

W^v : Trabajo viscoso. [J]

Q_v : Fuentes volumétricas de calor.[J]

ϕ : Disipación de calor por acción de las fuerzas viscosas. [J]

E^k : Energía cinética. [J]

La ecuación de la energía para los casos incompresibles se obtiene de la ecuación general de conservación de la energía, con la particularidad de que no se tiene en cuenta los siguientes componentes:

- Trabajo viscoso.
- Trabajo de presión.
- Disipación viscosa.

- Energía cinética.

Como la energía cinética no se considera, la temperatura estática y la temperatura total son la misma. Por lo tanto, la ecuación de la energía toma la forma de la ecuación del transporte para las temperaturas estáticas:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho C_p T) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho v_x C_p T) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v_y C_p T) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho v_z C_p T) = \\ = \frac{\partial}{\partial x}\left(K \frac{\partial T}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(K \frac{\partial T}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(K \frac{\partial T}{\partial z}\right) + Q_v \end{aligned}$$

Ecuación 2.20

Ecuación de turbulencia

El recorrido de los fluidos presenta características turbulentas, lo que hace necesario promediar las ecuaciones de modo temporal o másico mediante un modelo turbulento.

La turbulencia se inicia por inestabilidades en el flujo causadas por los gradientes de velocidades medias. Estos torbellinos en movimiento, generan nuevas inestabilidades dando lugar a torbellinos más pequeños. El proceso continúa hasta que los torbellinos se hacen lo suficientemente pequeños (y los gradientes de los término fluctuantes de las velocidades lo bastante grandes) para que el efecto de la viscosidad adquiera importancia y se disipe la energía turbulenta en forma de calor. Este proceso (la creación continuada de energía turbulenta en las grandes escalas, la transferencia de la misma hacia torbellinos más y más pequeños para acabar disipándose a través de la viscosidad), se denomina cascada de la energía turbulenta.

Un flujo turbulento está definido por las siguientes características:

- Irregular.
- Disipativo. La energía cinética del flujo está siendo disipada en forma de calor.
- Difusivo. Fomenta el mezclado de las especies que forman el flujo.
- Tridimensional. El movimiento turbulento se produce en las tres direcciones.
- Continuo. Las escalas turbulentas más pequeñas son mayores que el tamaño de las moléculas.

El medio que se suele utilizar para determinar si un flujo va a ser turbulento o no, es el número de Reynolds. Este número indica la relación, o la importancia relativa, entre las fuerzas inerciales y las fuerzas viscosas de la corriente. Las fuerzas inerciales grandes en relación con las viscosas tienen a favorecer la turbulencia, mientras que una viscosidad alta la evita. Dicho de otro modo, la turbulencia aparece cuando el número de Reynolds supera cierto valor.

Se define el número de Reynolds como un parámetro característico del flujo, según la ecuación:

$$Re = \frac{u_c \cdot l}{\nu}$$

Ecuación 2.21

Donde:

Re: Número de Reynolds. [-]

ν : Viscosidad cinemática. [m²/s]

l : Longitud característica. [m]

u_c : Velocidad característica. [m/s]

Los flujos turbulentos contienen un extenso rango de escalas temporales y espaciales. El tamaño de las escalas mayores está limitado por geometría del problema, mientras que en las escalas menores están limitadas por la viscosidad, responsable de la disipación de energía cinética en forma de calor. Como el flujo es disipativo debe haber un suministro continuo de energía hacia el flujo para poder mantener el nivel de turbulencia. Del análisis de las escalas que forman el flujo turbulento saldrá el tamaño mínimo que deben tener las celdas del dominio para captar todos los fenómenos asociados a la turbulencia.

Según la teoría de Kolmogorov, la generación de turbulencia se produce principalmente en las escalas mayores del flujo (escalas energéticas) mientras que la disipación viscosa se produce en las escalas menores (escalas de disipación) dejando un rango de escalas intermedias (escalas inerciales) sobre las que las influencias externas de las condiciones de contorno y viscosidad son despreciables. La energía pasa de las escalas mayores a las menores a través de las escalas intermedias. Los tres tamaños de escala son conocidos también como (de mayor a menor) escala integral, microescala de Taylor y microescala de Kolmogorov.

La escala integral no puede exceder las fronteras del flujo y contiene la mayor parte de su energía. Las microescalas de Taylor pertenecen al rango de escalas inerciales y son las responsables de la transferencia energética. Como la energía que se disipa en forma de calor es la energía cinética debida al movimiento turbulento, el flujo energético a través de esta escala debe ser igual a la disipación de la energía turbulenta. Dicha disipación es del siguiente orden:

$$\varepsilon = u_c^2 \cdot \frac{u_c}{l}$$

Ecuación 2.22

Donde:

ε : Tasa de disipación de energía turbulenta [W/kg]

Por último las microescalas de Kolmogorov son las de menor tamaño que pueden encontrarse dentro de un flujo turbulento. Es en el nivel en el que la energía cinética se transforma en calor mediante disipación viscosa. Según la teoría de Kolmogorov, las escalas menores pueden formarse mediante disipación y viscosidad turbulenta, se definen a continuación:

$$\eta_k \equiv \left(\frac{v^3}{\varepsilon} \right)^{1/4}$$

Ecuación 2.23

η_k : Microescala dimensional de Kolmogorov. [m]

$$\tau_k \equiv \left(\frac{v}{\varepsilon} \right)^{1/2}$$

Ecuación 2.24

τ_k : Microescala temporal de Kolmogorov. [s]

$$\vartheta_k \equiv (v \cdot \varepsilon)^{1/4}$$

Ecuación 2.25

ϑ_k : Microescala de velocidad de Kolmogorov. [m/s]

Las escalas se alejan a medida que el número de Reynolds crece; de forma que, para representar con precisión las escalas menores, es necesario como mínimo $Re^{3/4}$ celdas por dimensión principal. Es un sistema tridimensional el número de celdas necesario para describir las escalas debe tener un número mínimo del orden de $Re^{9/4}$. Tomando como número de Reynolds $Re \sim 10^4$, el número de celdas se dispara, por lo que se hace necesario echar mano de un modelo simplificado para la estimación de los procesos de disipación que tienen lugar en las microescalas del flujo.

En ingeniería, los flujos son turbulentos en su mayoría. Pero sin embargo, muchos de estos flujos pueden ser considerados como muy poco dependientes del tiempo, con unas fluctuaciones superpuestas a la corriente principal estacionaria. En dicho caso, sólo nos interesarán las magnitudes promediadas en el tiempo, en lugar de los detalles de variación con el tiempo.

La primera aproximación al estudio de los flujos en régimen turbulento fue presentada por Reynolds en 1895. La metodología se basa en la descomposición de las variables de flujo en su valor medio más la fluctuación. Las ecuaciones de Navier- Stokes se resuelven entonces para los valores medios, que son los más interesantes para muchas aplicaciones. De esto modo, si se consideran flujos incompresibles, las componentes de la velocidad y la presión se sustituyen por:

$$u_i = \bar{u}_i + u'_i$$

Ecuación 2.26

$$p = \bar{p} + p'$$

Ecuación 2.27

Donde los valores medios se denotan por una barra sobre la variable y los turbulentos por una prima.

De forma habitual, se emplean dos métodos para promediar los parámetros del flujo:

- Promedio temporal o de Reynolds.
- Promedio másico o de Favre.

El más utilizado en el promedio temporal o de Reynolds, es un método apropiado para flujos turbulentos estacionarios. El valor medio de la variable no varía en el tiempo, solo en el espacio. En la práctica $T \rightarrow \infty$ significa que el período de tiempo debe ser mucho mayor que el tiempo típico de las escalas de fluctuación turbulentas. Es el software empleado en estos modelos, con la forma:

$$\bar{u}_i = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_{t_0}^{t_0+T} u_i dt$$

Ecuación 2.28

En los casos donde la densidad no es constante, se puede aplicar una densidad promediada. Por otro lado, las ecuaciones promediadas de gobierno se convierten en algo más complicada debido a las correlaciones adicionales debidas a las fluctuaciones de la densidad. La manera más adecuada es emplear el promedio de Reynolds para la densidad y la presión, y el promedio de Favre para las otras variables como las componentes de velocidad.

$$\tilde{u}_i = \frac{1}{\bar{\rho}} \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_{t_0}^{t_0+T} \rho u_i dt$$

Ecuación 2.29

En donde $\bar{\rho}$ representa la densidad promedio de Reynolds. Por lo tanto, la descomposición de Favre queda:

$$u_i = \tilde{u}_i + u''_i$$

Ecuación 2.30

Donde $\tilde{u}_i$ representa el valor medio y u''_i el término fluctuante de la velocidad u_i .

Mediante el software se resuelve la ecuación de conservación de la cantidad de movimiento y de continuidad para las variables promediadas temporalmente. En la formulación promediada de las ecuaciones de Navier-Stokes para el flujo aparece un nuevo término debido a las fluctuaciones de velocidad, que recibe el nombre de esfuerzo aparente o esfuerzo de Reynolds. El modelado de este término es el mayor objetivo de los modelos de turbulencia. Todavía no se ha encontrado una solución definitiva a este problema y existen numerosos modelos propuestos entre los que destacan:

- Modelo del Esfuerzo de Reynolds (Reynolds Stress Model, RSM): La solución directa de las ecuaciones de Reynolds a través de complejas correlaciones. Este modelo provoca un esfuerzo computacional extra que no está justificado porque no aporta una mayor precisión.
- Modelos de Viscosidad Turbulenta (Eddy Viscosity o Turbulent Viscosity): este conjunto de modelos se basan en la hipótesis de que los esfuerzos de Reynolds son análogos a los esfuerzos de disipación viscosa (hipótesis de Boussinesq). Según se obtenga el valor de la

viscosidad turbulenta irán surgiendo los distintos modelos propuestos. Los modelos de Eddy Viscosity son ampliamente empleados y populares actualmente debido principalmente a que:

- Son muy sencillos de implementar en los códigos existentes.
- La viscosidad extra le confiere estabilidad al sistema.
- Tiene un fundamento teórico muy simple.

Sin embargo, se deben emplear con cuidado recordando que:

- La hipótesis de la vorticidad viscosa es simplemente un modelo muy simple para resolver flujos complejos.
- Con este modelo, el transporte turbulento se reduce a un solo escalar.

Según se obtenga el valor de la viscosidad turbulenta irán surgiendo los distintos modelos propuestos. A esta familia de modelos pertenece el modelo k- ϵ que es el más empleado en la actualidad y que ha sido utilizado en este trabajo.

El modelo k - ϵ se basa en que la viscosidad turbulenta puede calcularse a través de la expresión siguiente, donde C_k es constante para el cálculo de μ_t adimensional:

$$\mu_t = C_k \cdot \rho \cdot \vartheta_k \cdot \eta_k$$

Ecuación 2.31

Las microescalas turbulentas pueden obtenerse a través de la energía cinética turbulenta (k) y de su velocidad de disipación (ϵ), siendo:

$$k = \frac{1}{2} \cdot \overline{u'_i \cdot u'_j}$$

Ecuación 2.32

$$\vartheta_k = \sqrt{k}$$

Ecuación 2.33

$$\eta_k = k^{3/2} / \epsilon$$

Ecuación 2.34

Por tanto, la viscosidad turbulenta se expresa como:

$$\mu_t = C_k \cdot \rho \cdot \frac{k^2}{\epsilon}$$

Ecuación 2.35

El valor de C_k tiene carácter experimental y se le asigna el valor 0,09. El modelo k - ϵ es un modelo semi-empírico basado en las ecuaciones de transporte de la energía cinética turbulenta (k) y su velocidad de disipación (ϵ). La ecuación de transporte de k se deriva de una ecuación exacta mientras la ecuación de transporte de ϵ se obtiene a través de relaciones empíricas manteniendo cierta

similitud con la ecuación de transporte de k . En su desarrollo, se ha supuesto que el flujo es plenamente turbulento, isotrópico y que los efectos de la viscosidad molecular son despreciables.

El software empleado ofrece la posibilidad de tratar la presencia de las paredes a través de las funciones de pared o mediante la modificación del modelo $k - \varepsilon$ en las regiones cercanas a la pared. A través de las funciones de pared se introducen expresiones analíticas para describir la variación de la velocidad y temperatura entre la pared y el centro de la primera celda del dominio fluido. La función analítica empleada es la ley de la pared de Prandtl y permite una buena aproximación de la capa límite sin excesivo esfuerzo computacional. La segunda alternativa es la de emplear una modificación del modelo $k - \varepsilon$ para resolver la transición hacia la capa límite laminar para lo cual es necesario resolver con mayor precisión las inmediaciones de la pared-celdas). Este método, aunque algo más preciso, resulta a menudo demasiado complejo para su empleo en la simulación de sistemas reales (26).

En el presente trabajo se ha optado por el empleo de un modelo $k - \varepsilon$ estándar, utilizando las funciones de pared estándar para resolver la transición hacia la capa límite, que ha sido ampliamente empleado en multitud de trabajos de combustión con resultados satisfactorios (27).

Ley de pared

El esfuerzo cortante tanto para un conducto bidimensional como para un tubo circular varía linealmente a través de la sección, dicho esfuerzo cortante se compone de una parte viscosa y otra turbulenta. La parte viscosa es en general mucho más pequeña que la contribución turbulenta, esto sin embargo no puede ser cierto muy cerca de la pared, donde las velocidades de agitación turbulenta están inhibidas por la presencia de la misma.

En la región próxima a la pared, en la que $y^+ \sim 1$ e $Y \ll 1$ a número de Reynolds altos, el flujo medio está determinado por:

$$-\overline{u'u'^+} + \partial_y^+ U^+ = 1$$

Ecuación 2.36

Proviene de aplicar el límite $Re \rightarrow \infty$ en la ecuación:

$$\frac{\tau}{\tau_w} = -\overline{u'u'^+} + \partial_y^+ U^+ = \left(1 - \frac{y^+}{Re_\tau}\right)$$

Ecuación 2.37

$y^+ = yu_\tau/\nu \sim 1$, indica que cerca de $y = 0$ los esfuerzos tangenciales totales son aproximadamente constantes cuando el número de Reynolds es muy alto. y^+ puede interpretarse como el número de Reynolds de fricción basado en y , y por tanto es una medida del número de Reynolds local en cada distancia a la pared.

La ecuación no depende explícitamente de ningún parámetro y que si la pared es lisa, tampoco aparece ningún parámetro en las condiciones de contorno, por lo que la solución ha de tener la forma:

$$U^+ = f(y^+), \quad \overline{-u'u'^+} = g(y^+)$$

Ecuación 2.38

A estas relaciones es a lo que se le llama ley de pared (Prandtl, 1925).

En la región exterior $Y \sim 1$ y los esfuerzos viscosos son despreciables, por lo que:

$$\overline{-u'u'^+} = (1 - Y)$$

Ecuación 2.39

Al despreciar lo esfuerzos viscoso, no cumple condiciones de contorno de impermeabilidad y no deslizamiento en la pared, que implicarían $\overline{u'u'} = 0$ sobre $Y = 0$. La ecuación anterior nos dice cómo varían los esfuerzos tangenciales de Reynolds pero no da ninguna información sobre el perfil de velocidad media. Asumiendo que u_τ y h son las escalas características de velocidad y longitud en esta región, el perfil medio debería tener la forma:

$$U^+ - U_c^+ = F(Y)$$

Ecuación 2.40

Donde U_c es la velocidad en el centro, y la función F es de orden unidad y se anula para $Y = 1$. A esta ecuación se le denomina ley de defecto de velocidad (Kármán, 1930).

Debido a la limitación de tiempo, en el presente trabajo no se ha puesto especial énfasis en el tratamiento de la ley de pared, lo cual requiere un mallado detallado de las celdas próximas a las paredes en las que se pretende definir la capa límite.

3 DISEÑO Y SIMULACIÓN

3.1 Introducción

Para poder llevar a cabo la simulación del proceso de combustión, han ejecutarse una serie de pasos y utilizarse una serie de programas a fin de recrear de la manera más real posible las características del entorno. De esta forma se tomó como referencia un quemador ya existente utilizado en laboratorios para a continuación recrearlo. Una vez realizado el diseño informatizado, el siguiente paso consiste determinar las paredes que delimitan el volumen que va a confinar a la mezcla gaseosa mediante un mallado 2D. Posteriormente, a partir del mallado 2D, es preciso generar un mallado 3D ya que el espacio que alberga el fluido se trata de un elemento tridimensional y al contrario que en determinados estudios de fuerzas no sería asumible el error que implica suponer un fluido bidimensional. El siguiente punto se trata de la simulación propia. Para ella es necesario establecer una serie de parámetros y condiciones de contorno, como se explicará más adelante. Por último se realizan sucesivos ensayos modificando parámetros de caudal de gases de entrada.

3.1.1 Componentes del quemador

El quemador creado, se basó en un soplador (Anexo I) que se utiliza en las instalaciones de la Universidad de Vigo para la experimentación. A partir de esa idea, se pensó en un modelo que permitiese (a parte de quemar gas) estudiar la reacción de combustión, diseñándose para tal propósito una serie de elementos que facilitasen la tarea (protecciones de seguridad, generadores de turbulencias, materiales apropiados...). Se optó por este modelo por combinar simplicidad en el montaje, costes bajos y posibilidad de incorporación de modificaciones o mejoras incluso tras su construcción, así como sencillez en el manejo y bajo nivel de riesgo. El modelo está compuesto por los siguientes elementos:

- **Toma de combustible.** Conecta una botella de propano a una cámara de mezcla mediante un caudalímetro que regula el caudal de admisión. Está constituido por un conducto cilíndrico de vidrio.
- **Toma de aire.** Análogo al anterior. Esta entrada, igualmente regulada por un caudalímetro, comunica una botella, presurizada mediante un compresor, de aire con la cámara de mezcla. Está constituido por un conducto cilíndrico de vidrio.
- **Cámara de Mezcla:** Se trata de un depósito de chapa de acero que permite en su interior el mezclado de ambos gases. Cuenta en su interior con una plancha cóncava denominada “seta” que favorece el mezclado de los gases.

- **Chimenea:** Permite a los gases ya mezclados salir de la cámara hacia la boquilla donde se producirá la combustión. Preferiblemente de vidrio, también admite como material PVC transparente a fin de poder realizar las mediciones. Puede contar con elementos de control de temperatura tales como termómetros en distintas posiciones.
- **Mechero:** Se trata de una boquilla metálica (acero) que estrecha el diámetro de la chimenea aumentando la velocidad del gas evitando así retroceso indeseado de llama por la chimenea. Utilizamos acero, por ser este resistente a exposiciones prolongadas al fuego de coste bajo. Permittiéndose el intercambio de boquillas de diámetros distintos para futuros experimentos y ensayos.

Como elemento accesorio, al modelo de referencia se le ha decidido incorporar como mejora una cápsula de vidrio a la salida de la llama. Esto tiene un doble propósito; por una parte confinar la llama evitando posibles lesiones personales y daños en el laboratorio; por otra facilitar la captación de imágenes acortar distancia.



Figura 3-1 Montaje experimental en las instalaciones de la Universidad de Vigo

3.1.2 Diseño en Siemens NX

La realización del modelado del sólido fue mediante un software comercial de diseño llamado Siemens NX. De este programa hemos aprovechado polivalencia que presentan las herramientas del mismo de cara a generar superficies y sólidos con un cierto grado de complejidad. De esta forma, a partir de las piezas que componen la totalidad del montaje, las cuales son denominadas “elementos” por Siemens NX y mediante restricciones de movimiento entre las ellas, se genera un ensamble que aúna todos los elementos.

De cara a facilitar el trabajo con el resto de programas, se han omitido determinados elementos no necesarios tales como los caudalímetros. El motivo es que las regulaciones de los caudales son recreadas a posteriori mediante las condiciones de contorno en la fase final de diseño (ANSYS FLUENT). Por otra parte, el escape de la chimenea que presentaba forma de “L” en el modelo de referencia, se ha eliminado el tramo horizontal dejando sólo el vertical. Esto es debido a que la llama que se desea generar a de propagarse en la dirección de la fuerza de la gravedad para conseguir así una llama lo más estable posible. Se deja abierto como posible mejora en futuras líneas de investigación la modificación de la chimenea en longitud y forma para estudiar más en profundidad la propagación por conducto cilíndrico cerrado.

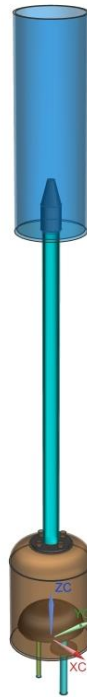


Figura 3-2 Diseño de modelo en Siemens NX

El modelo está realizado a partir de geometrías que se corresponden con las distintas partes que componen montaje de referencia. Las superficies elegidas están orientadas de cara al mallado posterior. Se evitan así en las superficies en contacto con el fluido las formas complejas que impidan implementar un mallado de calidad.

Las partes que componen el modelo en NX son las siguientes:

Cámara

Creada a partir de un cilindro de chapa de acero de 2 mm, cuenta con dos entradas en la bases para las admisiones de propano y de aire. En su parte superior presenta una salida para la mezcla combustible-aire. Presenta además pernos soldados para facilitar el anclaje de la chimenea y un orificio en el centro de la base para unir mediante un tornillo el mezclador que se encontrará en el interior de la cámara. Las dimensiones sin incluir los pernos de la parte superior son 124x164mm (ancho x alto).Figura 3-3.



Figura 3-3 Cámara de combustión

Entradas de aire y gas

Formados por dos tubos de diámetro interno 10mm para el aire y 6mm para el del propano. Van unidos a la base de la cámara con un tope que facilita el ajuste. Fabricados en vidrio, simulan las respectivos caudalímetros que regulan la entrada de ambos gases. Figura 3-4.

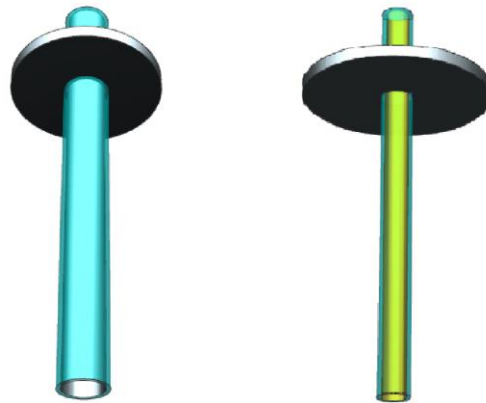


Figura 3-4 Entradas de aire y gas

Mezclador

Diseñado mediante una chapa cóncava de acero. Desvía los flujos de aire y propano a fin de mejorar el mezclado. Está fijado a la base de la cámara mediante un tornillo. Con un diámetro de 100mm y una altura de 50mm, la holgura entre en interior de la cámara y el mezclador es 5mm (diámetro interno de la cámara 120mm, para una pared de espesor 2mm). Figura 3-5.

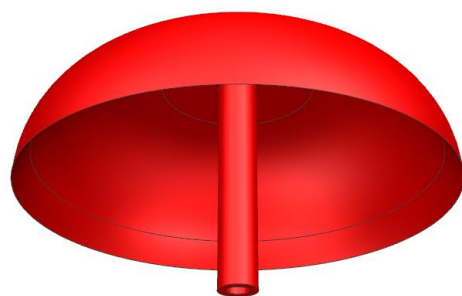


Figura 3-5 Mezclado de gases

Chimenea

Se trata de un conducto fabricado en vidrio. Cuenta en la base con un anclaje que permite mantenerla fijada a la cámara. Permite conducir la mezcla combustible-air hasta la boquilla metálica. Se ha decidido tomar como material el vidrio por su rigidez lo que permite que el diámetro sea constante. Diseñado con una longitud de 505mm y un diámetro interno de 22mm para facilitar las simulaciones posteriores. Con vistas a su implantación sería de interés aumentar la longitud del mismo, si bien para tal propósito se sugiere el uso de otro material por la fragilidad que el vidrio presenta. Figura 3-6.



Figura 3-6 Chimenea

Boquilla del quemador

Se trata de una pieza de acero ajustado a la chimenea. Para este trabajo se ha realizado la simulación con una boquilla de 4mm. De cara a la experimentación en laboratorio sería viable el contar con boquillas de distintos diámetros para conseguir distintos efectos. De longitud 70.3mm, su diámetro máximo es de 29mm. Figura 3-7.



Figura 3-7 Boquilla

Vidrio protector

Este componente es un elemento de seguridad. Su finalidad es la de proporcionar un volumen lo suficientemente amplio como para no afectar de forma apreciable al comportamiento de la llama pero que al mismo tiempo permita la aproximación de forma más segura, acotando la salida de la llama, pudiendo retirarse si fuera necesario. Está compuesto por un única pieza de vidrio con una entrada que permite acoplarlo a la chimenea y permaneciendo abierto en su lado opuesto. Se ha utilizado un espesor de 3mm siendo el radio exterior de 100mm y la longitud de 300mm. Así mismo, se contempla el uso de filtros que permitan la observación de la llama sin riesgo de daños para la vista o a fin de facilitar la toma de fotografías, o la variación de su tamaño para llamas mayores. Figura 3-8.



Figura 3-8 Vidrio protector

3.1.3 Mallado 2D

La finalidad del mallado 2D, no es otra que discretizar las superficies en elementos que sean manejables por los programas de diseño. La forma de realizar dicha discretización se presta a variaciones tales como la forma de la superficie o la de los elementos², el tamaño de los mismos o el tipo de crecimiento. A efectos del mallado los componentes macizos del modelo han de ser eliminados para facilitar el trabajo además de para poder generar la malla 3D, dejando sólo las superficies. Un mayor número de superficies implica mallados más complejos y por lo general más imprecisos que requieren tamaños de malla más pequeños para conseguir calidades aceptables. Por ésta razón, y teniendo en cuenta que FLUENT permite la asignación de espesores a superficies, en los mallados se efectúan simplificaciones y en ocasiones se eliminan elementos con bajo interés y relevancia de cara a las simulaciones.

Una vez diseñado el modelo a seguir con Siemens NX, como paso previo al mallado 3D, es importante el determinar las superficies que entran en contacto con el fluido. Ellas son las superficies internas de las admisiones de gas y aire, la superficie interna de la cámara, de la chimenea y de la boquilla. También hay que considerar las paredes internas del vidrio de protección. Mención aparte tienen las entradas de los conductos de admisión de gas y aire, así como la salida del vidrio de protección y las superficies virtuales que separan los diversos elementos de las que más tarde se hablará con más detalle.

En cuanto al vidrio protector, se ha utilizado durante el mallado y las simulaciones uno de dimensiones mayores a las utilizadas en el modelado en Siemens NX. El motivo por el cual se ha decidido realizado esta modificación es poder estudiar es comportamiento de llamas de tamaños superiores a los que se prevé se utilicen una vez realizado el montaje. De esta forma se nos permite calcular velocidades de desprendimiento de llama o caudales límites teóricos. Por otra parte, a fin de evitar problemas de retorno de flujo durante las simulaciones, se creó un estrechamiento en las salida a fin de aumentar la velocidad del flujo en esa zona (12).

Es importante en esta fase del proyecto establecer el tipo de mallado a utilizar, así pues, de acuerdo con otros autores (3) (12) (28) (29) se estableció como lo más conveniente utilizar una malla triangular de dimensiones variables en función del grado de detalle requerido. De esta forma se definen los contornos de la figura. Para garantizar la calidad del mallado, se utilizan distintos tamaños de malla en función del grado de detalle requerido o de la complejidad de la superficie. Como referencia, para medir la calidad se utiliza el parámetro “skew” el cual nos mide la distorsión angular de los triángulos que componen el mallado denominados elementos. Se establece como aceptable valores de skew inferiores al 45%, descartándose cualquier malla que tenga valores superiores.

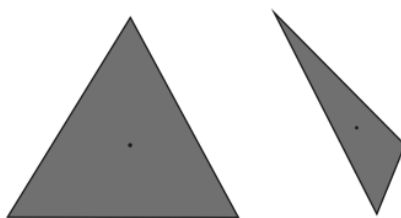


Figura 3-9 Distintos ejemplos de calidad de malla (12)

² Llamamos elemento a cada una de las superficies que componen una malla.

El tamaño de los elementos a utilizar es un compromiso entre la calidad y la complejidad del cálculo durante la simulación. Esto implica que de usar un mallado muy fino para todas las superficies, nos incrementaría el número de elementos de la malla 3D de forma significativa. Esto llevaría consigo un elevado número de cálculos a la hora de tratar converger la simulación a la solución. Por el contrario, el utilizar una malla demasiado gruesa implicaría un proceso iterativo más rápida pero de igual forma obtendríamos resultados poco precisos.

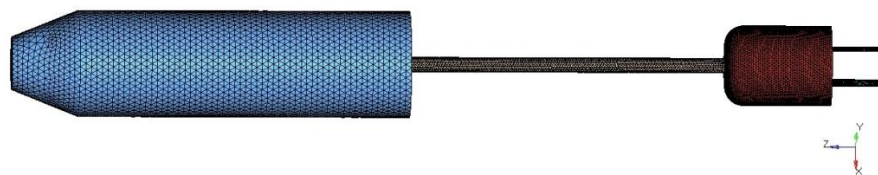


Figura 3-10 Mallado general-gravedad en la dirección del vector “Z”

De acuerdo con esto, se han utilizado distintos tamaños de mallado para distintas superficies (Figura 3-11). A fin de controlar el crecimiento de la malla se han creado líneas ficticias (Figura 3-11Figura 3-12) en las superficies de mayor tamaño, como la cámara. Con la misma idea, de cara a controlar el crecimiento de la malla 3D, se ha creado una elipse en la zona adyacente a la salida de la boquilla. La idea es obtener un mayor detalle del lugar en el que se genera la llama al tiempo que podemos establecer una zona con condiciones que permitan desencadenar la reacción con mayores temperaturas que la del entorno como se muestra. El tamaño del mallado³ utilizado en cada superficie es de acuerdo con la Tabla 3-1.

³ El tamaño referente a cada superficie se corresponde no con el tamaño asignado a la malla, si no con el del elemento de mayor tamaño perteneciente a una superficie. La diferencia entre ambos números se debe al crecimiento que se le permite a los elementos de un determinado mallado a fin de evitar discontinuidades que imposibilitarían el mallado 3D.

Superficie		Tamaño del mallado (mm)
Vidrio:	Pared	10.0
	Salida	10.0
Boquilla:	Pared	3.6
	Salida	1.0
Chimenea:	Pared	4.0
	Entrada	3.2
Cámara:	Pared	4.0
	Base	5.0
Conducto Aire:	Pared	3.0
	Entrada/Salida	2.2
Conducto Propano:	Pared	2.6
	Entrada/Salida	1.9

Tabla 3-1 Tamaño del mallado.

Las zonas en las que intersecaban superficies de distintas calidades fueron controladas como se indicó en líneas superiores mediante líneas (Figura 3-12) añadidas no existentes en el modelo real. En determinado puntos con elementos de skew superiores a la calidad mínima exigida, fue necesario un pos-mallado mediante distintas herramientas que ofrece el programa, teniendo que crear nuevos triángulos en los casos más críticos. Además de las superficies internas del propio modelo, se generaron otras nuevas a fin de delimitar distintos compartimentos creando superficies en las entradas y salidas de los conductos de gas y aire, cámara, chimenea, boquilla y vidrio de seguridad.

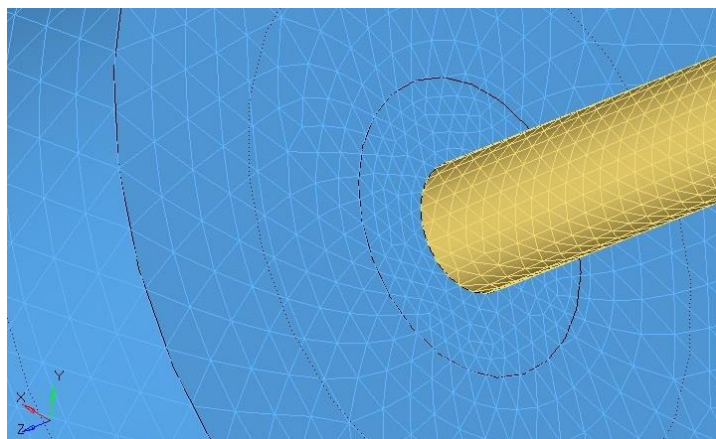


Figura 3-11 Detalle del mallado (progresión de un mallado de 10mm en la zona del vidrio de protección, hasta uno de 3.5mm en la chimenea).

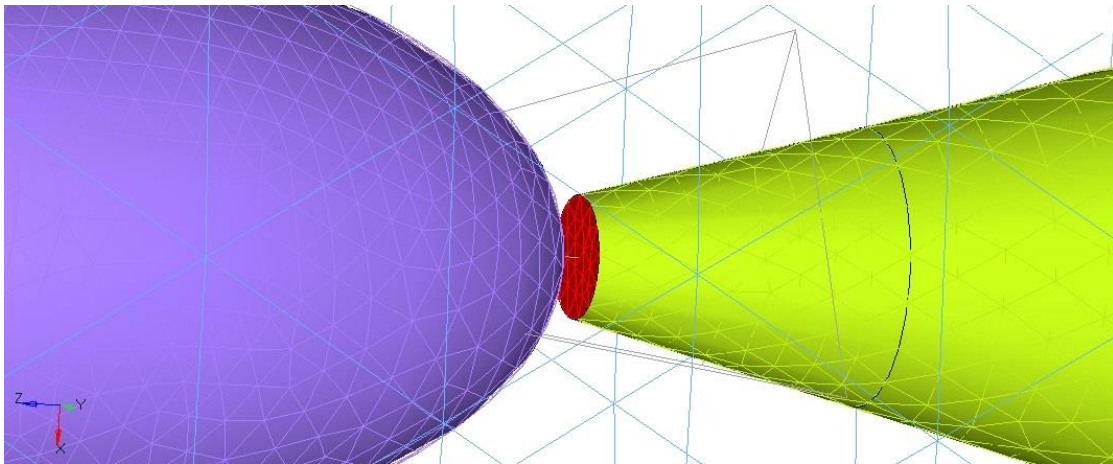


Figura 3-12 Detalle de la superficie y mallado de la elipse (morado), boquilla (amarillo) y salida de la boquilla (rojo) (líneas para controlar el crecimiento de la malla 3D en negro, superficie del vidrio de protección oculta).

3.1.4 Mallado 3D

El mallado tridimensional es realizado mediante el software “ANSYS TGrid”. Este nos ha permitido rellenar el volumen delimitado por el mallado 2D mediante tetraedros, importando el archivo del mallado anterior. De acuerdo con otros estudios (12), se fija un criterio de calidad en función del skew volumétrico. Así pues de acuerdo con los autores, que establecen apropiados valores por debajo de un skew del 90%, estimamos que nuestra malla es aceptable por contar con un skew medio del 22.1% y una skew máximo menor al 79.1% (sólo un reducido porcentaje sobrepasa el 70%). El número de elementos tridimensionales obtenidos suman un total de 176,870 unidades.

```
cells: 176870
faces: 374236
nodes: 40301
> Domain extents.
x-coordinate: min = -8.000005e-002, max = 8.000005e-002.
y-coordinate: min = -8.000005e-002, max = 8.000005e-002.
z-coordinate: min = -8.200000e-002, max = 1.235501e+000.
Volume statistics.
minimum volume: 2.956556e-011.
maximum volume: 6.589462e-007.
total volume: 1.314126e-002.
Face area statistics.
minimum face area: 1.333412e-007.
maximum face area: 1.665076e-004.
average face area: 2.632811e-005.
```

Figura 3-13 Datos mostrados por TGrid tras el mallado.

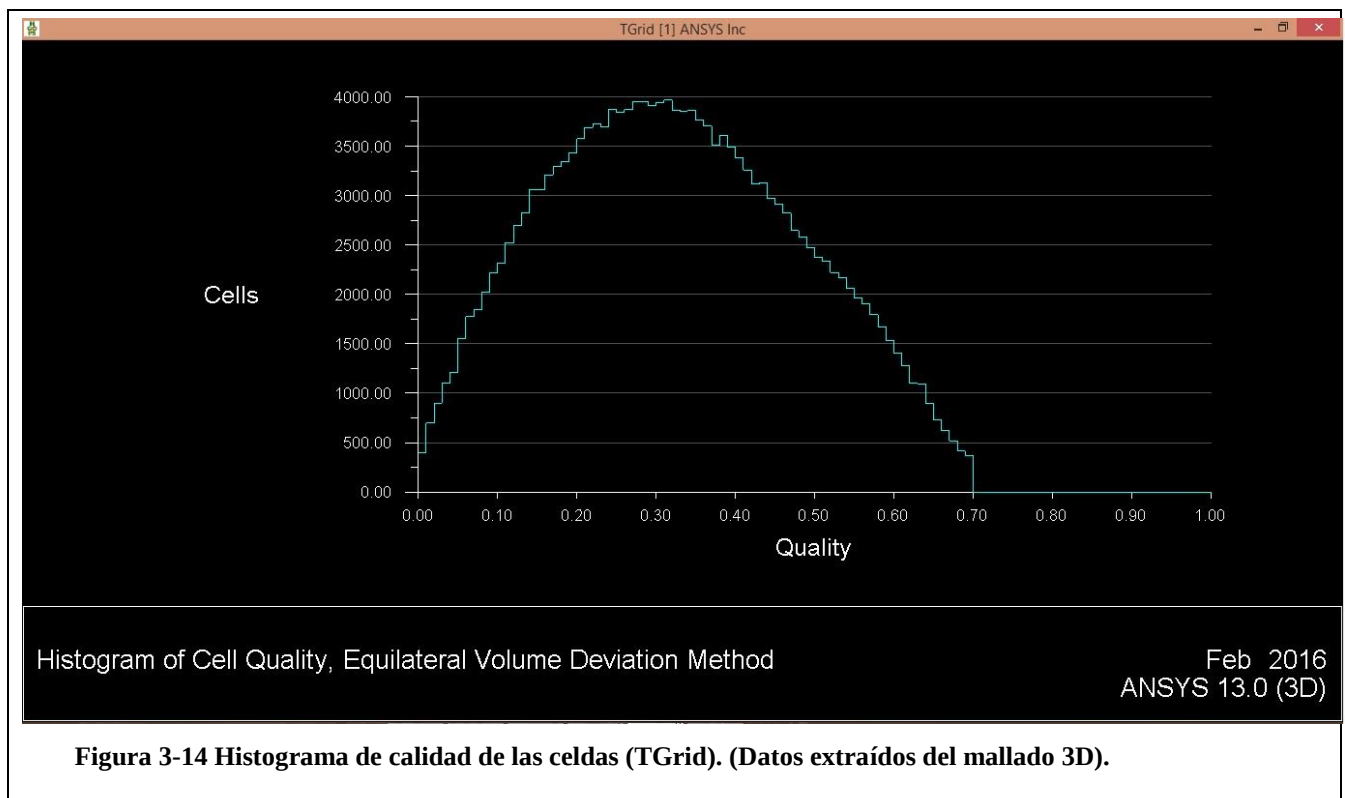


Figura 3-14 Histograma de calidad de las celdas (TGrid). (Datos extraídos del mallado 3D).

Hay que decir respecto a este paso que si bien TGrid permite el uso de diversos tipos de mallado, se optó por el mallado tetraédrico por presentar mejores acabados en cuanto a calidad, fijándose, para la formación de los mismos, un crecimiento geométrico de orden 1.6. Por otra parte el resto de elementos que pueden utilizarse no son más que agrupaciones de tetraedros.

3.1.5 Condiciones de contorno

Una vez finalizado el proceso de mallado es necesario fijar las condiciones de contorno asociados para que ANSYS FLUENT pueda realizar los cálculos. De esta forma el programa divide los elementos que constituyen el mallado 3D en varios tipos de acuerdo con la función que van a ejercer y del comportamiento de cara a la simulación. De entre las opciones que FLUENT ofrece hemos utilizado las siguientes:

- **Mass-flow-inlet**

Utilizado en superficies para establecer zonas de entrada de algún fluido, gas o líquido. Permite fijar entre otras cosas parámetros de caudal, vector de velocidad o temperatura de la mezcla, así como la composición de la mezcla de entrada.

- **Pressure-outlet**

Utilizada en superficies cuya función es servir de escape. Permite establecer como principal parámetro la presión a la salida de ésta a fin de recrear condiciones como las que podrían darse al expulsar gases a la atmósfera. El resto de parámetros son consecuencia de los cálculos realizados por el programa (si bien se pueden fijar condiciones).

- **Wall**

De limitación de paredes a las que se les asigna propiedades tales como el material, el espesor o parámetros térmicos como la generación de calor.⁴ Son llamadas también paredes exteriores aunque no necesariamente delimiten el contorno de un volumen estanco. En ocasiones su uso tiene a fin general superficies que influyan en el recorrido de las partículas, véase el mezclador.

- **Interior**

Para las zonas del mallado tanto tridimensionales como superficies. Se aplica a aquellas partes que van a ser ocupadas por fluido. En general, no permite la asignación de parámetros o valores por ser estos resultados de los cálculos del programa durante los procesos de convergencia.

El programa, en base al mallado creado en TGrid, nos divide la totalidad de la malla en zonas asignadas a cada volumen delimitado por paredes, ya sean tipo “Wall” o “Interior”. De acuerdo con esto, las zonas generadas son las siguientes: cámara, chimenea, vidrio, entrada de aire y entrada de gas. Las paredes interiores permiten separar los espacios que componen la malla, mientras que las paredes Wall son el equivalente a una pared física. Dividimos el mallado general (Figura 3-15) en cinco zonas⁵:

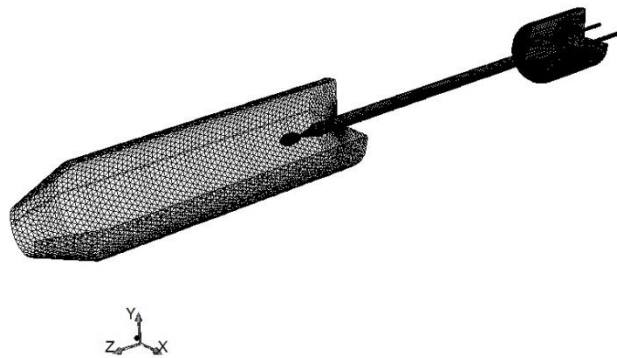


Figura 3-15 Vista general del mallado exterior

Cámara: Compuesta por un volumen delimitado por paredes exteriores. Cuenta con los agujeros de entrada y salida de aire, combustible y mezcla, así como una pared en su interior sólida que recrea el mezclador.

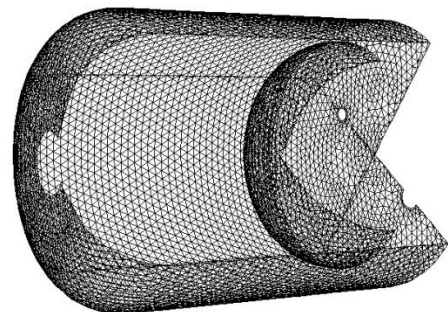


Figura 3-16 Cámara

⁴ El programa genera en automático una serie de superficies nombradas como “Shadow”. Éstas son intersecciones de distintas zonas del mallado y tienen la consideración de superficie tipo “Wall”.

⁵ En las figuras se muestra el mallado exterior. Para ver el mallado 3D ir a Anexo III: Mallado 3D.

Entradas de aire y combustible: Están formadas por sendos cilindros. Las paredes laterales delimitan su interior.

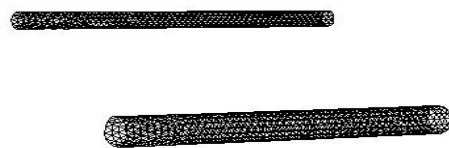


Figura 3-17 Entradas

Chimenea y boquilla: Formado por una única pieza abierta por ambos extremos. En la zona de unión con la cámara, presenta un ensanchamiento que se ajusta a la holgura que existe en la unión cámara-chimenea.

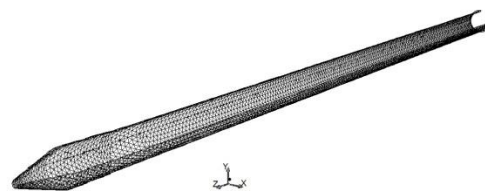


Figura 3-18 Chimenea

Vidrio: Compuesto por las paredes teóricas del recubrimiento de seguridad, presenta un apertura donde se acopla la boquilla. En su cara opuesta se encuentra el escape de los gases generados tras la combustión. Cabe destacar la elipse generada en las proximidades de la boquilla, formada por paredes internas cuyo fin es controlar el crecimiento del mallado.

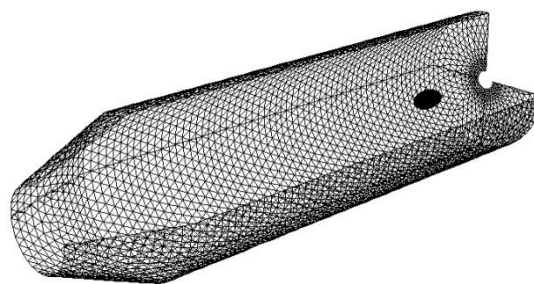


Figura 3-19 Vidrio

Los materiales que se asignaron mediante el programa fueron los que éste trae predefinidos. Así se usó el vidrio para todas las superficies que simulaban paredes físicas (vidrio protector, chimenea y entradas de aire y combustible) a excepción de la boquilla y de la cámara para las que se utilizó acero. Para la zona del vidrio de protección se tomó como coeficiente de conductividad térmica un valor comprendido entre 0.6 y 1.0 W/(mol.K), de acuerdo con diversas fuentes, tomando para los cálculos un valor constante de 0.9 W/(mol.K).

3.1.1 Simulación

En cuanto a las simulaciones, de acuerdo con los estudios realizados por otros autores (12) (3) (30), se decidió adoptar los modelos que mejor se adaptan a los procesos de combustión, teniendo en cuenta la viscosidad y las características químicas de la mezcla de gas-propano. Se ha optado, como ya se indicó al hablar de la CFD, por el empleo de un modelo $k - \epsilon$ estándar, con funciones de pared estándar para resolver la transición hacia la capa límite. En cuanto al modelado de especies se fijó para una mezcla de propano-aire en dos pasos, un modelo con transporte de especies, con reacciones volumétricas y fuente de difusión de energía, con un Modelo de Viscosidad Turbulenta tipo “Eddy-Dissipation Concept.”

Así pues, fijados estos parámetros para todas las simulaciones, se realizaron múltiples ensayos con distintas proporciones de aire-combustible. De esta forma variando los caudales de entrada por

los conductos de aire y de propano de acuerdo a diferentes relaciones estequiométricas. Partiendo de la proporción ideal de mezcla, se realizaron diversas simulaciones con múltiples caudales, acotando así los valores para los cuales se genera llama de forma satisfactoria. Tomando después un valor de referencia para un caudal determinado, se variaron las proporciones de la mezcla para el estudio de velocidades a fin de contrastar los datos obtenidos con otros extraídos de otros estudios tomando datos de la temperatura y la velocidad.

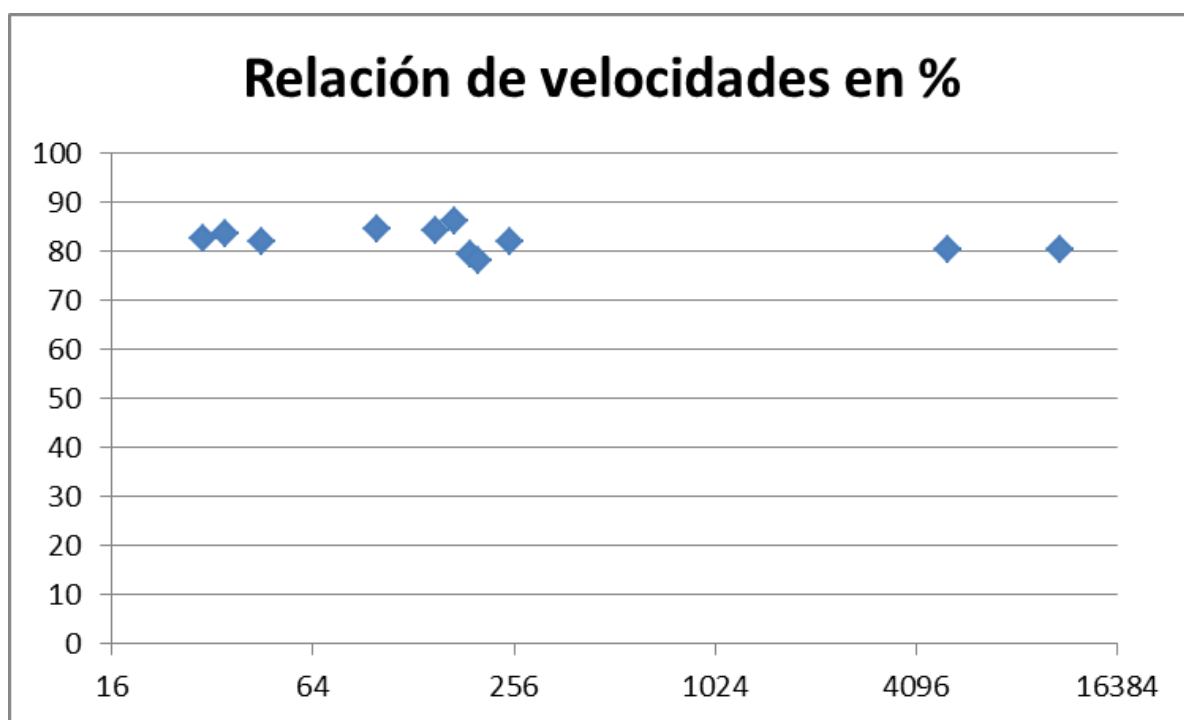
4 RESULTADOS

4.1 Procedimiento

A fin de acotar los caudales viables para realizar simulaciones, se estableció los caudales teóricos requeridos para generar distintas velocidades de salida en la superficie de la boquilla (4mm de diámetro). Para ello se partió de la hipótesis de gas inerte e incompresible comparando la velocidad esperada con la obtenida. Se estableció así que la velocidad media obtenida es un 82.15% inferior a la esperada para procesos sin combustión (Gráfica 2).

Velocidad Esperada (cm/s)	Velocidad Obtenida (cm/s)
30	24,81043
35	29,23129
45	36,85626
100	84,63496
150	126,558
170	146,3845
190	151,0887
200	156
250	205,06
5085	4095
11034,5606	8870

Tabla 4-1 Relaciones de velocidad



Gráfica 1 Relaciones de velocidad en %

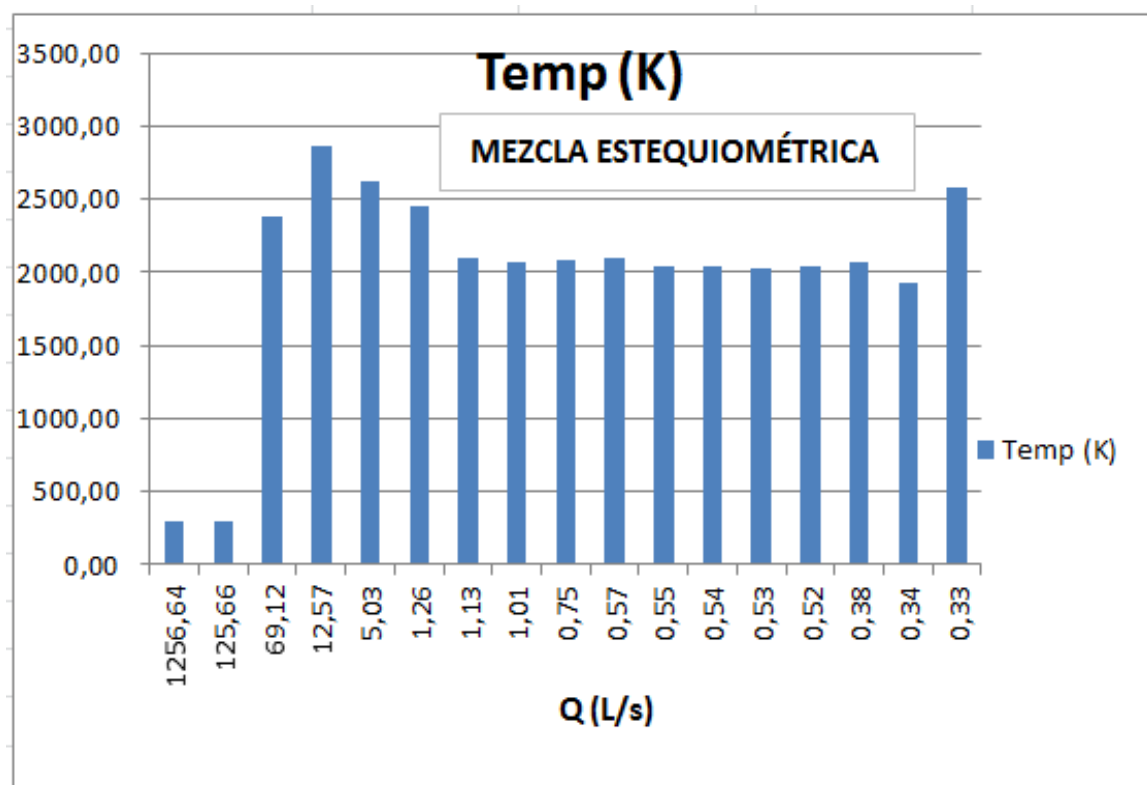
Para fijar los valores de entrada en las admisiones de aire y propano se realizaron tablas (Anexo IV:

Tablas de caudales) en función de una serie de caudales y la relación de flujo másico de cada admisión atendiendo a la relación de aire-combustible calculados a partir de los siguientes parámetros de la Tabla 4-2.

Condiciones Aire		Condiciones Gas	
Presión	1 atm	Presión	1 atm
Temperatura	300 k	Temperatura	300 k
Masa aire	28,84 g/mol	Masa propano	44 g/mol
P.m(molec)/RT	1,17153679 g/l	P.m(molec)/RT	1,78736542 g/l
		R	0,08205746 L*atm/K*mol

Tabla 4-2 Condiociones aire propano

Posteriormente, partiendo de la relación estequiométrica de gases en la admisión, se ejecutaron una serie de simulaciones para distintos caudales de entrada, acotando así los márgenes para los que la reacción de combustión se lleva a cabo de forma satisfactoria. Se obtuvo a partir de los mismos un incremento de la temperatura para ambos márgenes (superior e inferior). En el caso de caudales con velocidad insuficiente detectamos que la temperatura se eleva cuando la combustión comienza a generarse en el interior de la boquilla. En el segundo caso, un aumento de la temperatura achacado al efecto que las paredes hacen sobre la mezcla en combustión, precede a una abrupta caída de las temperaturas hasta que finalmente la llama se apaga por enfriamiento como se puede apreciar en la Gráfica 1.



Gráfica 2 Temperaturas para la mezcla estequiométrica

Uno de los puntos a tener en cuenta es que la mezcla de los gases se realiza de forma homogénea. Para ello se incorpora en el modelo una superficie cóncava en la entrada de aire y propano a la cámara. La finalidad de ésta es favorecer la generación de turbulencias en la cámara, de forma que se ralenticen el avance de ambos gases facilitando el mezclado de los mismos.

Para contrastar los resultados, se tomaron una serie de muestras de caudales próximos al límite inferior admisible⁶ y se compararon con otras muestras con proporciones de mezcla aire-combustible distintas a la estequiométrica. La finalidad de tomar valores bajos tiene un doble propósito, por un lado es más sencillo de acotar el valor límite ya que para el caso contrario las simulaciones requieren largos procesos de convergencia que pueden terminar en sofocación por enfriamiento del frente de llama, por otra parte, la presencia del vidrio de protección afecta menos a las llamas de menor tamaño. La presencia del vidrio guarda relación con la forma en que este influye a las líneas de presión de los gases y con la fuente de absorción de calor que éste ejerce sobre la mezcla gaseosa en combustión.

De acuerdo con otros estudios (2), se tomó como referencia las proporciones de mezcla de aire-propano 30:1, 40:1 y la estequiométrica. De acuerdo con las fuentes la reacción de máxima velocidad de propagación del frente de llama se corresponde con la primera de las tres mencionadas, quedando las otras dos por debajo en cuanto a velocidad. Si bien la idea es que en el futuro se pueda realizar una medición real en laboratorio mediante el cono de llama, a efectos del programa se ha estimado la velocidad de la llama en base a la siguiente estimación:

- Se delimita una zona centrada en la zona de generación de la llama donde la cinética de la reacción sea constante.

⁶ Llamamos límite inferior a aquel caudal a partir del cual la llama avanza a mayor velocidad que la mezcla de gases dado lugar a reacciones en el interior de la chimenea. Por el contrario, hablamos de límite superior a aquel caudal que por sus características hace inviable una combustión sostenida.

- Delimitada esta zona, generamos una superficie a partir de ésta.
- Una vez creada dicha superficie estudiamos dos parámetros, el área y el caudal que atraviesa las paredes.⁷ La relación entre ambas nos da un parámetro que si bien debido a las suposiciones realizadas presenta determinadas inexactitudes, da una idea de qué reacciones generan llamas más rápidas.

4.2 Simulaciones

Las sucesivas simulaciones nos permiten obtener infinidad de parámetros (25), si bien, de cara a este trabajo los más utilizados para la obtención de las conclusiones son los relativos a las temperaturas, la velocidad y las especies que conforman la mezcla. Aunque la totalidad de los datos de las simulaciones realizadas han sido recogidos en tablas que se mostrarán en apartados posteriores, para mayor detalle, se exponen a continuación ejemplos gráficos realizados para el caso de una mezcla seleccionada. La simulación utilizada se corresponde a una perteneciente a una mezcla estequiométrica de gases, concretamente a la de caudal de mezcla de 0.75 L/s. Se ha tomado ésta por presentar un caudal que genera una llama estable para las tres mezclas tratadas. Así pues de entre todo el abanico de posibilidades que nos ofrece el software los que han resultado de mayor interés son las siguientes:

4.2.1 Trayectoria gas

Para estudiar el recorrido que realiza el fluido, el programa nos permite mediante el comando “Pathlines” estudiar el recorrido de una partícula durante un intervalo de tiempo. Esto, combinado con una variación de color en función de la temperatura, como es el caso del ejemplo, permite darnos una idea de dichas variaciones de temperatura a lo largo de los posibles caminos a seguir, así como las zonas de mayor turbulencia. Las Figura 4-1 y Figura 4-2 nos muestran las trayectorias en las zonas de salida del gas en la boquilla y en la cámara de mezclado respectivamente.

⁷ Al ser el caudal definido en unidades de longitud al cubo partido un intervalo de tiempo, y por ser el área expresada en unidades de longitud al cuadrado, la relación entre caudal y área vendrá dado en unidades de longitud partido tiempo (velocidad).

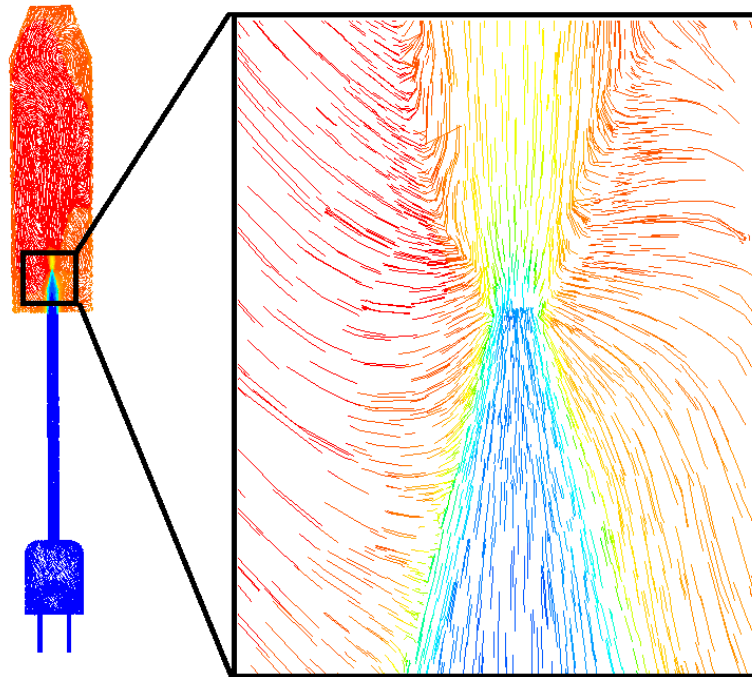


Figura 4-1 Detalle trayectoria en la zona de la boquilla

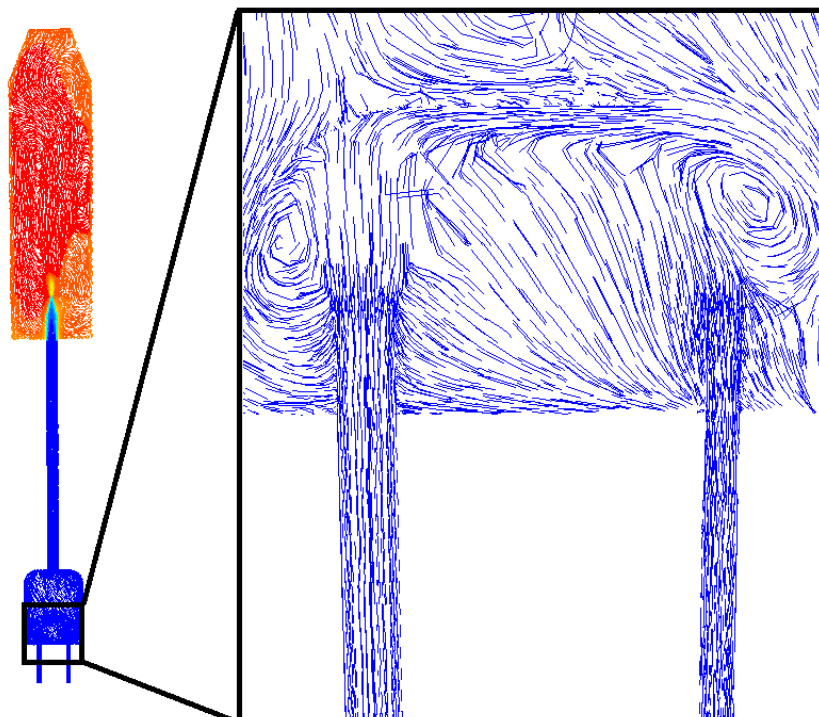
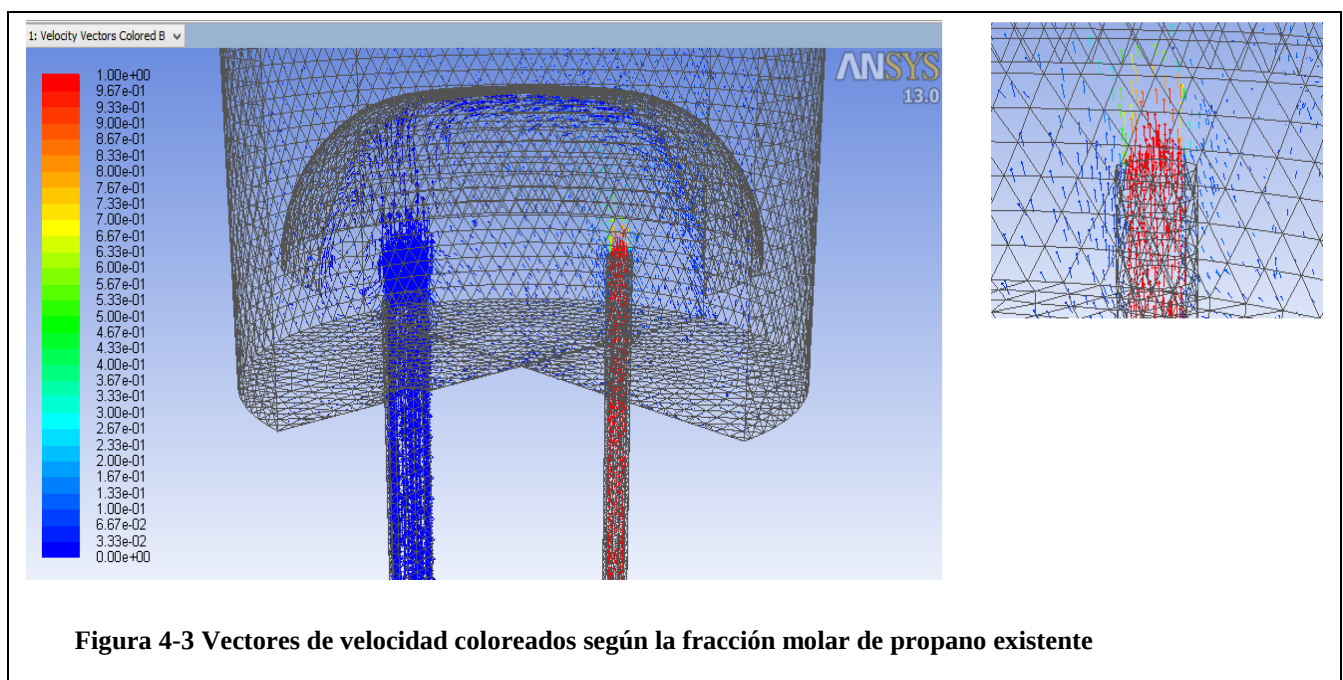


Figura 4-2 Detalle trayectoria en la zona de mezcla

4.2.2 Velocidades

Uno de los puntos del estudio se basa en comprobar la velocidad máxima de las partículas, así como su valor concreto en determinadas zonas de interés tales como la zona de propagación de la llama. De forma similar que con el comando “Pathlines”, podemos analizar los vectores cuyo módulo es proporcional a la velocidad de las partículas a las que hacen referencia. De igual forma, se puede variar el color de los vectores de acuerdo con el parámetro deseado. En la Figura 43 se muestran los vectores de velocidad entrando en la cámara de mezclado los cuales están coloreados según la fracción de propano en el gas. Por su parte la figura 44 muestra los vectores en la región de la llama.



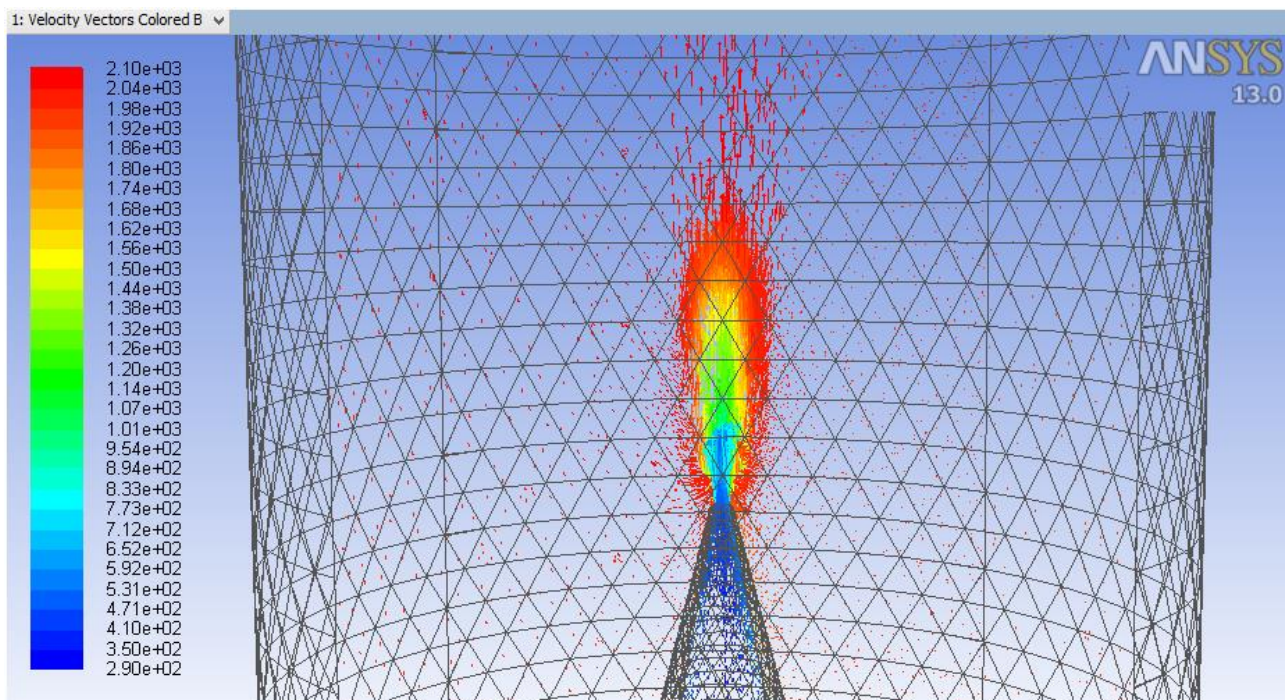
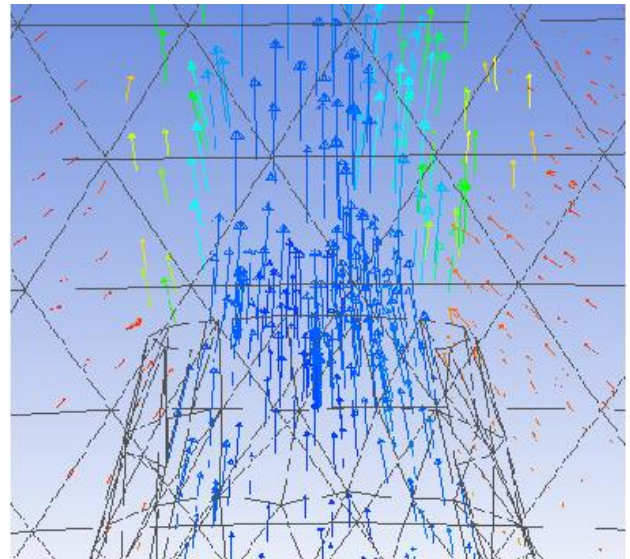


Figura 4-4 Vectores de velocidad coloreados según la temperatura de la mezcla (detalle de la llama generada en la boquilla).

Mediante un aumento de la imagen podemos observar con detalle los recorridos que realizan las partículas en las proximidades de la zona de combustión o en otras zonas de interés.



4.2.3 Temperatura

A parte de la temperatura con la que se han coloreados los vectores, es posible representar los contornos de temperaturas para un mayor detalle en el volumen fluido. Mediante este comando, se pueden apreciar el cambio gradual que se produce en la zona de generación de la llama.

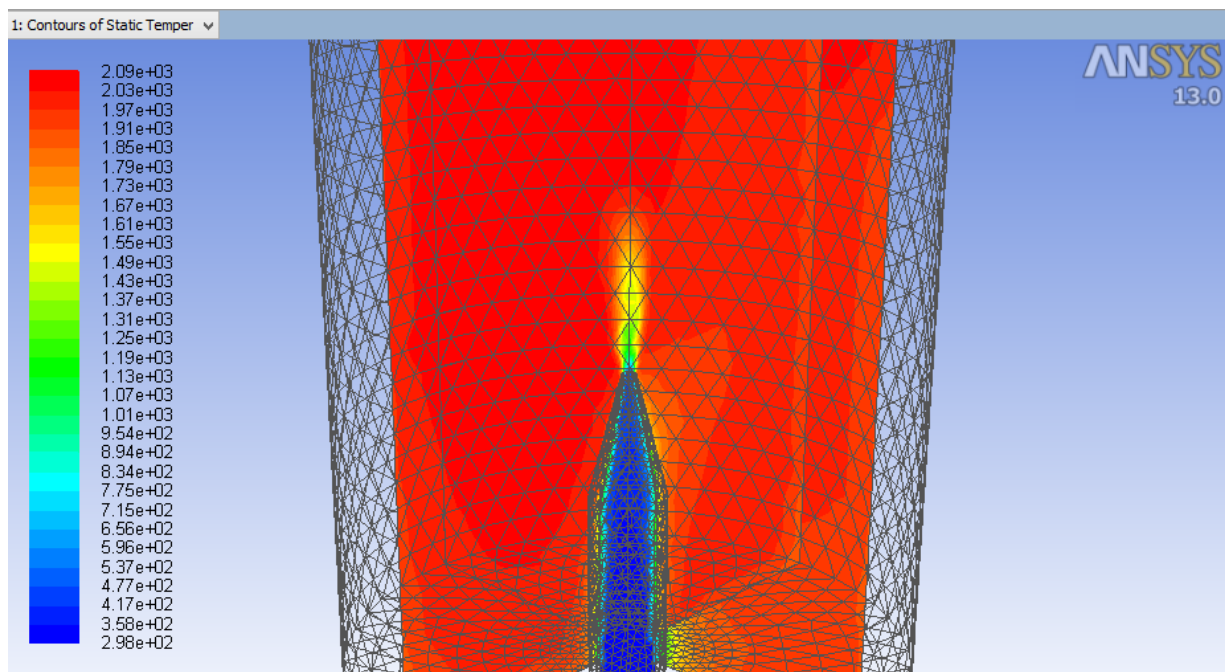


Figura 4-5 Contorno de temperaturas para un corte de la zona del vidrio de protección

En la imagen se pueden apreciar las variaciones de temperatura, indicativo de que se está generando un proceso de combustión, en este caso con temperaturas de hasta 2090 K. A la salida de la chimenea encontramos que la temperatura de la mezcla es de 300 K. Se puede apreciar en las paredes de la boquilla, así como en las inmediaciones de la misma, un incremento de la temperatura debido al gas quemado que rodea las paredes exteriores de la chimenea. En caso de paredes bajo aisladas podría generarse un fenómeno de autoignición no deseado debido al efecto de las altas temperaturas de la pared. Por otra parte la propia mezcla a mediada que absorbe calor de las paredes refrigera las mismas

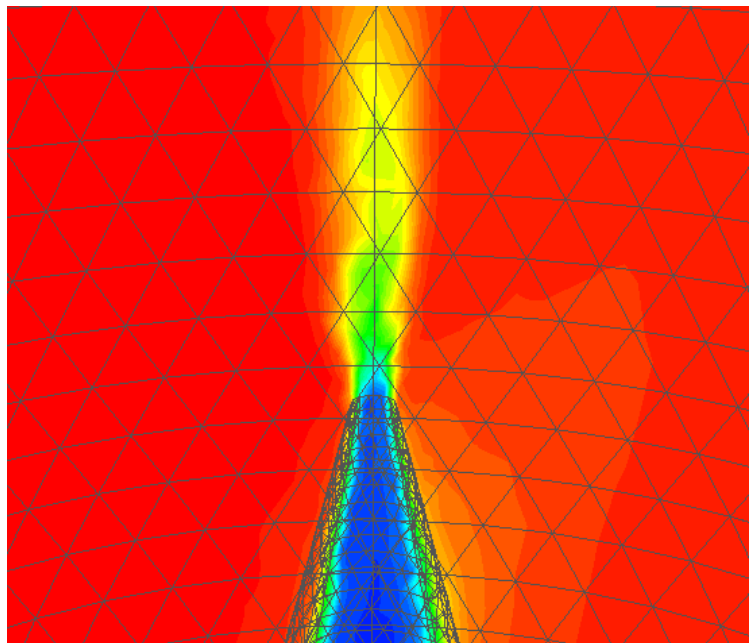


Figura 4-6 Detalle del contorno de temperaturas en la zona de la llama

4.2.4 Especies

A efectos de comprobar la eficiencia de la reacción, se han analizado las concentraciones de las distintas especies gaseosas que toman parte en las reacciones. De ésta forma podemos contrastar los datos obtenidos del resto de parámetros. En la zona donde se genera la combustión se observa como

los reactivos van desapareciendo al tiempo que se forma dióxido de carbono y agua (debido a la naturaleza de la propia combustión), de la misma forma se puede apreciar como la concentración de los gases (propano) disminuye al llegar a la cámara de mezcla (Figura 4-8 y Figura 48). En líneas generales se cumple que una vez habiendo entrado en la cámaras ambos gases (aire y propano) se mezclan entre sí quedando de forma homogénea. A continuación ascienden por la chimenea hasta la boquilla, momento en el cual oxígeno y propano se desintegran al tiempo que se forman los productos ya mencionados. Durante todo el proceso encontramos que el nitrógeno se mantiene a lo largo del mismo. Hay que destacar la breve presencia del monóxido de carbono que comienza a formarse en la base de la llama y que de inmediato reacciona dando lugar al dióxido de carbono. Como se puede apreciar en Figura 4-7, la reacción de combustión se genera de acuerdo con lo que cabría esperar. Mientras que de forma progresiva los reactivos, como el oxígeno mostrado en la imagen, van desapareciendo, la temperatura de la mezcla incrementa de forma progresiva. Ambos hechos ocurren de forma gradual y simultánea como se puede apreciar. Al tiempo que desaparece el oxígeno sube la temperatura.

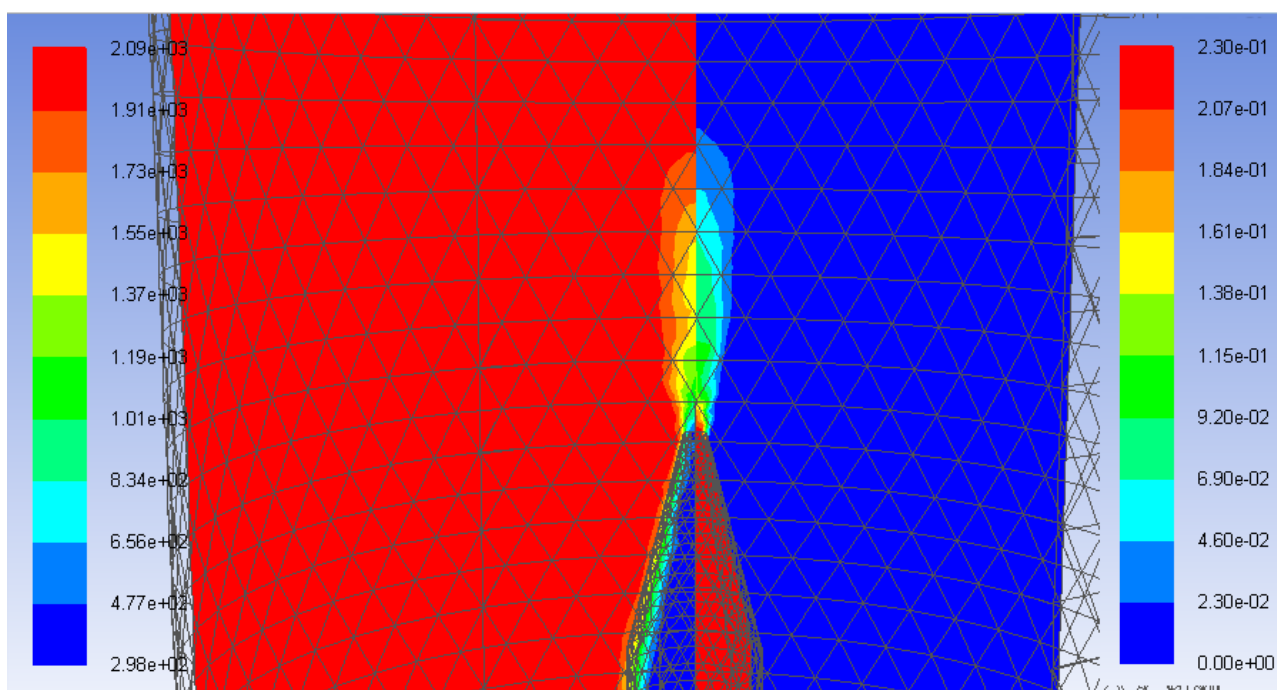


Figura 4-7 Detalle de la fracción molar de oxígeno y temperatura en la zona de llama.

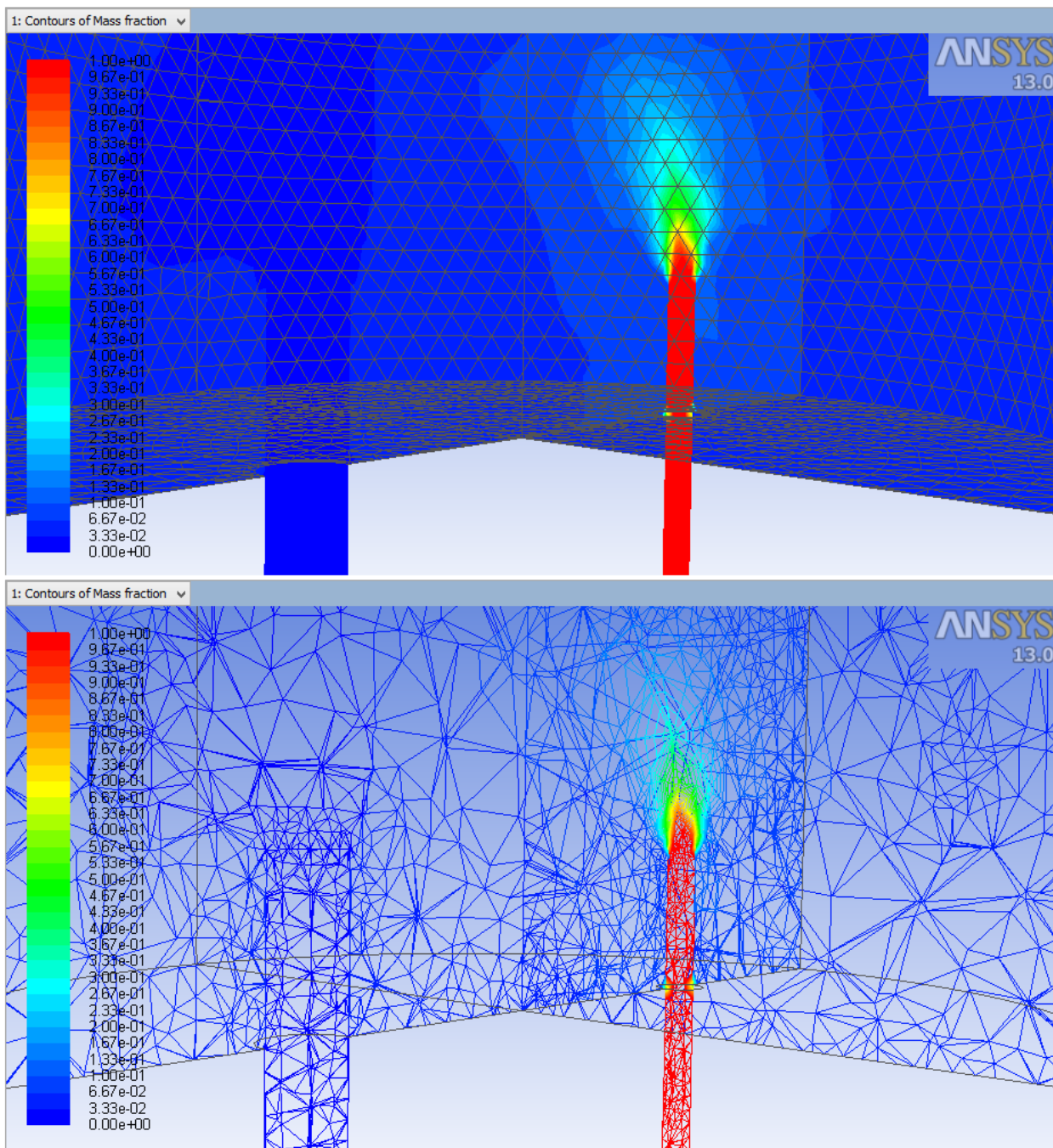


Figura 4-8 Fracción molar de propano (detalle del corte en volumen y en la malla) en la admisión de combustible a la cámara de mezcla.

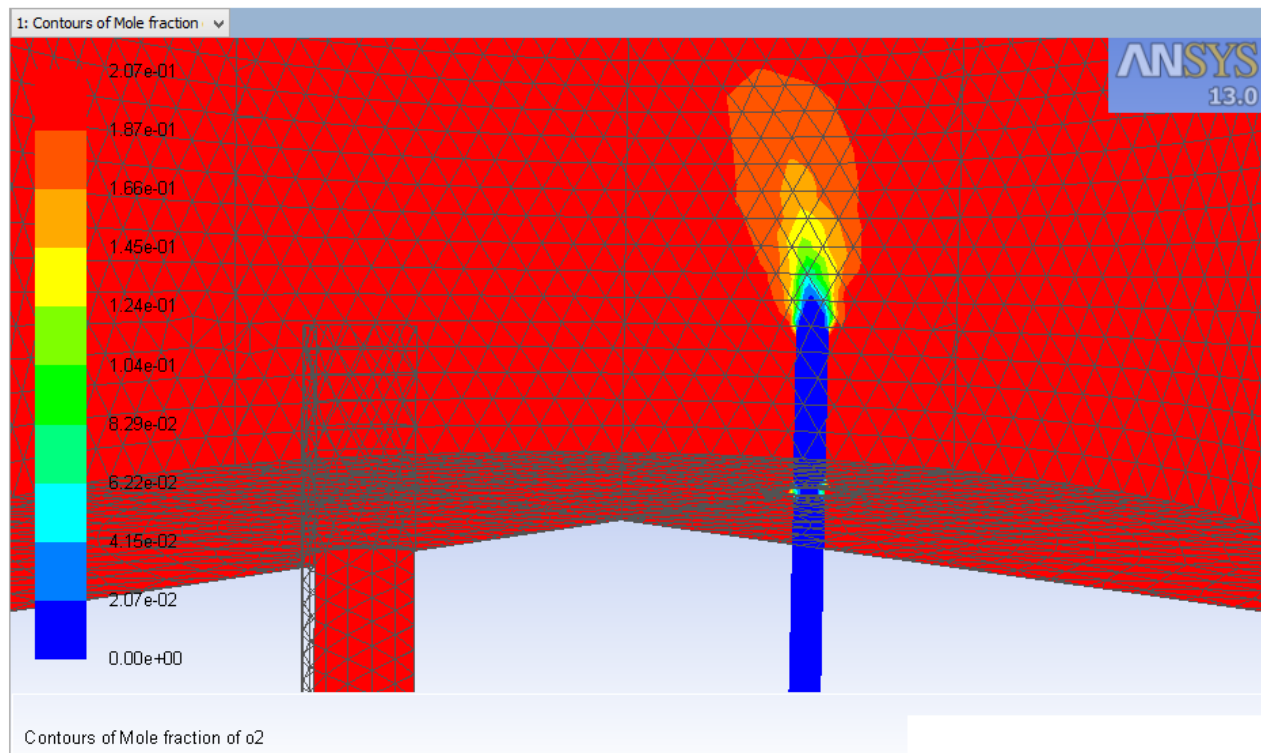


Figura 4-9 Las líneas de disipación del oxígeno son opuestas a las del propano

4.3 Estudio transitorio de propagación de la llama

El método de cálculo de la velocidad mediante desplazamiento del frente de llama a lo largo de un cilindro, como fue explicado en el Estudio de la llama (pág. 21), es una forma alternativa de obtener la velocidad del avance de la llama. Por ser un proceso que requiere mayor complejidad sólo se ha realizado una simulación a fin de contrastar el error obtenido para una misma velocidad calculada de dos maneras distintas. Presumiblemente el dato obtenido mediante este método debería aproximarse más al real.

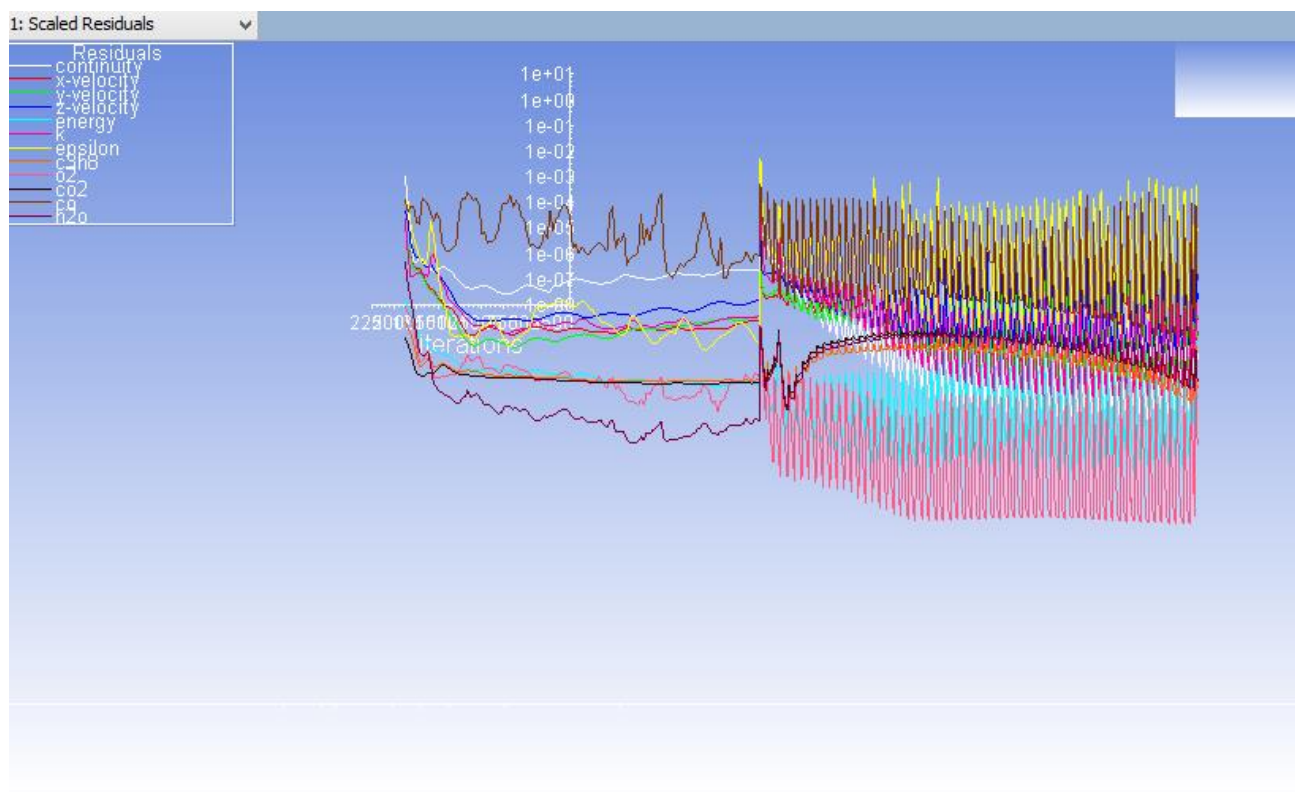


Figura 4-10 Las simulaciones en transitorio requieren un gran números de procesos de convergencia

La forma de llevar a cabo la simulación consiste en utilizar el modo “transitorio” que el programa nos permite, para a partir de unos “time steps” medidos en unidades de tiempo. De esta forma es posible almacenar datos de la simulación asignado un tiempo a cada uno. Este proceso es muy costoso (computacionalmente) ya que exige la convergencia de las variables en todos y cada uno de los “time steps” simulados. En el caso que se muestra a continuación se han simulado con un “time step” de 0.0001 segundos, lo cual es necesario para apreciar los fenómenos que dan lugar a la propagación de la llama por el tubo. La figura 50 muestra los valores residuales de las variables como muestra del proceso de convergencia.

Para el caso estudiado, se tomó como muestra patrón una simulación realizada previamente en estacionario para una mezcla estequiométrica, concretamente la correspondiente al caudal 0.75 L/s. A partir de dicha simulación se cortan los caudales de admisión y se ejecuta la simulación en modo transitorio. Con esto se frena el avance de los gases y la llama penetra en la boquilla propagándose por el conducto. La figura 51 muestra el perfil de temperaturas antes de iniciarse la propagación de la llama por el interior del conducto.

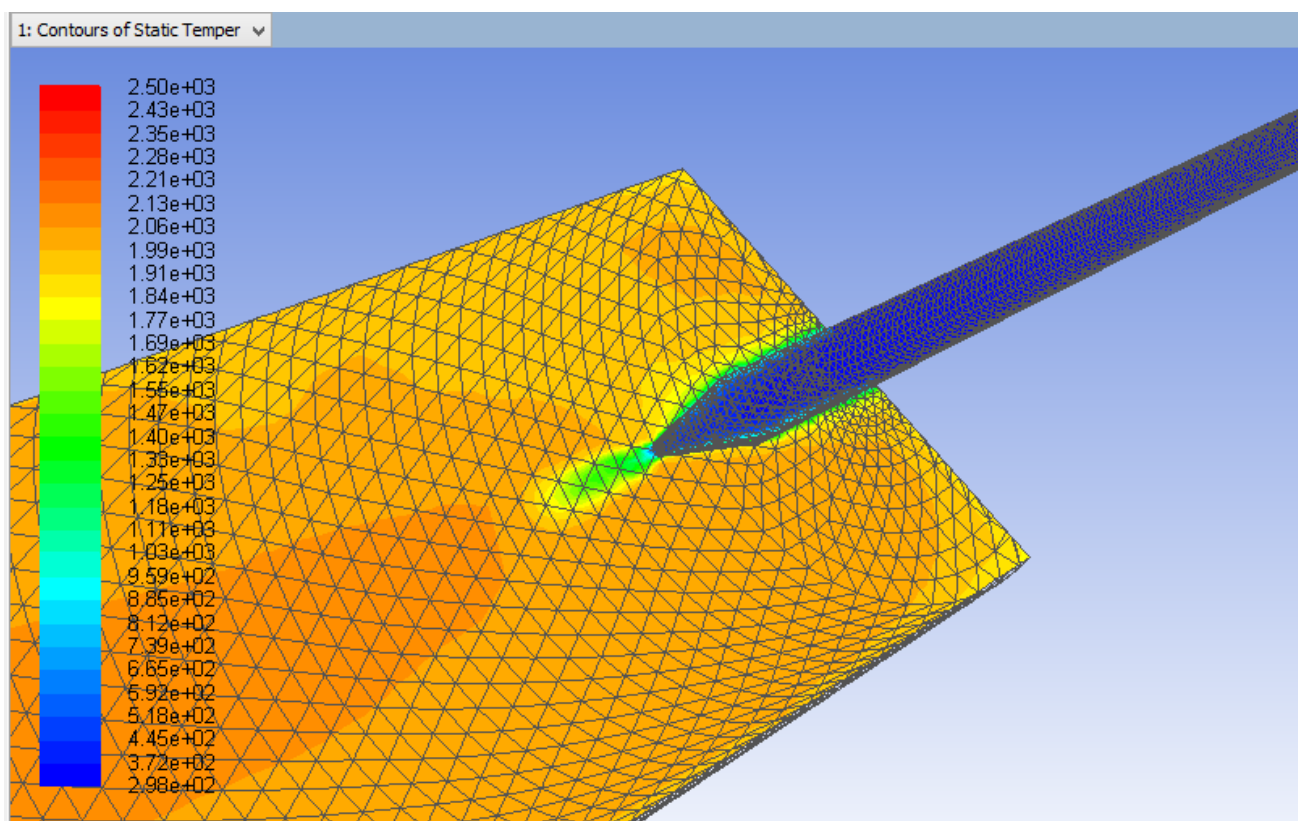


Figura 4-11 Llama de mezcla estequiométrica para $Q = 0.75 \text{ L/s}$

De igual forma que para el resto de simulaciones Fluent nos permite medir un gran número de parámetros si bien de nuevo en este caso el más representativo es la temperatura. Las figuras 52 y 53 muestran la propagación de la llama por el interior del tubo y el consiguiente aumento de temperatura que este produce. Cabe destacar el avance en media luna que progresivamente tiende al aplanarse y con él el propio frente. Nótese que el ascenso de temperatura al entrar el frente de llama en el conducto quedó registrado mediante anteriores simulaciones⁸.

⁸ En las sucesivas muestras se aprecia un descenso de la temperatura hacia los parámetros iniciales.

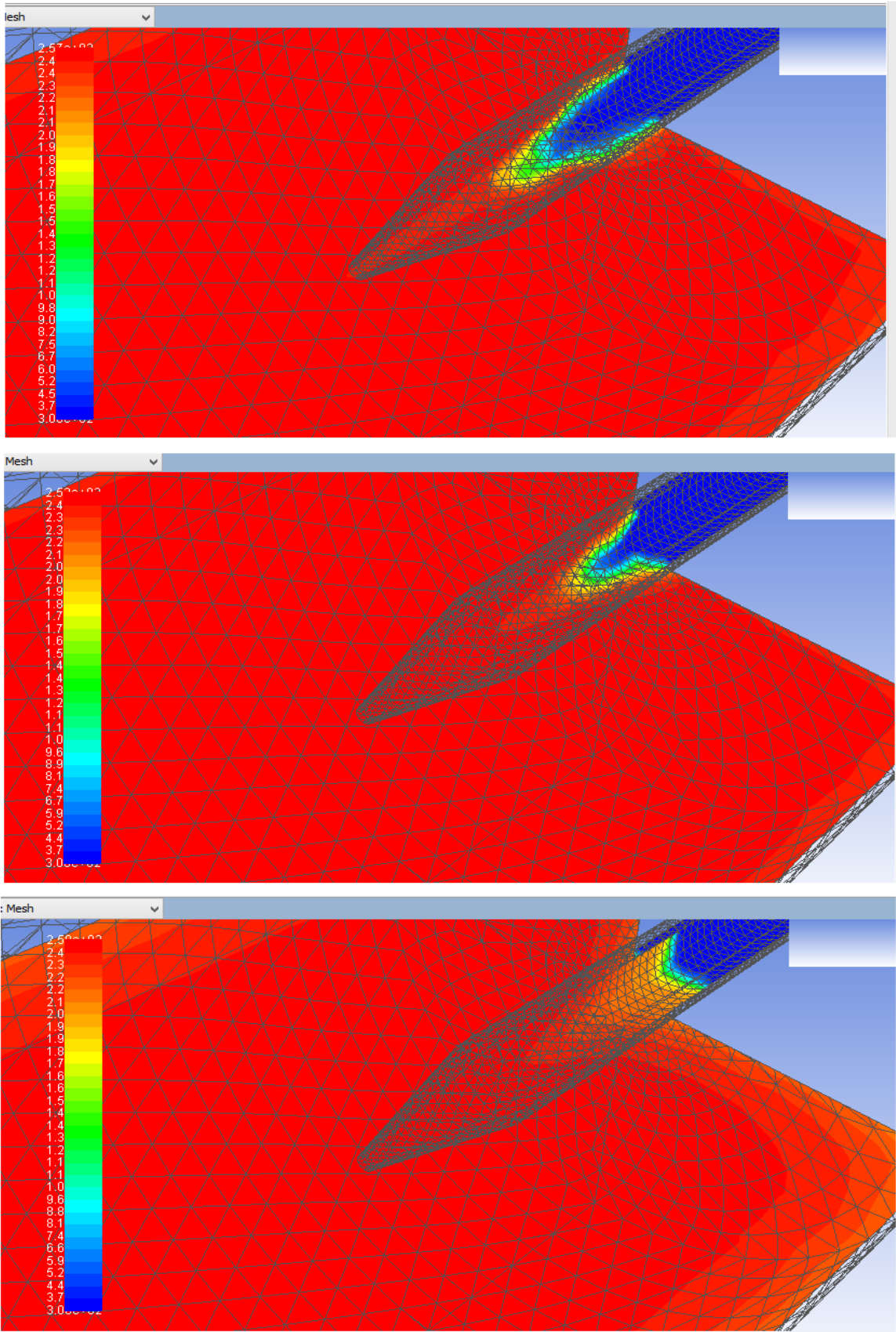


Figura 4-12 Evolución del frente de llamas en las primeras fases del avance

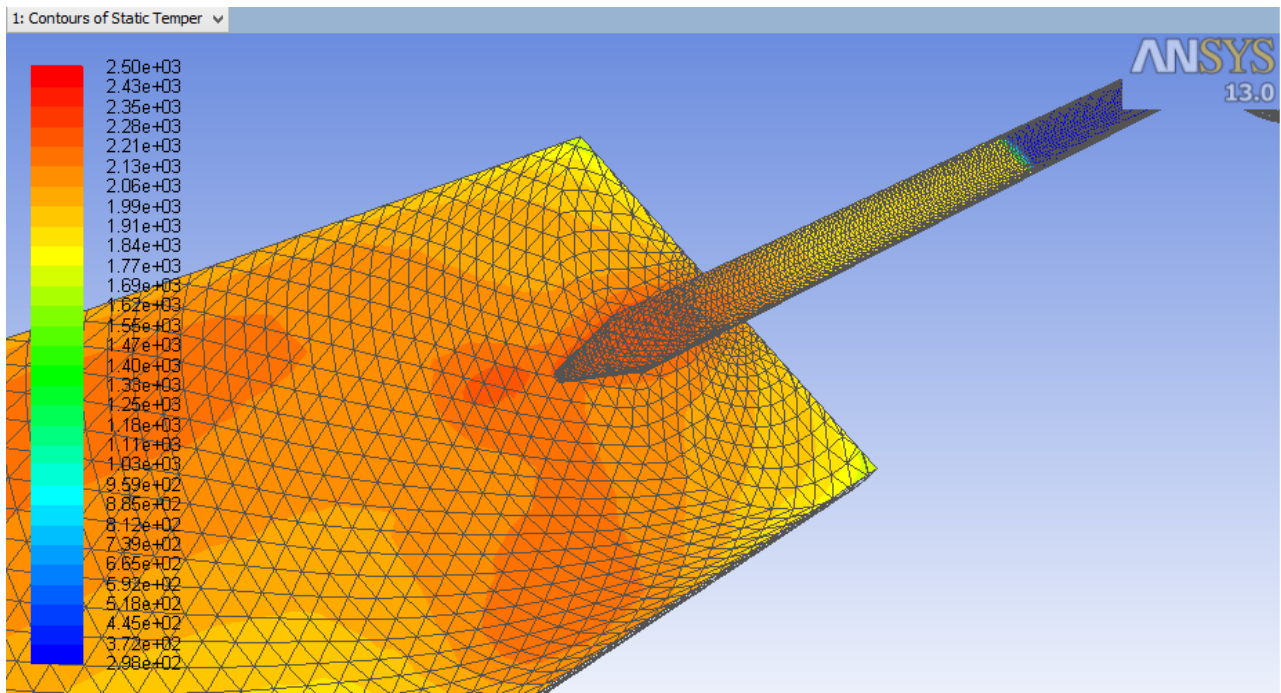


Figura 4-13 Avance del frente de llama en estado avanzado.

4.4 Datos numéricos

4.4.1 Llama generada en la cámara

Los datos mostrados han sido obtenidos de las simulaciones realizadas en el presente proyecto. Se ha tomado como referencia la mezcla estequiométrica como se indicó en líneas superiores y ha procedido a repetir las simulaciones con dos mezclas de proporciones ya citadas en líneas anteriores

En las tablas siguientes se puede apreciar las temperaturas que se generan al trabajar con distintos caudales y mezclas. Se incluyen de igual forma las velocidades calculadas de acuerdo al método explicado en el Procedimiento (pág. 61). A modo de referencia se ha incluido en la Tabla 4-3 las velocidades medias registradas en la superficie límite de la boquilla durante la combustión (V_{cp}).

Q (l/s)	RESULTADOS RAC (EST)		
	V_{pc} (m/s)	T(k)	V_{llama} (m/s)
1256,64			SE APAGA
125,66			SE APAGA
69,12		2388	
12,57	1307,16	2862	
5,03	537,80	2623	
1,26	166,16	2445	
1,13	142,91	2098	1,336
1,01	131,92	2070	1,370
0,75	118,36	2085	1,377
0,57	82,18	2100	1,154
0,55	0,00	2035	1,351
0,54	78,74	2040	1,177
0,53	77,82	2021	1,134
0,52	76,18	2038	1,285
0,38	59,78	2069	COMBUSTIÓN DENTRO BOQUILLA
0,34	41,17	1923	COMBUSTIÓN DENTRO BOQUILLA
0,33	232,76	2573	COMBUSTIÓN DENTRO BOQUILLA
$V_{media\ llama}$ (m/s)			1,25819649

Tabla 4-3 Mezcla Estequiométrica

Q (l/s)	RESULTADOS RAC (30:1)	
	T(k)	Vllama (m/s)
1,13	2237	2,01235298
1,01	2284	2,089830306
0,75	2488	2,927991462
0,55	2409	2,869111463
0,54	2414	2,95765553
0,53	2391	COMBUSTIÓN DENTRO BOQUILLA
Vmedia llama (m/s)		2,571388348

Tabla 4-4 Mezcla 30:1

Q (l/s)	RESULTADOS RAC (40:1)	
	T(k)	Vllama (m/s)
1,13	1821	0,814544718
1,01	1846	1,227679681
0,75	2102	1,510820535
0,55	2142	1,653551992
0,54	2207	1,466467604
0,53	2257	1,617192315
Vmedia llama (m/s)		1,381709474

4.4.2 Llama de desplazamiento por conducto

La simulación efectuada se ejecutó durante el tiempo necesario para recorrer el tubo al completo. Se ha podido observar que durante 0.5 segundos de tiempo simulado la llama recorre aproximadamente 45cm lo cual supone una velocidad de propagación de 0.9 m/s. De acuerdo con experimentos reales con mezclas de propano (Figura 1-6), el valor esperado de velocidad de propagación para nuestra mezcla debería ser de 0.5 m/s aprox. Este valor que dista en 0.4 s del obtenido, se puede considerar una buena aproximación a la realidad dada la simplicidad del mecanismo de reacción y el mallado utilizados. Así mismo la forma cónica de la boquilla altera el desplazamiento del frente de llamas por no tratarse de un cilindro. Por último, la variación de la forma del frente de la llama a lo largo de su recorrido dificulta, en la simulación, el tomar una referencia para medir de forma precisa pero el resultado obtenido se puede considerar una aproximación razonablemente buena.

5 CONCLUSIONES Y LÍNEAS FUTURAS

5.1 Conclusiones

En el presente trabajo se ha propuesto un diseño de un quemador para el estudio experimental de la combustión de gases hidrocarburos con aplicaciones de docencia e investigación. El diseño del sistema se basa en un mezclador de los distintos caudales de gas y aire para posteriormente proyectar la mezcla en una cámara de combustión. Para evaluar la validez del diseño se han realizado una serie de simulaciones CFD del sistema planteado. Se han estudiado distintas variables como temperaturas, velocidades, especies y reacciones químicas con el quemador funcionando con distintos caudales de gas y proporciones de mezclado. Se han obtenido valores razonables de las distintas variables. También se ha prestado especial atención a la propagación de la llama consiguiendo simular la propagación por el interior de un conducto. Por otra parte, las evoluciones de las curvas de temperatura y velocidades para distintos caudales y mezclas se corresponden con las reales. De acuerdo con esto, si bien el modelo es el que mejor se adapta a este tipo de simulaciones, las imperfecciones de éste pueden ser mitigadas (que no eliminadas) con parámetros más precisos de los materiales.

Otro factor a tener en cuenta son las limitaciones que presentan los ordenadores utilizados para realizar las simulaciones. Aunque un mallado de menor tamaño nos proporcionaría mejores resultados las sucesivas simulaciones llevarían más tiempo del que en ocasiones se dispone, más aún en lo referente a temas de enseñanza. De acuerdo con este punto un mayor número de máquinas trabajando en paralelo nos permitirá realizar convergencias de forma más rápida o llevar a cabo una mayor cantidad de ellas simultáneamente, sin necesidad de recurrir a ordenadores de alto rendimiento que supondrían una elevada inversión.

En resumen, se puede decir que si bien los parámetros obtenidos no coinciden con los que recogen los autores de las referencias en los trabajos, si es cierto que el comportamiento de las simulaciones es acorde con lo esperado. Así mismo hay que añadir que aunque como se ha mencionado los datos obtenidos varían respecto a los reales, ambos valores real y simulado presentan el mismo orden de magnitud lo cual da una idea de la viabilidad del diseño propuesto para la construcción del quemador.

5.2 Líneas futuras

Para a futuras aplicaciones existen diversas posibilidades con aplicación en el ámbito docente de elevado interés, en especial de cara a los estudios de ingeniería. Las sugerencias a continuación expuestas pretenden abrir paso a posibles ideas de aplicación práctica y que puedan ser realizadas sin necesidad de un alto coste.

- Desarrollo de un TFG que culmine con la fabricación del modelo planteado.
- Uso del modelo a nivel docente en prácticas de asignaturas impartidas por el CUD, para aquellas materias relacionadas con el campo de la termo-química y la mecánica de fluidos.
- Teniendo en cuenta que la idea final del proyecto es realizar ensayos en los laboratorios de la ENM, sería deseable realizar un trabajo de ingeniería inversa. Partiendo de los datos obtenidos a nivel experimental, ajustar los parámetros de las simulaciones a fin mejorar otras en las que no se cuente con un prototipo.
- Realización de simulaciones en paralelo con varios ordenadores conectados en red a fin de acelerar los cálculos realizados por las iteraciones.

6 BIBLIOGRAFÍA

1. **Petrucci, Ralph H.** *Química General*. 2011.
2. **Martínez, Isidoro.** *Combustión*.
3. **Juárez Sánchez, María Angélica** . *Análisis del proceso de combustión (a través de un programa de cómputo)*. Universidad Autónoma Metropolitana Unidad Iztapalapa. Mexico D.F. : s.n., 2003.
4. **R., Stephen.** *Turns. An intruiction to Combustion*. Nueva York : McGraw Hill, 1996.
5. http://enciclopedia.us.es/images/b/b8/Combusti%C3%B3n_del_metano.png.
6. **Yepes Osorio, Antony Eliseo y Tangarife Álvarez, Anderson Felipe.** *Medición experimental de la velocidad de llama de mezclas aire-propano mediante el método del ángulo de cono*. Universidad Tecnológica de Pereira. Pereira : s.n., 2014.
7. **ocwus.us.es.** http://ocwus.us.es/quimica-organica/quimica-organica-i/temas/1_estructura_y_enlace_en_los_compuestos_de_carbono/.
8. <http://encyclopedia.airliquide.com/encyclopedia.asp>.
9. <http://encyclopedia.airliquide.com/encyclopedia.asp>.
10. **Garrido, Jorge Raya.** *Composición isotópica del vapor de agua atmosférico en el sureste de la Península*. Granada : Editorial de la Universidad de Granada.
11. **Akkerman, V'yacheslav.** *Turbulent burning, flame accelaration, explosion tiggering*. Umeå University. Umeå : Print & Media, 2007.
12. **Comesaña Míguez, Roberto.** *Modelado y simulación de una caldera piro-tubular de biomasa 60 Kw de lecho de flujo con alimentación interior*. Universidad de Vigo. Vigo : s.n., 2008.
13. **A.G., Gaydon y H.G., Wolfhard.** *Flamel, their structure, radiation and temperature*. London : s.n., 1970.
14. **Benjumea Hernández, Pedro Nel, Higuita Bedoya, Carlos Mario y Córdoba Pérez, Camilo Andrés.** *Medición de la velocidad de propagación de llamas de mezcla de metano-aire y gas natural guajira-aire utilizando el método del ángulo del cono*. Universidad Nacional de Colombia. Medellín : s.n., 2003.
15. **Amell Arrieta, Andrés Adolfo.** *Fenómeno de Combustión en llamas de premezcla*. Combustión de combustibles gaseosos, Universidad de Antioquía. Medellín : s.n., 2009.

16. **Chomiak, J.** *Combustion: un study in theory, fact and application*. New York : Gordon and Breach Science Publisher S.A., 1990.
17. **Edmond, Perthius.** *La combustión industrielle*. Paris : Edition Technip, 1983.
18. <http://www.fullexperimentos.com/>.
19. **Lucia, Umberto.** *Gouy-Stodola Theorem as a variational principle for open systems*. Torino : s.n., 2012.
20. <http://libros.redsauce.net/>. *Combustión de gases y fuelóleos*.
21. *Review of laboratory swirl burners and experiments for model*. **Yasir M. Al-Abdeli a, Assaad R. Masri.** 2015, Experimental Thermal and Fluid Science, págs. 178-196.
22. <http://www.dna-lab-supplies.com/>. [En línea]
23. **G Hartung, J Hult and C F Kaminski.** *A flat flame burner for the calibration of laser thermometry techniques*. Department of Chemical Engineering, University of Cambridge. 2006.
24. www.flatflame.com. [En línea]
25. **ANSYS, Inc.** *ANSYS Fluent Tutorial Guide*. 2013.
26. **Thunman H., Leckner B., Niklasson F. y Johnsson F.** *Combustion of Wood Particles - A Particle Model for Eulerian Calculations*. Department of Energy Conversion, Chalmers University of Technology. Göteborg : s.n., 2002.
27. **Kuo, Kenneth Kuan-yun.** *Principles of combustion*. USA : Ed. John Wiley and Sons, 1986.
28. **Pérez Molero, Álvaro y Garre del Olmo, Carlos.** *Dinámica de Fluidos Computacional para Gráficos*.
29. **Julio Rendón*, Francisco Cadavid, Andrés Amell.** *Simulación de la estructura de llama en un quemador de premezcla parcial metano/aire en flujo concéntrico*. Universidad de Antioquía. Medellín : s.n., 2008.
30. **Tasende Pernas, María Teresa .** *Simulación CFD de un interacumulador con serpentín destinado a la producción de ACS. Propuesta de mejora mediante intercambiador-acumulador externo*. Universidad de Vigo. Vigo : s.n., 2013.

ANEXOS

ANEXO I: COMPONENTES DEL MODELO DE REFERENCIA

Fotografías de los elementos principales del modelo:



Figura 0-1 Boquilla.



Figura 0-2 Cámara.



Figura 0-3 Caudalímetros de propano y gas.



Figura 0-4 Chimenea.

ANEXO II: MALLADO 2D



Figura 0-1 Vista general de la malla 2D.

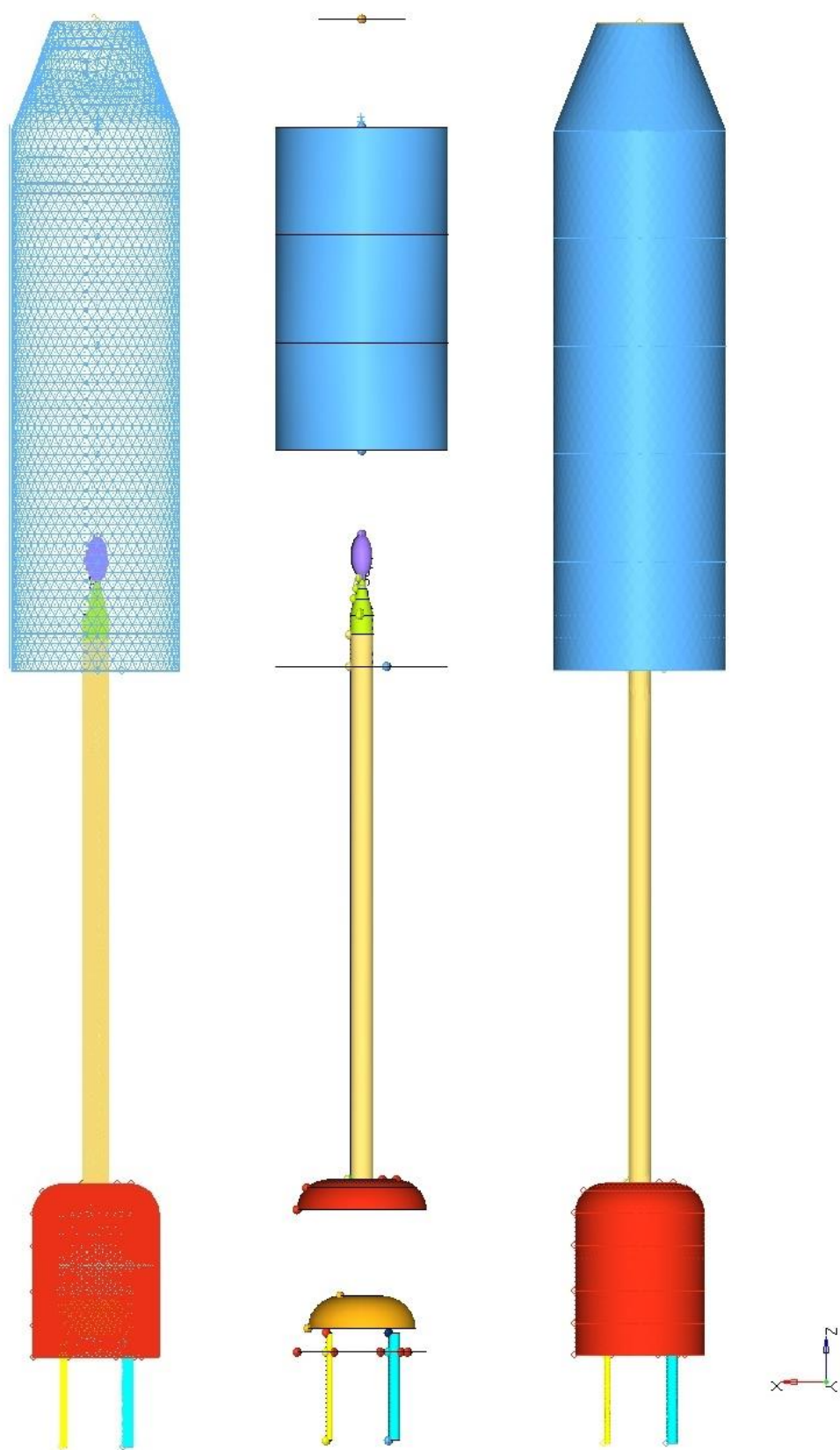


Figura 0-2 Vista general

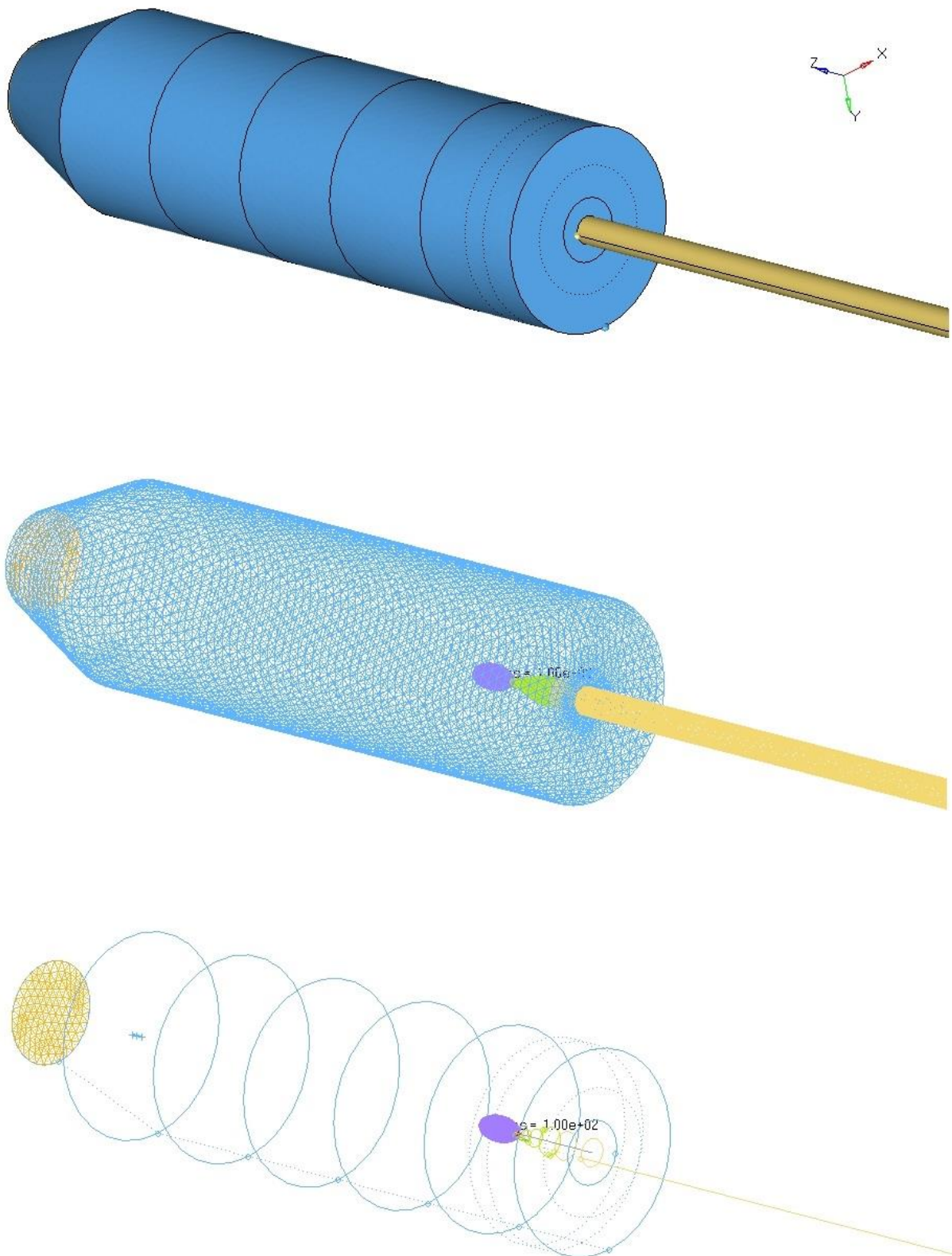


Figura 0-3 Distintas presentaciones permiten apreciar las superficies, y el mallado

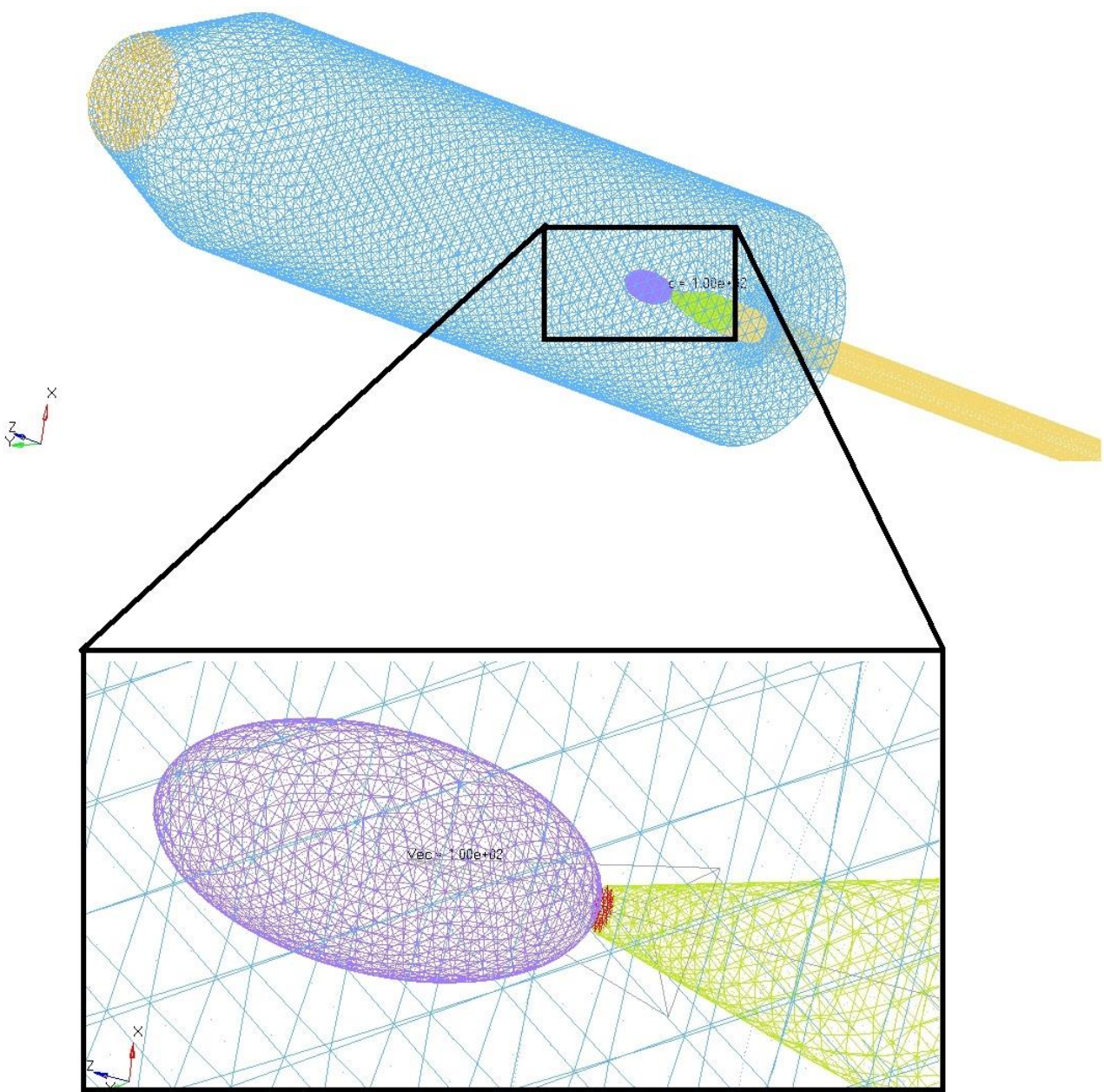


Figura 0-4 Detalle del mallado del vidrio de seguridad, salida de gases, y boquilla.

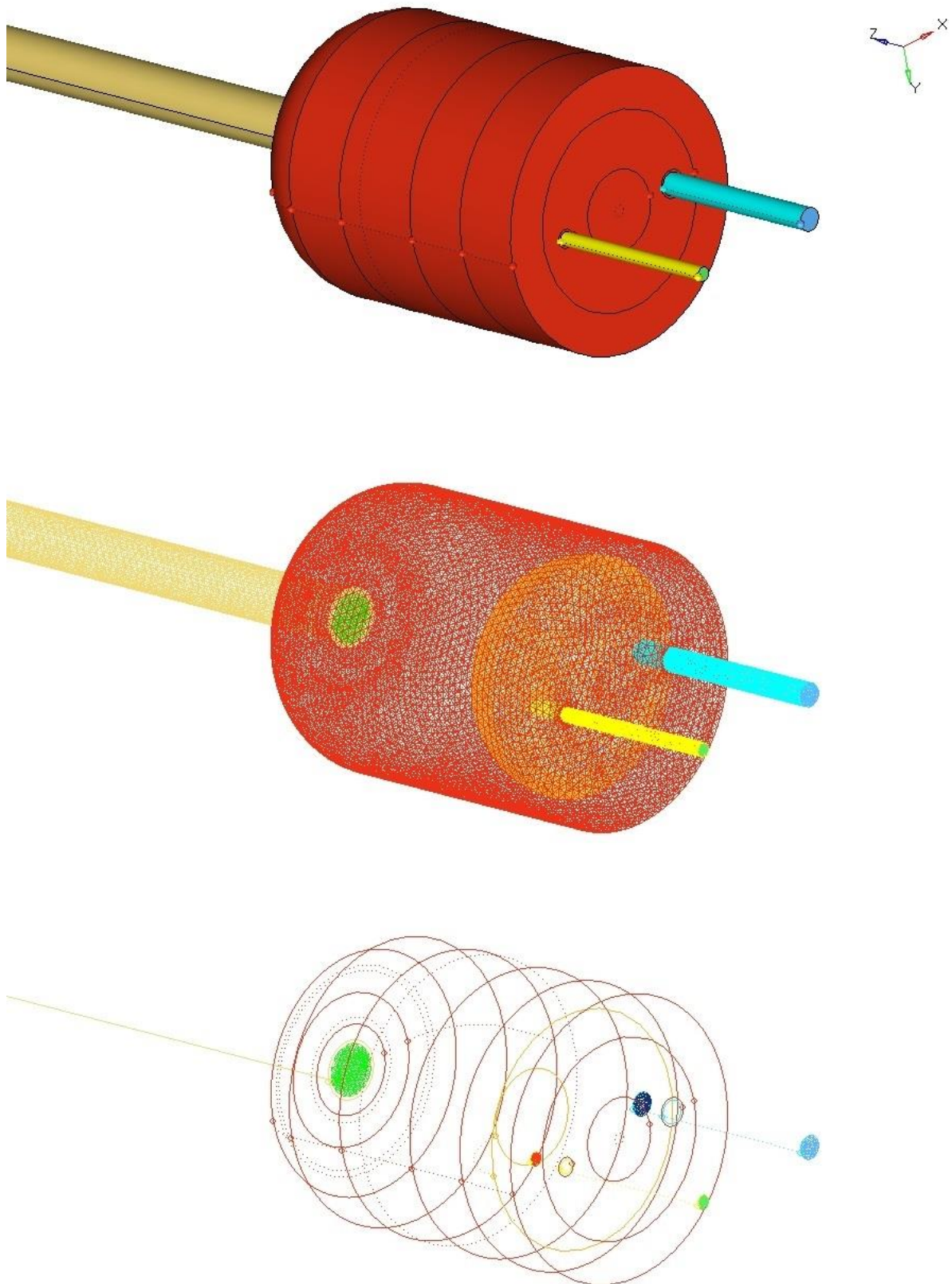


Figura 0-5 Distintas presentaciones permiten apreciar las superficies, y el mallado.

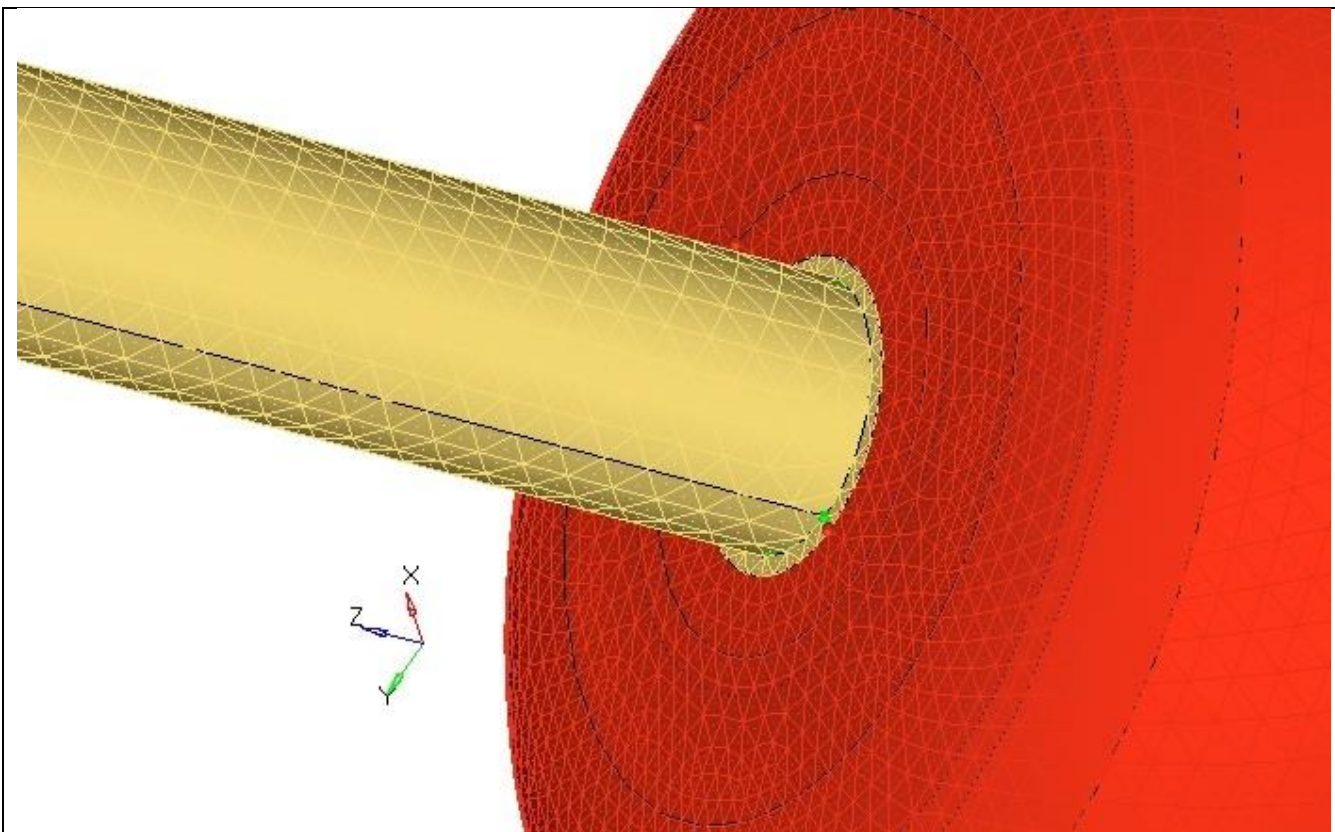


Figura 0-6 Detalle de la superficie y mallado de la unión entre la cámara y la chimenea.

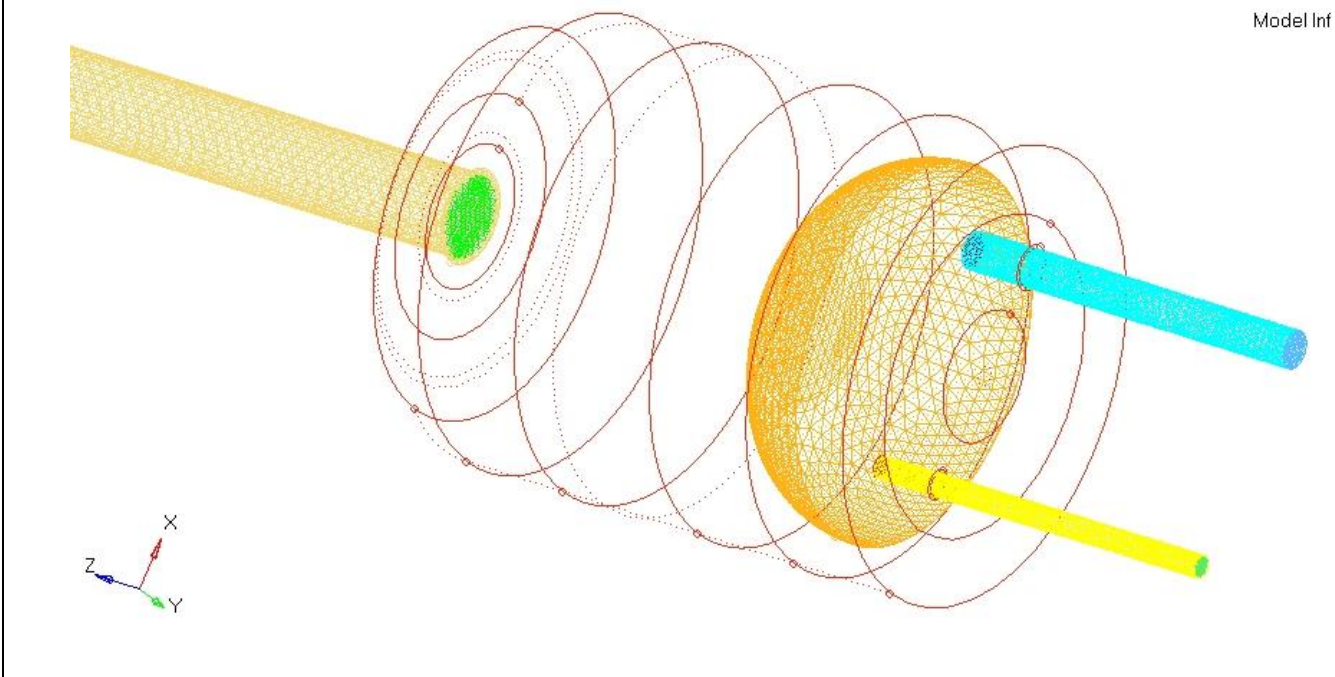


Figura 0-7 Detalle del mezclador y las admisiones.

ANEXO III: MALLADO 3D

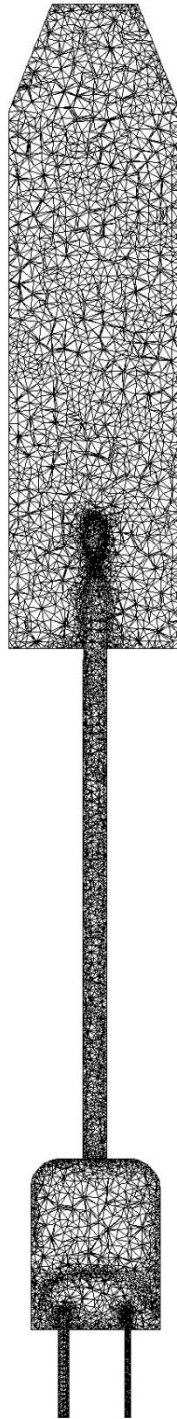


Figura 0-1 Corte malla (plano $y = 0$).

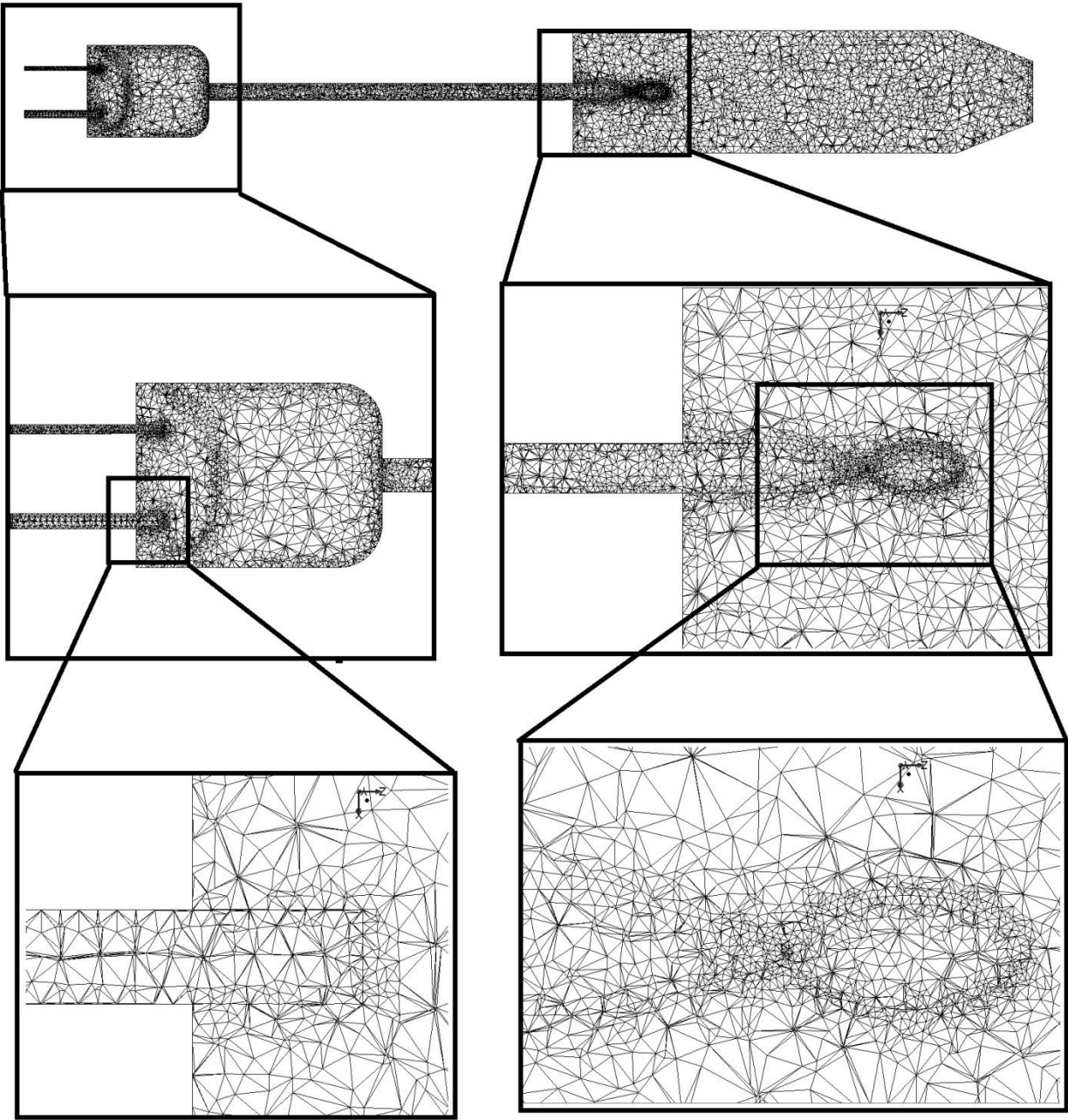


Figura 0-2 Detalle de la malla 3D

ANEXO IV: TABLAS DE CAUDALES

Diámetro 4 mm Velocidad (cm/s)	RAC 30:1			RAC EST		RAC 40:1	
	Qt (l/s)	Qa (l/s)	Qg (l/s)	Qa (l/s)	Qg (l/s)	Qa (l/s)	Qg (l/s)
2000	0,251327412	0,243220076	0,008107336	0,241193242	0,01013417	0,245197475	0,006129937
2500	0,314159265	0,304025096	0,01013417	0,301491553	0,012667712	0,306496844	0,007662421
3000	0,376991118	0,364830115	0,012161004	0,361789864	0,015201255	0,367796213	0,009194905
3500	0,439822972	0,425635134	0,014187838	0,422088174	0,017734797	0,429095582	0,01072739
4000	0,502654825	0,486440153	0,016214672	0,482386485	0,02026834	0,490394951	0,012259874
4500	0,565486678	0,547245172	0,018241506	0,542684795	0,022801882	0,55169432	0,013792358
5000	0,628318531	0,608050191	0,02026834	0,602983106	0,025335425	0,612993689	0,015324842
5500	0,691150384	0,66885521	0,022295174	0,663281417	0,027868967	0,674293057	0,016857326
6000	0,753982237	0,729660229	0,024322008	0,723579727	0,03040251	0,735592426	0,018389811
6500	0,81681409	0,790465248	0,026348842	0,783878038	0,032936052	0,796891795	0,019922295
7000	0,879645943	0,851270267	0,028375676	0,844176349	0,035469594	0,858191164	0,021454779
7500	0,942477796	0,912075287	0,03040251	0,904474659	0,038003137	0,919490533	0,022987263
8000	1,005309649	0,972880306	0,032429344	0,96477297	0,040536679	0,980789902	0,024519748
8500	1,068141502	1,033685325	0,034456177	1,02507128	0,043070222	1,04208927	0,026052232
9000	1,130973355	1,094490344	0,036483011	1,085369591	0,045603764	1,103388639	0,027584716
9500	1,193805208	1,155295363	0,038509845	1,145667902	0,048137307	1,164688008	0,0291172
10000	1,256637061	1,216100382	0,040536679	1,205966212	0,050670849	1,225987377	0,030649684
10500	1,319468915	1,276905401	0,042563513	1,266264523	0,053204392	1,287286746	0,032182169
11000	1,382300768	1,33771042	0,044590347	1,326562833	0,055737934	1,348586115	0,033714653
11500	1,445132621	1,398515439	0,046617181	1,386861144	0,058271477	1,409885484	0,035247137
RAC		30		23,8		40	

Tabla 0-1 Relaciones de caudales en l/s

Diámetro 4 mm		RAC (30:1)		RAC (EST)		RAC 40:1	
Velocidad (cm/s)	Qt (l/s)	g/s (AIRE)	g/s (GAS)	g/s (AIRE)	g/s (GAS)	g/s (AIRE)	g/s (GAS)
2000	0,25132741	0,28494127	0,01449077	0,28256676	0,01811346	0,28725786	0,01095644
2500	0,31415927	0,35617658	0,01811346	0,35320845	0,02264183	0,35907233	0,01369555
3000	0,37699112	0,4274119	0,02173616	0,42385014	0,0271702	0,4308868	0,01643466
3500	0,43982297	0,49864722	0,02535885	0,49449183	0,03169856	0,50270126	0,01917377
4000	0,50265482	0,56988254	0,02898154	0,56513351	0,03622693	0,57451573	0,02191287
4500	0,56548668	0,64111785	0,03260424	0,6357752	0,0407553	0,64633019	0,02465198
5000	0,62831853	0,71235317	0,03622693	0,70641689	0,04528366	0,71814466	0,02739109
5500	0,69115038	0,78358849	0,03984962	0,77705858	0,04981203	0,78995912	0,0301302
6000	0,75398224	0,8548238	0,04347232	0,84770027	0,05434039	0,86177359	0,03286931
6500	0,81681409	0,92605912	0,04709501	0,91834196	0,05886876	0,93358806	0,03560842
7000	0,87964594	0,99729444	0,0507177	0,98898365	0,06339713	1,00540252	0,03834753
7500	0,9424778	1,06852975	0,05434039	1,05962534	0,06792549	1,07721699	0,04108664
8000	1,00530965	1,13976507	0,05796309	1,13026703	0,07245386	1,14903145	0,04382575
8500	1,0681415	1,21100039	0,06158578	1,20090872	0,07698223	1,22084592	0,04656486
9000	1,13097336	1,2822357	0,06520847	1,27155041	0,08151059	1,29266039	0,04930397
9500	1,19380521	1,35347102	0,06883117	1,3421921	0,08603896	1,36447485	0,05204308
10000	1,25663706	1,42470634	0,07245386	1,41283379	0,09056732	1,43628932	0,05478219
10500	1,31946891	1,49594166	0,07607655	1,48347548	0,09509569	1,50810378	0,0575213
11000	1,38230077	1,56717697	0,07969925	1,55411716	0,09962406	1,57991825	0,0602604
11500	1,44513262	1,63841229	0,08332194	1,62475885	0,10415242	1,65173271	0,06299951
RAC		53,62		42,54		71,49	

Tabla 0-2 Relaciones de caudales en g/s

